



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Jun 6, 2023 – 05:16 pm BST

PDB ID : 6H0Q
BMRB ID : 34301
Title : B1-type ACP domain from module 7 of MLSB
Authors : Moretto, L.; Heylen, R.; Holroyd, N.; Vance, S.; Broadhurst, R.W.
Deposited on : 2018-07-10

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

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

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

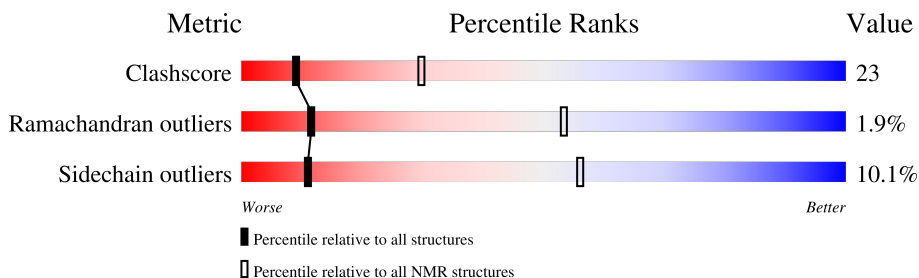
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 87%.

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



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

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

| Mol | Chain | Length | Quality of chain |
|-----|-------|--------|------------------|
| 1 | A | 102 | |

2 Ensemble composition and analysis i

This entry contains 16 models. Model 10 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:5-A:37, A:42-A:73, A:80-A:97 (83) | 0.23 | 10 |

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

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

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

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1517 atoms, of which 761 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Type I modular polyketide synthase.

| Mol | Chain | Residues | Atoms | | | | | Trace |
|-----|-------|----------|-------|-----|-----|-----|-----|-------|
| | | | Total | C | H | N | O | |
| 1 | A | 102 | 1517 | 469 | 761 | 138 | 149 | 0 |

There is a discrepancy between the modelled and reference sequences:

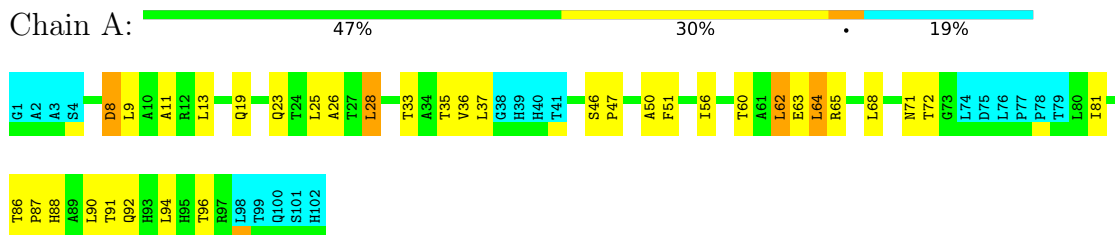
| Chain | Residue | Modelled | Actual | Comment | Reference |
|-------|---------|----------|--------|----------------|------------|
| A | 1 | GLY | - | expression tag | UNP Q6MZ72 |

4 Residue-property plots

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

- Molecule 1: Type I modular polyketide synthase

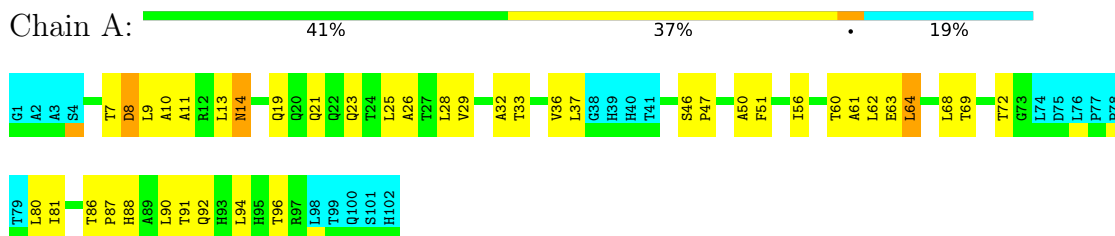


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Type I modular polyketide synthase



4.2.2 Score per residue for model 2

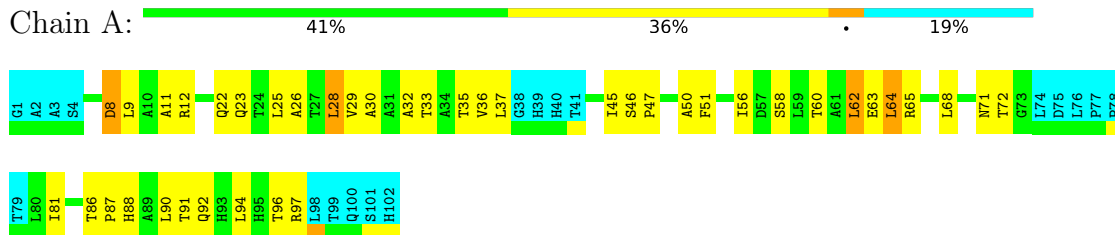
- Molecule 1: Type I modular polyketide synthase





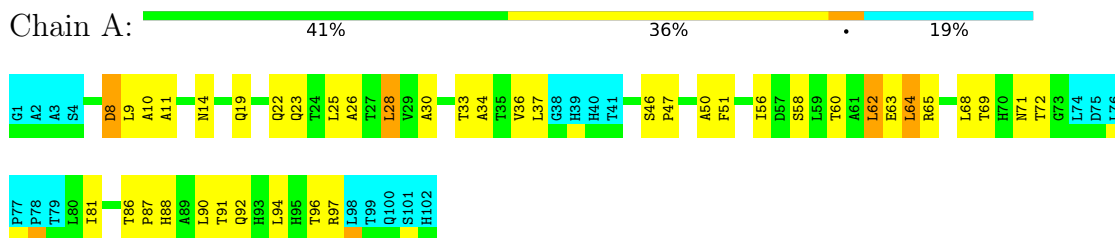
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Type I modular polyketide synthase



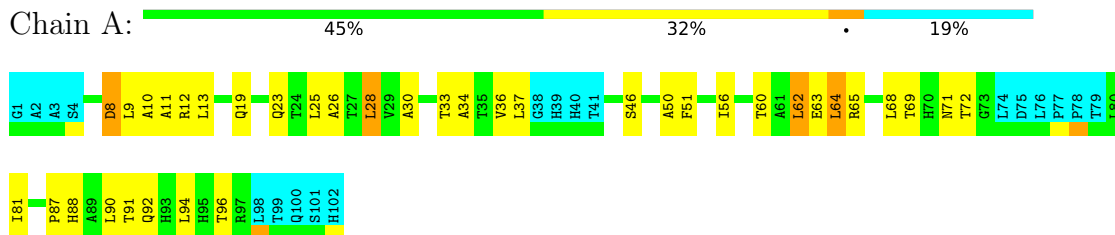
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Type I modular polyketide synthase



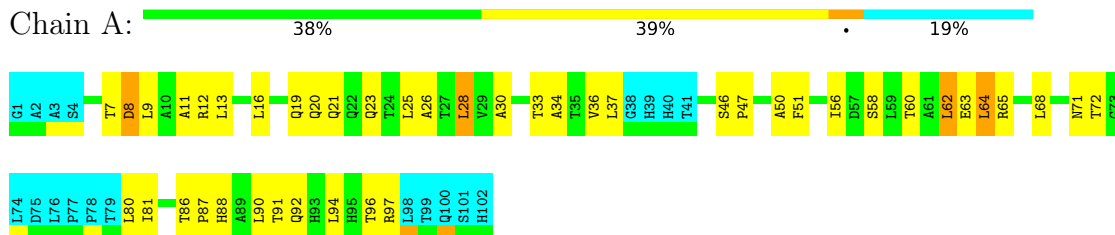
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Type I modular polyketide synthase



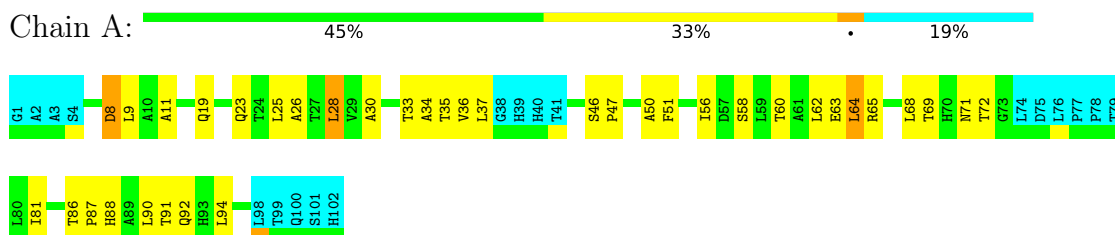
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Type I modular polyketide synthase



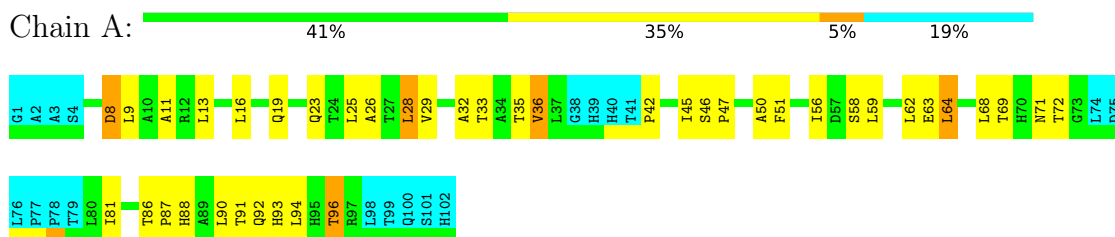
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Type I modular polyketide synthase



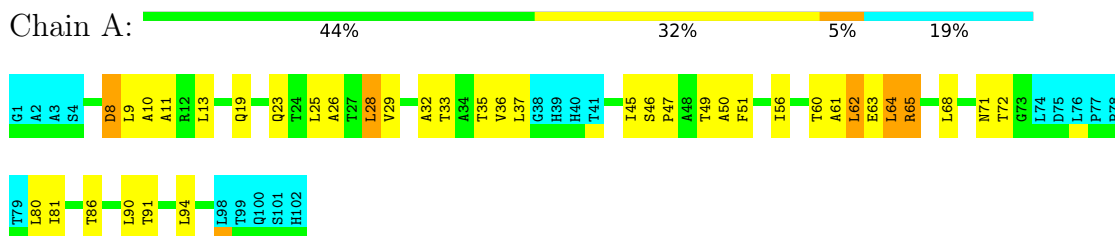
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Type I modular polyketide synthase



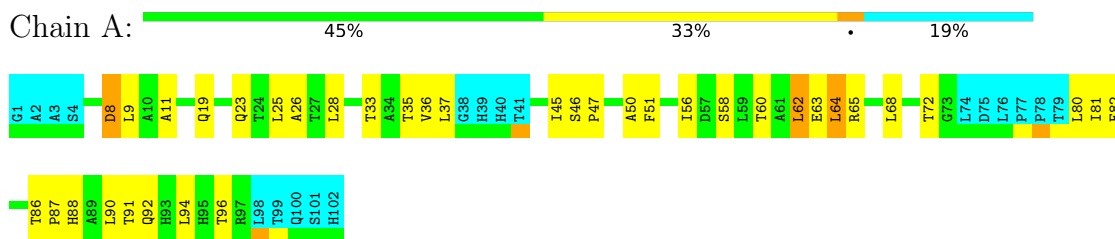
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Type I modular polyketide synthase

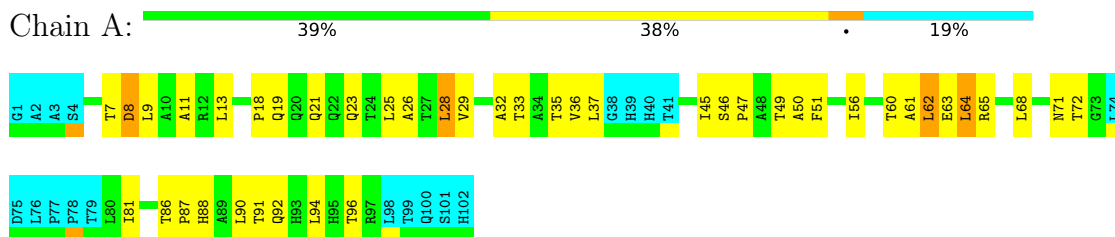


4.2.10 Score per residue for model 10 (medoid)

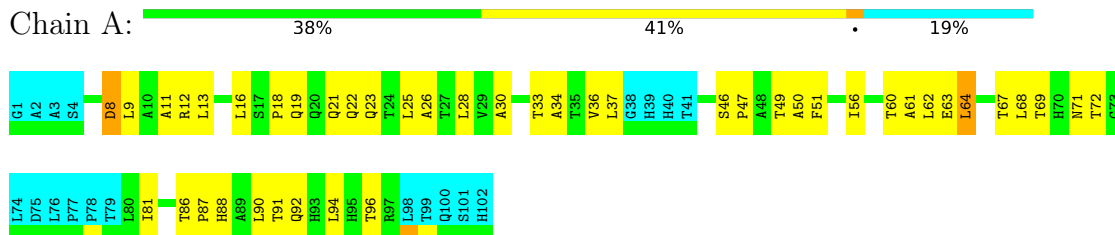
- Molecule 1: Type I modular polyketide synthase



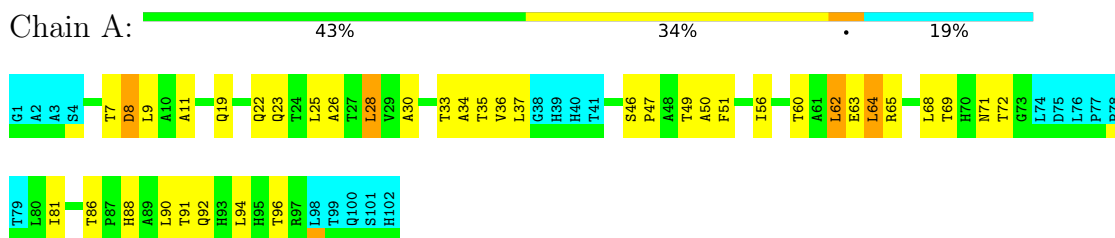
- Molecule 1: Type I modular polyketide synthase



- Molecule 1: Type I modular polyketide synthase



- Molecule 1: Type I modular polyketide synthase



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 50 calculated structures, 16 were deposited, based on the following criterion: *structures with the least restraint violations*.

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

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

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

| | |
|--|----------------|
| Chemical shift file(s) | working_cs.cif |
| Number of chemical shift lists | 1 |
| Total number of shifts | 1101 |
| Number of shifts mapped to atoms | 1101 |
| Number of unparsed shifts | 0 |
| Number of shifts with mapping errors | 0 |
| Number of shifts with mapping warnings | 0 |
| Assignment completeness (well-defined parts) | 87% |

6 Model quality i

6.1 Standard geometry i

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 | 619 | 629 | 624 | 29±2 |
| All | All | 9904 | 10064 | 9984 | 459 |

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 23.

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

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|-----------------|-----------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD13 | 0.91 | 1.40 | 3 | 16 |
| 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG21 | 0.81 | 1.52 | 4 | 16 |
| 1:A:68:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HD13 | 0.75 | 1.56 | 8 | 2 |
| 1:A:33:THR:HA | 1:A:36:VAL:HG22 | 0.73 | 1.60 | 13 | 16 |
| 1:A:51:PHE:CZ | 1:A:90:LEU:HD22 | 0.70 | 2.21 | 1 | 14 |
| 1:A:33:THR:HA | 1:A:36:VAL:CG2 | 0.68 | 2.18 | 8 | 13 |
| 1:A:51:PHE:CE2 | 1:A:90:LEU:HG | 0.67 | 2.24 | 9 | 2 |
| 1:A:64:LEU:O | 1:A:68:LEU:HG | 0.66 | 1.91 | 8 | 11 |
| 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:91:THR:HG23 | 0.65 | 1.68 | 1 | 16 |
| 1:A:36:VAL:HG23 | 1:A:37:LEU:HG | 0.61 | 1.72 | 7 | 15 |
| 1:A:88:HIS:O | 1:A:92:GLN:HG3 | 0.61 | 1.94 | 12 | 15 |
| 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:72:THR:HG22 | 0.61 | 1.71 | 16 | 16 |
| 1:A:68:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HD21 | 0.59 | 1.71 | 2 | 9 |
| 1:A:36:VAL:HG21 | 1:A:56:ILE:HD11 | 0.59 | 1.75 | 6 | 15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|-----------------|-----------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:51:PHE:CD2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 0.59 | 2.31 | 9 | 16 |
| 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB3 | 0.59 | 1.74 | 14 | 16 |
| 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:63:GLU:HG3 | 0.58 | 1.74 | 2 | 15 |
| 1:A:51:PHE:CE2 | 1:A:90:LEU:HD22 | 0.57 | 2.34 | 4 | 9 |
| 1:A:59:LEU:O | 1:A:63:GLU:HG2 | 0.55 | 2.01 | 8 | 1 |
| 1:A:47:PRO:O | 1:A:86:THR:HB | 0.55 | 2.02 | 10 | 14 |
| 1:A:8:ASP:O | 1:A:11:ALA:HB3 | 0.54 | 2.02 | 10 | 16 |
| 1:A:60:THR:O | 1:A:64:LEU:HB2 | 0.54 | 2.03 | 11 | 15 |
| 1:A:19:GLN:O | 1:A:23:GLN:HG3 | 0.54 | 2.02 | 14 | 15 |
| 1:A:68:LEU:CD1 | 1:A:90:LEU:HD13 | 0.53 | 2.32 | 8 | 2 |
| 1:A:12:ARG:O | 1:A:16:LEU:HD23 | 0.53 | 2.02 | 12 | 1 |
| 1:A:65:ARG:HA | 1:A:68:LEU:CD2 | 0.53 | 2.34 | 3 | 2 |
| 1:A:33:THR:CA | 1:A:36:VAL:HG22 | 0.52 | 2.34 | 13 | 15 |
| 1:A:81:ILE:CD1 | 1:A:90:LEU:HD11 | 0.51 | 2.35 | 8 | 2 |
| 1:A:18:PRO:HA | 1:A:21:GLN:OE1 | 0.51 | 2.06 | 12 | 1 |
| 1:A:32:ALA:O | 1:A:35:THR:HB | 0.51 | 2.05 | 8 | 1 |
| 1:A:9:LEU:O | 1:A:13:LEU:HD13 | 0.50 | 2.06 | 5 | 5 |
| 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:63:GLU:CG | 0.50 | 2.37 | 12 | 5 |
| 1:A:68:LEU:HD13 | 1:A:94:LEU:HD11 | 0.50 | 1.84 | 11 | 1 |
| 1:A:68:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HD23 | 0.47 | 1.84 | 7 | 3 |
| 1:A:62:LEU:O | 1:A:65:ARG:HB3 | 0.47 | 2.09 | 9 | 10 |
| 1:A:9:LEU:HB2 | 1:A:71:ASN:O | 0.47 | 2.08 | 3 | 2 |
| 1:A:51:PHE:CE1 | 1:A:64:LEU:HD11 | 0.47 | 2.44 | 9 | 3 |
| 1:A:13:LEU:HG | 1:A:21:GLN:HB3 | 0.47 | 1.86 | 14 | 7 |
| 1:A:46:SER:O | 1:A:87:PRO:HG2 | 0.47 | 2.10 | 6 | 13 |
| 1:A:80:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD11 | 0.47 | 1.86 | 10 | 2 |
| 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:25:LEU:HD21 | 0.47 | 1.87 | 3 | 5 |
| 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:90:LEU:HG | 0.47 | 1.65 | 9 | 1 |
| 1:A:92:GLN:O | 1:A:96:THR:HB | 0.46 | 2.10 | 8 | 1 |
| 1:A:90:LEU:O | 1:A:93:HIS:HB3 | 0.46 | 2.10 | 16 | 1 |
| 1:A:65:ARG:O | 1:A:69:THR:HG22 | 0.46 | 2.11 | 16 | 1 |
| 1:A:51:PHE:HB3 | 1:A:56:ILE:CG1 | 0.46 | 2.41 | 5 | 13 |
| 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:49:THR:OG1 | 0.45 | 2.12 | 9 | 3 |
| 1:A:56:ILE:CG2 | 1:A:61:ALA:HB2 | 0.45 | 2.42 | 1 | 4 |
| 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:CD1 | 0.45 | 2.41 | 3 | 5 |
| 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:71:ASN:CG | 0.45 | 2.33 | 16 | 11 |
| 1:A:36:VAL:CG1 | 1:A:63:GLU:HB2 | 0.45 | 2.42 | 8 | 1 |
| 1:A:68:LEU:CD1 | 1:A:90:LEU:HD23 | 0.45 | 2.42 | 12 | 1 |
| 1:A:29:VAL:O | 1:A:32:ALA:HB3 | 0.44 | 2.13 | 8 | 8 |
| 1:A:51:PHE:CZ | 1:A:90:LEU:HD12 | 0.44 | 2.47 | 8 | 1 |
| 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB2 | 0.44 | 1.88 | 1 | 3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|-----------------|-----------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:68:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:CD2 | 0.44 | 2.42 | 4 | 5 |
| 1:A:72:THR:CG2 | 1:A:94:LEU:HD13 | 0.43 | 2.30 | 16 | 1 |
| 1:A:10:ALA:O | 1:A:14:ASN:HB2 | 0.43 | 2.14 | 4 | 2 |
| 1:A:56:ILE:CG2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 0.42 | 2.38 | 6 | 1 |
| 1:A:46:SER:HB2 | 1:A:49:THR:OG1 | 0.42 | 2.15 | 11 | 1 |
| 1:A:65:ARG:HA | 1:A:68:LEU:HD12 | 0.42 | 1.91 | 15 | 1 |
| 1:A:68:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:CD1 | 0.42 | 2.41 | 9 | 1 |
| 1:A:51:PHE:HB3 | 1:A:56:ILE:CB | 0.42 | 2.44 | 8 | 1 |
| 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD11 | 0.42 | 1.91 | 1 | 6 |
| 1:A:65:ARG:NH1 | 1:A:69:THR:HG21 | 0.42 | 2.29 | 7 | 1 |
| 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:45:ILE:HB | 0.42 | 1.92 | 3 | 1 |
| 1:A:13:LEU:O | 1:A:21:GLN:HG2 | 0.41 | 2.15 | 12 | 1 |
| 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:20:GLN:HB3 | 0.41 | 1.92 | 6 | 1 |
| 1:A:30:ALA:O | 1:A:34:ALA:N | 0.41 | 2.54 | 5 | 7 |
| 1:A:13:LEU:O | 1:A:16:LEU:HB2 | 0.40 | 2.16 | 8 | 1 |
| 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:71:ASN:OD1 | 0.40 | 2.17 | 12 | 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 | 83/102 (81%) | 77±1 (92±1%) | 5±1 (6±2%) | 2±0 (2±1%) | 11 | 53 |
| All | All | 1328/1632 (81%) | 1228 (92%) | 75 (6%) | 25 (2%) | 11 | 53 |

All 3 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 | 50 | ALA | 16 |
| 1 | A | 58 | SER | 8 |
| 1 | A | 18 | PRO | 1 |

6.3.2 Protein sidechains [i](#)

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

| Mol | Chain | Analysed | Rotameric | Outliers | Percentiles | |
|-----|-------|-----------------|--------------|-------------|-------------|----|
| 1 | A | 67/82 (82%) | 60±1 (90±1%) | 7±1 (10±1%) | 11 | 56 |
| All | All | 1072/1312 (82%) | 964 (90%) | 108 (10%) | 11 | 56 |

All 14 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 | 8 | ASP | 16 |
| 1 | A | 28 | LEU | 16 |
| 1 | A | 62 | LEU | 16 |
| 1 | A | 64 | LEU | 16 |
| 1 | A | 96 | THR | 12 |
| 1 | A | 35 | THR | 8 |
| 1 | A | 69 | THR | 6 |
| 1 | A | 12 | ARG | 5 |
| 1 | A | 14 | ASN | 4 |
| 1 | A | 22 | GLN | 4 |
| 1 | A | 80 | LEU | 2 |
| 1 | A | 36 | VAL | 1 |
| 1 | A | 65 | ARG | 1 |
| 1 | A | 46 | SER | 1 |

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no monosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation i

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 87% for the well-defined parts and 83% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *mH0ACPb_180710a.csdep*

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 | 1101 |
| Number of shifts mapped to atoms | 1101 |
| Number of unparsed shifts | 0 |
| Number of shifts with mapping errors | 0 |
| Number of shifts with mapping warnings | 0 |
| Number of shift outliers (ShiftChecker) | 1 |

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 |
|------------------------|----------|---------------------------------|-------------------------|
| $^{13}\text{C}_\alpha$ | 101 | -0.16 ± 0.15 | None needed (< 0.5 ppm) |
| $^{13}\text{C}_\beta$ | 96 | 0.31 ± 0.07 | None needed (< 0.5 ppm) |
| $^{13}\text{C}'$ | 87 | -0.12 ± 0.10 | None needed (< 0.5 ppm) |
| ^{15}N | 90 | 0.28 ± 0.52 | None needed (< 0.5 ppm) |

7.1.3 Completeness of resonance assignments i

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 87%, i.e. 948 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1095. 0 out of 16 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

| | Total | ^1H | ^{13}C | ^{15}N |
|-----------|---------------|---------------|-----------------|-----------------|
| Backbone | 401/408 (98%) | 163/164 (99%) | 160/166 (96%) | 78/78 (100%) |
| Sidechain | 517/627 (82%) | 349/415 (84%) | 164/193 (85%) | 4/19 (21%) |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| | Total | ¹H | ¹³C | ¹⁵N |
|----------|----------------|----------------------|-----------------------|-----------------------|
| Aromatic | 30/60 (50%) | 15/30 (50%) | 15/20 (75%) | 0/10 (0%) |
| Overall | 948/1095 (87%) | 527/609 (87%) | 339/379 (89%) | 82/107 (77%) |

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 83%, i.e. 1100 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1324. 0 out of 19 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

| | Total | ¹H | ¹³C | ¹⁵N |
|-----------|-----------------|----------------------|-----------------------|-----------------------|
| Backbone | 471/501 (94%) | 193/202 (96%) | 188/204 (92%) | 90/95 (95%) |
| Sidechain | 593/739 (80%) | 399/490 (81%) | 190/229 (83%) | 4/20 (20%) |
| Aromatic | 36/84 (43%) | 18/42 (43%) | 18/26 (69%) | 0/16 (0%) |
| Overall | 1100/1324 (83%) | 610/734 (83%) | 396/459 (86%) | 94/131 (72%) |

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

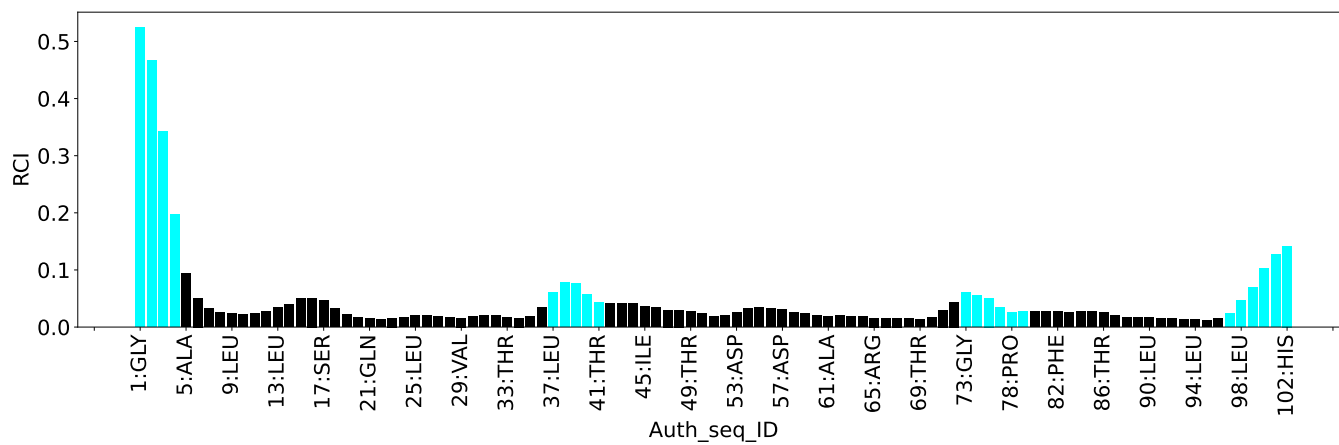
The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

| List Id | Chain | Res | Type | Atom | Shift, ppm | Expected range, ppm | Z-score |
|---------|-------|-----|------|------|------------|---------------------|---------|
| 1 | A | 33 | THR | HG1 | 4.55 | 0.08 – 2.19 | 16.2 |

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

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

Random coil index (RCI) for chain A:



8 NMR restraints analysis

8.1 Conformationally restricting restraints

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

| Description | Value |
|--|-------|
| Total distance restraints | 2531 |
| Intra-residue ($ i-j =0$) | 987 |
| Sequential ($ i-j =1$) | 667 |
| Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$) | 531 |
| Long range ($ i-j \geq 5$) | 346 |
| Inter-chain | 0 |
| Hydrogen bond restraints | 0 |
| Disulfide bond restraints | 0 |
| Total dihedral-angle restraints | 0 |
| Number of unmapped restraints | 0 |
| Number of restraints per residue | 24.8 |
| Number of long range restraints per residue ¹ | 3.4 |

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

8.2 Residual restraint violations

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

8.2.1 Average number of distance violations per model

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

| Bins (Å) | Average number of violations per model | Max (Å) |
|------------------|--|---------|
| 0.1-0.2 (Small) | 134.5 | 0.2 |
| 0.2-0.5 (Medium) | 284.5 | 0.5 |
| >0.5 (Large) | 318.1 | 3.81 |

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

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

9 Distance violation analysis

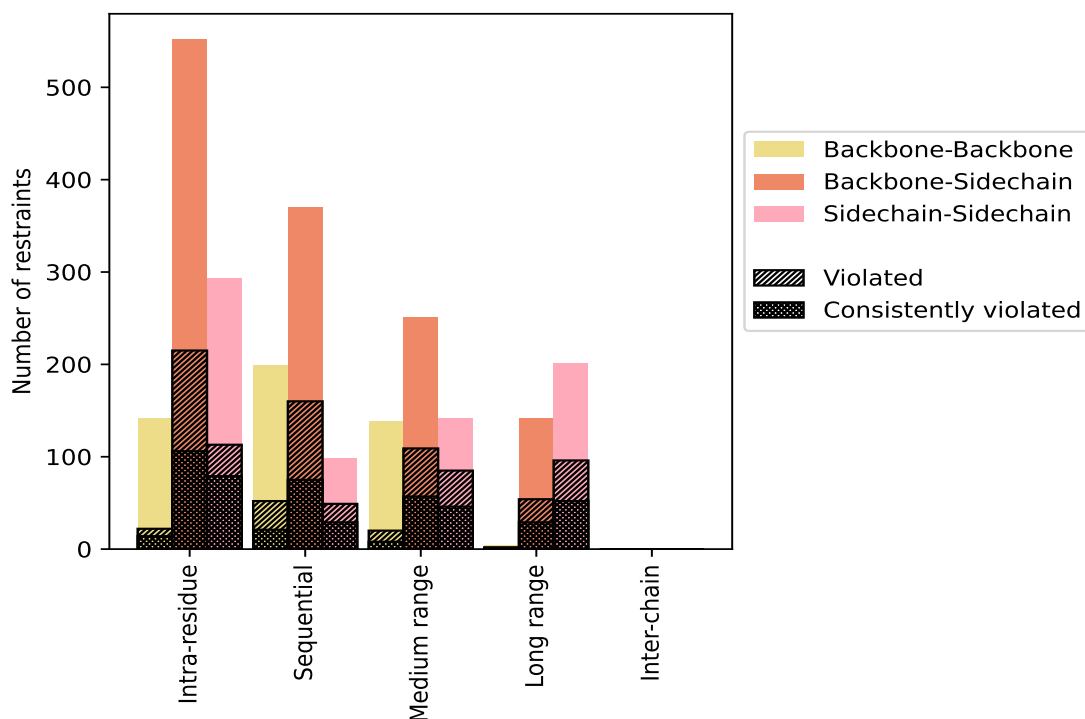
9.1 Summary of distance violations

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

| Restrains type | Count | % ¹ | Violated ³ | | | Consistently Violated ⁴ | | |
|---|-------------|----------------|-----------------------|----------------|----------------|------------------------------------|----------------|----------------|
| | | | Count | % ² | % ¹ | Count | % ² | % ¹ |
| Intra-residue ($i-j =0$) | 987 | 39.0 | 350 | 35.5 | 13.8 | 199 | 20.2 | 7.9 |
| Backbone-Backbone | 142 | 5.6 | 22 | 15.5 | 0.9 | 14 | 9.9 | 0.6 |
| Backbone-Sidechain | 552 | 21.8 | 215 | 38.9 | 8.5 | 106 | 19.2 | 4.2 |
| Sidechain-Sidechain | 293 | 11.6 | 113 | 38.6 | 4.5 | 79 | 27.0 | 3.1 |
| Sequential ($i-j =1$) | 667 | 26.4 | 261 | 39.1 | 10.3 | 125 | 18.7 | 4.9 |
| Backbone-Backbone | 199 | 7.9 | 52 | 26.1 | 2.1 | 21 | 10.6 | 0.8 |
| Backbone-Sidechain | 370 | 14.6 | 160 | 43.2 | 6.3 | 75 | 20.3 | 3.0 |
| Sidechain-Sidechain | 98 | 3.9 | 49 | 50.0 | 1.9 | 29 | 29.6 | 1.1 |
| Medium range ($i-j >1$ & $i-j <5$) | 531 | 21.0 | 214 | 40.3 | 8.5 | 111 | 20.9 | 4.4 |
| Backbone-Backbone | 138 | 5.5 | 20 | 14.5 | 0.8 | 8 | 5.8 | 0.3 |
| Backbone-Sidechain | 251 | 9.9 | 109 | 43.4 | 4.3 | 57 | 22.7 | 2.3 |
| Sidechain-Sidechain | 142 | 5.6 | 85 | 59.9 | 3.4 | 46 | 32.4 | 1.8 |
| Long range ($i-j \geq 5$) | 346 | 13.7 | 152 | 43.9 | 6.0 | 82 | 23.7 | 3.2 |
| Backbone-Backbone | 4 | 0.2 | 2 | 50.0 | 0.1 | 1 | 25.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 141 | 5.6 | 54 | 38.3 | 2.1 | 29 | 20.6 | 1.1 |
| Sidechain-Sidechain | 201 | 7.9 | 96 | 47.8 | 3.8 | 52 | 25.9 | 2.1 |
| Inter-chain | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Backbone | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Sidechain-Sidechain | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Hydrogen bond | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Disulfide bond | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Total | 2531 | 100.0 | 977 | 38.6 | 38.6 | 517 | 20.4 | 20.4 |
| Backbone-Backbone | 483 | 19.1 | 96 | 19.9 | 3.8 | 44 | 9.1 | 1.7 |
| Backbone-Sidechain | 1314 | 51.9 | 538 | 40.9 | 21.3 | 267 | 20.3 | 10.5 |
| Sidechain-Sidechain | 734 | 29.0 | 343 | 46.7 | 13.6 | 206 | 28.1 | 8.1 |

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

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



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

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

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

| Model ID | Number of violations | | | | | | Mean (Å) | Max (Å) | SD ⁶ (Å) | Median (Å) |
|----------|----------------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-------|----------|---------|---------------------|------------|
| | IR ¹ | SQ ² | MR ³ | LR ⁴ | IC ⁵ | Total | | | | |
| 1 | 266 | 194 | 156 | 121 | 0 | 737 | 0.55 | 3.53 | 0.45 | 0.43 |
| 2 | 267 | 190 | 166 | 113 | 0 | 736 | 0.55 | 3.17 | 0.44 | 0.44 |
| 3 | 271 | 190 | 162 | 121 | 0 | 744 | 0.55 | 3.25 | 0.46 | 0.43 |
| 4 | 270 | 189 | 158 | 116 | 0 | 733 | 0.56 | 3.23 | 0.44 | 0.45 |
| 5 | 261 | 193 | 161 | 116 | 0 | 731 | 0.57 | 3.56 | 0.46 | 0.45 |
| 6 | 264 | 194 | 153 | 114 | 0 | 725 | 0.57 | 3.71 | 0.46 | 0.45 |
| 7 | 265 | 190 | 166 | 117 | 0 | 738 | 0.55 | 3.65 | 0.45 | 0.44 |
| 8 | 262 | 180 | 157 | 112 | 0 | 711 | 0.56 | 3.46 | 0.44 | 0.45 |
| 9 | 273 | 197 | 163 | 118 | 0 | 751 | 0.55 | 3.14 | 0.44 | 0.44 |
| 10 | 270 | 198 | 165 | 116 | 0 | 749 | 0.56 | 3.12 | 0.44 | 0.45 |
| 11 | 264 | 186 | 164 | 114 | 0 | 728 | 0.57 | 3.21 | 0.46 | 0.44 |

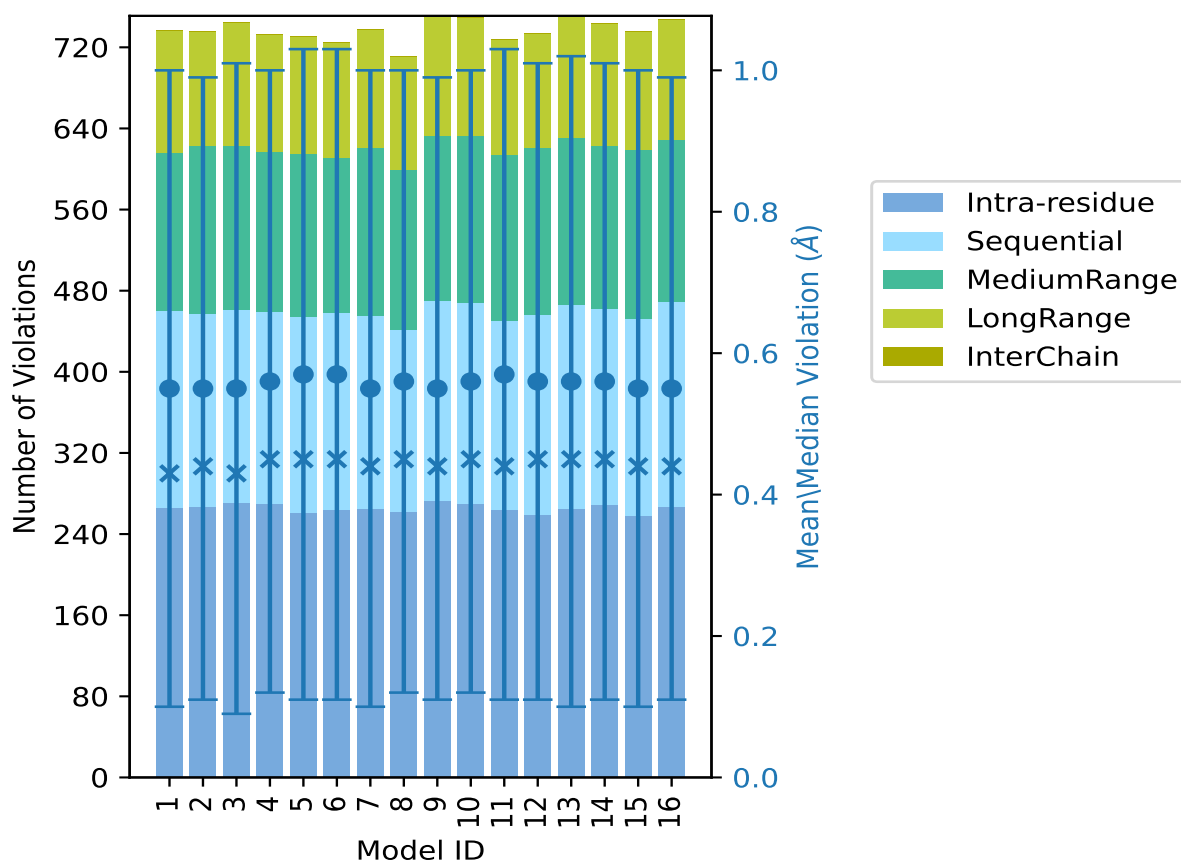
Continued on next page...

Continued from previous page...

| Model ID | Number of violations | | | | | | Mean (Å) | Max (Å) | SD ⁶ (Å) | Median (Å) |
|----------|----------------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-------|----------|---------|---------------------|------------|
| | IR ¹ | SQ ² | MR ³ | LR ⁴ | IC ⁵ | Total | | | | |
| 12 | 259 | 197 | 165 | 113 | 0 | 734 | 0.56 | 3.3 | 0.45 | 0.45 |
| 13 | 265 | 201 | 165 | 119 | 0 | 750 | 0.56 | 3.81 | 0.46 | 0.45 |
| 14 | 269 | 193 | 161 | 120 | 0 | 743 | 0.56 | 3.36 | 0.45 | 0.45 |
| 15 | 258 | 194 | 167 | 117 | 0 | 736 | 0.55 | 3.3 | 0.45 | 0.44 |
| 16 | 267 | 202 | 160 | 118 | 0 | 747 | 0.55 | 3.38 | 0.44 | 0.44 |

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

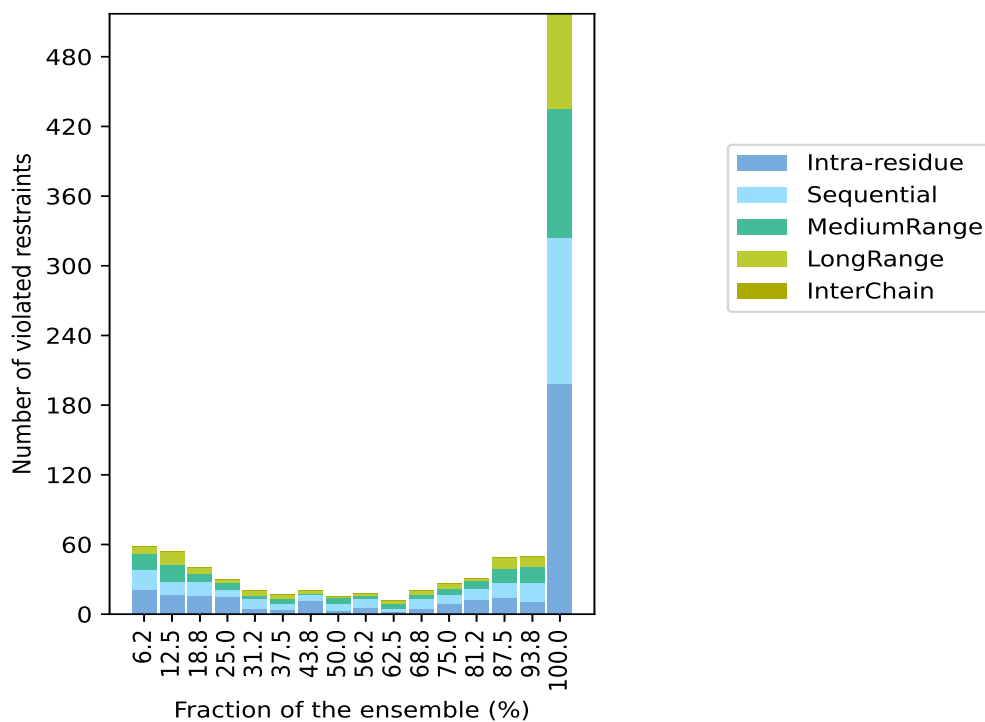
9.3 Distance violation statistics for the ensemble

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, 1554(IR:637, SQ:406, MR:317, LR:194, 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 | % |
| 21 | 17 | 14 | 6 | 0 | 58 | 1 | 6.2 |
| 17 | 11 | 14 | 12 | 0 | 54 | 2 | 12.5 |
| 16 | 12 | 7 | 5 | 0 | 40 | 3 | 18.8 |
| 15 | 6 | 6 | 3 | 0 | 30 | 4 | 25.0 |
| 5 | 8 | 3 | 4 | 0 | 20 | 5 | 31.2 |
| 4 | 5 | 4 | 4 | 0 | 17 | 6 | 37.5 |
| 11 | 6 | 1 | 2 | 0 | 20 | 7 | 43.8 |
| 3 | 6 | 5 | 1 | 0 | 15 | 8 | 50.0 |
| 6 | 7 | 3 | 2 | 0 | 18 | 9 | 56.2 |
| 2 | 3 | 4 | 3 | 0 | 12 | 10 | 62.5 |
| 5 | 8 | 4 | 3 | 0 | 20 | 11 | 68.8 |
| 9 | 8 | 5 | 4 | 0 | 26 | 12 | 75.0 |
| 12 | 10 | 7 | 2 | 0 | 31 | 13 | 81.2 |
| 14 | 13 | 12 | 10 | 0 | 49 | 14 | 87.5 |
| 11 | 16 | 14 | 9 | 0 | 50 | 15 | 93.8 |
| 199 | 125 | 111 | 82 | 0 | 517 | 16 | 100.0 |

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

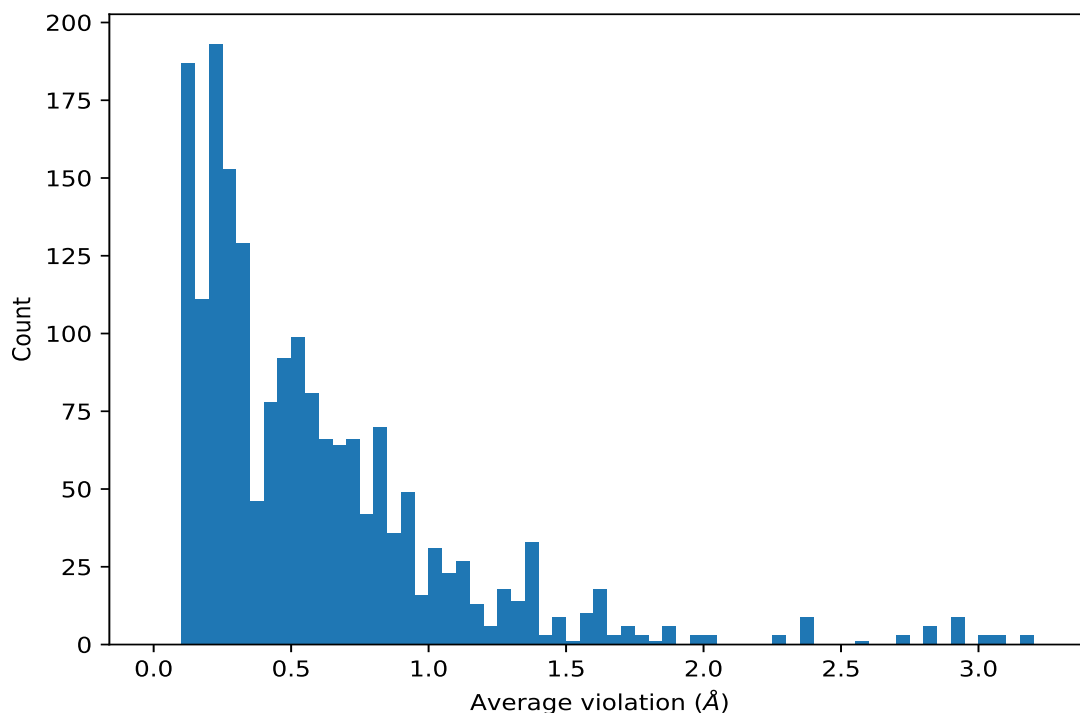
9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble [i](#)



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) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD21 | 16 | 3.17 | 0.1 | 3.15 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD22 | 16 | 3.17 | 0.1 | 3.15 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD23 | 16 | 3.17 | 0.1 | 3.15 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:95:HIS:HD2 | 16 | 3.09 | 0.47 | 3.26 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:95:HIS:HD2 | 16 | 3.09 | 0.47 | 3.26 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:95:HIS:HD2 | 16 | 3.09 | 0.47 | 3.26 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HB2 | 16 | 3.04 | 0.01 | 3.04 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HB2 | 16 | 3.04 | 0.01 | 3.04 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HB2 | 16 | 3.04 | 0.01 | 3.04 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD11 | 16 | 2.93 | 0.02 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD12 | 16 | 2.93 | 0.02 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD13 | 16 | 2.93 | 0.02 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD11 | 16 | 2.93 | 0.02 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD12 | 16 | 2.93 | 0.02 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD13 | 16 | 2.93 | 0.02 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD11 | 16 | 2.93 | 0.02 | 2.93 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD12 | 16 | 2.93 | 0.02 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD13 | 16 | 2.93 | 0.02 | 2.93 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:32:ALA:HA | 16 | 2.82 | 0.03 | 2.82 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:32:ALA:HA | 16 | 2.82 | 0.03 | 2.82 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:32:ALA:HA | 16 | 2.82 | 0.03 | 2.82 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:101:SER:HB2 | 16 | 2.82 | 0.65 | 3.1 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:101:SER:HB2 | 16 | 2.82 | 0.65 | 3.1 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:101:SER:HB2 | 16 | 2.82 | 0.65 | 3.1 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:33:THR:H | 16 | 2.72 | 0.03 | 2.73 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:33:THR:H | 16 | 2.72 | 0.03 | 2.73 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:33:THR:H | 16 | 2.72 | 0.03 | 2.73 |
| (2,1287) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:68:LEU:HB3 | 16 | 2.58 | 0.11 | 2.62 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB1 | 16 | 2.38 | 0.06 | 2.37 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB2 | 16 | 2.38 | 0.06 | 2.37 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB3 | 16 | 2.38 | 0.06 | 2.37 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB1 | 16 | 2.38 | 0.06 | 2.37 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB2 | 16 | 2.38 | 0.06 | 2.37 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB3 | 16 | 2.38 | 0.06 | 2.37 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB1 | 16 | 2.38 | 0.06 | 2.37 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB2 | 16 | 2.38 | 0.06 | 2.37 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB3 | 16 | 2.38 | 0.06 | 2.37 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HA | 16 | 2.3 | 0.0 | 2.3 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HA | 16 | 2.3 | 0.0 | 2.3 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HA | 16 | 2.3 | 0.0 | 2.3 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 16 | 1.96 | 0.07 | 1.94 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 16 | 1.96 | 0.07 | 1.94 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 16 | 1.96 | 0.07 | 1.94 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD21 | 16 | 1.86 | 0.07 | 1.87 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD22 | 16 | 1.86 | 0.07 | 1.87 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD23 | 16 | 1.86 | 0.07 | 1.87 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD11 | 16 | 1.85 | 0.01 | 1.85 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD12 | 16 | 1.85 | 0.01 | 1.85 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD13 | 16 | 1.85 | 0.01 | 1.85 |
| (2,1302) | 1:A:66:ASN:HB3 | 1:A:65:ARG:H | 16 | 1.84 | 0.06 | 1.86 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:73:GLY:HA2 | 16 | 1.76 | 0.52 | 1.94 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:73:GLY:HA2 | 16 | 1.76 | 0.52 | 1.94 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:73:GLY:HA2 | 16 | 1.76 | 0.52 | 1.94 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG11 | 16 | 1.74 | 0.06 | 1.74 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG12 | 16 | 1.74 | 0.06 | 1.74 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG13 | 16 | 1.74 | 0.06 | 1.74 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 16 | 1.72 | 0.65 | 1.33 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 16 | 1.72 | 0.65 | 1.33 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 16 | 1.72 | 0.65 | 1.33 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:H | 16 | 1.66 | 0.01 | 1.66 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:H | 16 | 1.66 | 0.01 | 1.66 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:H | 16 | 1.66 | 0.01 | 1.66 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:25:LEU:HB3 | 16 | 1.65 | 0.02 | 1.66 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:25:LEU:HB3 | 16 | 1.65 | 0.02 | 1.66 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:25:LEU:HB3 | 16 | 1.65 | 0.02 | 1.66 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:3:ALA:HA | 16 | 1.65 | 0.55 | 1.72 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:3:ALA:HA | 16 | 1.65 | 0.55 | 1.72 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:3:ALA:HA | 16 | 1.65 | 0.55 | 1.72 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 16 | 1.63 | 0.16 | 1.63 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 16 | 1.63 | 0.16 | 1.63 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 16 | 1.63 | 0.16 | 1.63 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD21 | 16 | 1.6 | 0.04 | 1.6 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD22 | 16 | 1.6 | 0.04 | 1.6 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD23 | 16 | 1.6 | 0.04 | 1.6 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD21 | 16 | 1.6 | 0.04 | 1.6 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD22 | 16 | 1.6 | 0.04 | 1.6 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD23 | 16 | 1.6 | 0.04 | 1.6 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD21 | 16 | 1.6 | 0.04 | 1.6 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD22 | 16 | 1.6 | 0.04 | 1.6 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD23 | 16 | 1.6 | 0.04 | 1.6 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:ASP:HB3 | 16 | 1.57 | 0.09 | 1.6 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:ASP:HB3 | 16 | 1.57 | 0.09 | 1.6 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:ASP:HB3 | 16 | 1.57 | 0.09 | 1.6 |
| (2,1322) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HG | 16 | 1.56 | 0.62 | 1.35 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG21 | 16 | 1.46 | 0.07 | 1.44 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG22 | 16 | 1.46 | 0.07 | 1.44 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG23 | 16 | 1.46 | 0.07 | 1.44 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG21 | 16 | 1.46 | 0.07 | 1.44 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG22 | 16 | 1.46 | 0.07 | 1.44 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG23 | 16 | 1.46 | 0.07 | 1.44 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG21 | 16 | 1.46 | 0.07 | 1.44 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG22 | 16 | 1.46 | 0.07 | 1.44 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG23 | 16 | 1.46 | 0.07 | 1.44 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD11 | 16 | 1.43 | 0.3 | 1.52 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD12 | 16 | 1.43 | 0.3 | 1.52 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD13 | 16 | 1.43 | 0.3 | 1.52 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG11 | 16 | 1.38 | 0.01 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG12 | 16 | 1.38 | 0.01 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG13 | 16 | 1.38 | 0.01 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG11 | 16 | 1.38 | 0.01 | 1.38 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG12 | 16 | 1.38 | 0.01 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG13 | 16 | 1.38 | 0.01 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG11 | 16 | 1.38 | 0.01 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG12 | 16 | 1.38 | 0.01 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG13 | 16 | 1.38 | 0.01 | 1.38 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB1 | 16 | 1.37 | 0.08 | 1.36 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB2 | 16 | 1.37 | 0.08 | 1.36 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB3 | 16 | 1.37 | 0.08 | 1.36 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB1 | 16 | 1.37 | 0.08 | 1.36 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB2 | 16 | 1.37 | 0.08 | 1.36 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB3 | 16 | 1.37 | 0.08 | 1.36 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB1 | 16 | 1.37 | 0.08 | 1.36 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB2 | 16 | 1.37 | 0.08 | 1.36 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB3 | 16 | 1.37 | 0.08 | 1.36 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:61:ALA:HA | 16 | 1.36 | 0.04 | 1.38 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:61:ALA:HA | 16 | 1.36 | 0.04 | 1.38 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:61:ALA:HA | 16 | 1.36 | 0.04 | 1.38 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD11 | 16 | 1.35 | 0.03 | 1.36 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD12 | 16 | 1.35 | 0.03 | 1.36 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD13 | 16 | 1.35 | 0.03 | 1.36 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD11 | 16 | 1.35 | 0.03 | 1.36 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD12 | 16 | 1.35 | 0.03 | 1.36 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD13 | 16 | 1.35 | 0.03 | 1.36 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD11 | 16 | 1.35 | 0.03 | 1.36 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD12 | 16 | 1.35 | 0.03 | 1.36 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD13 | 16 | 1.35 | 0.03 | 1.36 |
| (2,1558) | 1:A:82:PHE:HA | 1:A:85:PRO:HB2 | 16 | 1.33 | 0.19 | 1.35 |
| (2,1321) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HB2 | 16 | 1.32 | 0.41 | 1.19 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD11 | 1:A:95:HIS:HB2 | 16 | 1.31 | 0.25 | 1.33 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD12 | 1:A:95:HIS:HB2 | 16 | 1.31 | 0.25 | 1.33 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD13 | 1:A:95:HIS:HB2 | 16 | 1.31 | 0.25 | 1.33 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 16 | 1.31 | 0.03 | 1.31 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 16 | 1.31 | 0.03 | 1.31 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 16 | 1.31 | 0.03 | 1.31 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD11 | 16 | 1.3 | 0.06 | 1.31 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD12 | 16 | 1.3 | 0.06 | 1.31 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD13 | 16 | 1.3 | 0.06 | 1.31 |
| (2,1672) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:90:LEU:HB2 | 16 | 1.3 | 0.12 | 1.34 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:33:THR:HG1 | 16 | 1.29 | 0.05 | 1.3 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:33:THR:HG1 | 16 | 1.29 | 0.05 | 1.3 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:33:THR:HG1 | 16 | 1.29 | 0.05 | 1.3 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:87:PRO:HA | 16 | 1.29 | 0.09 | 1.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:87:PRO:HA | 16 | 1.29 | 0.09 | 1.28 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:87:PRO:HA | 16 | 1.29 | 0.09 | 1.28 |
| (2,1269) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HG | 16 | 1.28 | 0.05 | 1.31 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:51:PHE:HE1 | 16 | 1.28 | 0.09 | 1.27 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:51:PHE:HE2 | 16 | 1.28 | 0.09 | 1.27 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:51:PHE:HE1 | 16 | 1.28 | 0.09 | 1.27 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:51:PHE:HE2 | 16 | 1.28 | 0.09 | 1.27 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:51:PHE:HE1 | 16 | 1.28 | 0.09 | 1.27 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:51:PHE:HE2 | 16 | 1.28 | 0.09 | 1.27 |
| (2,1163) | 1:A:60:THR:HA | 1:A:64:LEU:HB3 | 16 | 1.25 | 0.04 | 1.26 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:4:SER:HB2 | 16 | 1.2 | 0.24 | 1.34 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:4:SER:HB2 | 16 | 1.2 | 0.24 | 1.34 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:4:SER:HB2 | 16 | 1.2 | 0.24 | 1.34 |
| (2,171) | 1:A:53:ASP:HB2 | 1:A:51:PHE:HA | 16 | 1.19 | 0.23 | 1.12 |
| (2,944) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:47:PRO:HB2 | 16 | 1.18 | 0.02 | 1.17 |
| (2,493) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:23:GLN:H | 16 | 1.17 | 0.13 | 1.19 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 16 | 1.16 | 0.13 | 1.16 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 16 | 1.16 | 0.13 | 1.16 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 16 | 1.16 | 0.13 | 1.16 |
| (2,285) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:21:GLN:HG2 | 16 | 1.16 | 0.09 | 1.17 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG21 | 16 | 1.16 | 0.49 | 1.19 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG22 | 16 | 1.16 | 0.49 | 1.19 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG23 | 16 | 1.16 | 0.49 | 1.19 |
| (1,259) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:56:ILE:HG13 | 16 | 1.14 | 0.05 | 1.15 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG21 | 16 | 1.14 | 0.08 | 1.15 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG22 | 16 | 1.14 | 0.08 | 1.15 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG23 | 16 | 1.14 | 0.08 | 1.15 |
| (1,384) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:71:ASN:H | 16 | 1.13 | 0.2 | 1.19 |
| (2,893) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:42:PRO:HG3 | 16 | 1.12 | 0.15 | 1.02 |
| (2,15) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:22:GLN:HA | 16 | 1.12 | 0.06 | 1.13 |
| (2,1478) | 1:A:75:ASP:HB2 | 1:A:74:LEU:HB2 | 16 | 1.12 | 0.18 | 1.1 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG21 | 16 | 1.11 | 0.12 | 1.1 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG22 | 16 | 1.11 | 0.12 | 1.1 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG23 | 16 | 1.11 | 0.12 | 1.1 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD11 | 16 | 1.11 | 0.06 | 1.11 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD12 | 16 | 1.11 | 0.06 | 1.11 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD13 | 16 | 1.11 | 0.06 | 1.11 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD11 | 16 | 1.11 | 0.06 | 1.11 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD12 | 16 | 1.11 | 0.06 | 1.11 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD13 | 16 | 1.11 | 0.06 | 1.11 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD11 | 16 | 1.11 | 0.06 | 1.11 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD12 | 16 | 1.11 | 0.06 | 1.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD13 | 16 | 1.11 | 0.06 | 1.11 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD11 | 16 | 1.11 | 0.03 | 1.11 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD12 | 16 | 1.11 | 0.03 | 1.11 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD13 | 16 | 1.11 | 0.03 | 1.11 |
| (2,218) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:13:LEU:HB2 | 16 | 1.1 | 0.03 | 1.1 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HG | 16 | 1.1 | 0.02 | 1.1 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HG | 16 | 1.1 | 0.02 | 1.1 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HG | 16 | 1.1 | 0.02 | 1.1 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:92:GLN:H | 16 | 1.08 | 0.28 | 1.0 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:92:GLN:H | 16 | 1.08 | 0.28 | 1.0 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:92:GLN:H | 16 | 1.08 | 0.28 | 1.0 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:25:LEU:HA | 16 | 1.08 | 0.03 | 1.08 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:25:LEU:HA | 16 | 1.08 | 0.03 | 1.08 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:25:LEU:HA | 16 | 1.08 | 0.03 | 1.08 |
| (2,620) | 1:A:28:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HB | 16 | 1.07 | 0.01 | 1.08 |
| (1,605) | 1:A:43:GLU:H | 1:A:42:PRO:HD2 | 16 | 1.07 | 0.14 | 1.12 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:H | 16 | 1.07 | 0.02 | 1.08 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:H | 16 | 1.07 | 0.02 | 1.08 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 16 | 1.07 | 0.02 | 1.08 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:33:THR:H | 16 | 1.06 | 0.02 | 1.06 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:33:THR:H | 16 | 1.06 | 0.02 | 1.06 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:33:THR:H | 16 | 1.06 | 0.02 | 1.06 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:12:ARG:HB3 | 16 | 1.05 | 0.08 | 1.04 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:12:ARG:HB3 | 16 | 1.05 | 0.08 | 1.04 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:12:ARG:HB3 | 16 | 1.05 | 0.08 | 1.04 |
| (2,1156) | 1:A:60:THR:HB | 1:A:59:LEU:HB3 | 16 | 1.04 | 0.05 | 1.02 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD21 | 16 | 1.02 | 0.07 | 1.02 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD22 | 16 | 1.02 | 0.07 | 1.02 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD23 | 16 | 1.02 | 0.07 | 1.02 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD21 | 16 | 1.02 | 0.07 | 1.02 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD22 | 16 | 1.02 | 0.07 | 1.02 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD23 | 16 | 1.02 | 0.07 | 1.02 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD21 | 16 | 1.02 | 0.07 | 1.02 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD22 | 16 | 1.02 | 0.07 | 1.02 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD23 | 16 | 1.02 | 0.07 | 1.02 |
| (1,326) | 1:A:61:ALA:H | 1:A:64:LEU:HB3 | 16 | 1.01 | 0.06 | 1.01 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB1 | 1:A:49:THR:HB | 16 | 1.01 | 0.04 | 1.0 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB2 | 1:A:49:THR:HB | 16 | 1.01 | 0.04 | 1.0 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB3 | 1:A:49:THR:HB | 16 | 1.01 | 0.04 | 1.0 |
| (2,216) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:12:ARG:HB2 | 16 | 1.01 | 0.1 | 1.0 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:56:ILE:H | 16 | 1.0 | 0.03 | 1.0 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:56:ILE:H | 16 | 1.0 | 0.03 | 1.0 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:56:ILE:H | 16 | 1.0 | 0.03 | 1.0 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:70:HIS:H | 16 | 1.0 | 0.04 | 1.0 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:70:HIS:H | 16 | 1.0 | 0.04 | 1.0 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:70:HIS:H | 16 | 1.0 | 0.04 | 1.0 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HB3 | 16 | 0.99 | 0.02 | 1.0 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HB3 | 16 | 0.99 | 0.02 | 1.0 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HB3 | 16 | 0.99 | 0.02 | 1.0 |
| (2,444) | 1:A:21:GLN:HG3 | 1:A:21:GLN:H | 16 | 0.99 | 0.07 | 1.0 |
| (2,469) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HA | 16 | 0.98 | 0.07 | 0.98 |
| (2,1498) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HB2 | 16 | 0.98 | 0.21 | 1.04 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD21 | 16 | 0.98 | 0.38 | 1.14 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD22 | 16 | 0.98 | 0.38 | 1.14 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD23 | 16 | 0.98 | 0.38 | 1.14 |
| (2,1020) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HB2 | 16 | 0.96 | 0.04 | 0.96 |
| (2,459) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HB3 | 16 | 0.95 | 0.02 | 0.95 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD11 | 16 | 0.95 | 0.1 | 0.96 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD12 | 16 | 0.95 | 0.1 | 0.96 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD13 | 16 | 0.95 | 0.1 | 0.96 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD11 | 16 | 0.95 | 0.1 | 0.96 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD12 | 16 | 0.95 | 0.1 | 0.96 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD13 | 16 | 0.95 | 0.1 | 0.96 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD11 | 16 | 0.95 | 0.1 | 0.96 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD12 | 16 | 0.95 | 0.1 | 0.96 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD13 | 16 | 0.95 | 0.1 | 0.96 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG21 | 16 | 0.95 | 0.01 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG22 | 16 | 0.95 | 0.01 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG23 | 16 | 0.95 | 0.01 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG21 | 16 | 0.95 | 0.01 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG22 | 16 | 0.95 | 0.01 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG23 | 16 | 0.95 | 0.01 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG21 | 16 | 0.95 | 0.01 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG22 | 16 | 0.95 | 0.01 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG23 | 16 | 0.95 | 0.01 | 0.95 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD21 | 16 | 0.94 | 0.08 | 0.97 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD22 | 16 | 0.94 | 0.08 | 0.97 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD23 | 16 | 0.94 | 0.08 | 0.97 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 16 | 0.94 | 0.08 | 0.97 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 16 | 0.94 | 0.08 | 0.97 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 16 | 0.94 | 0.08 | 0.97 |
| (2,368) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:18:PRO:HB3 | 16 | 0.93 | 0.61 | 0.69 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:74:LEU:HB3 | 16 | 0.93 | 0.08 | 0.92 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:74:LEU:HB3 | 16 | 0.93 | 0.08 | 0.92 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:74:LEU:HB3 | 16 | 0.93 | 0.08 | 0.92 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:52:LYS:HB3 | 16 | 0.92 | 0.03 | 0.92 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:52:LYS:HB3 | 16 | 0.92 | 0.03 | 0.92 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:52:LYS:HB3 | 16 | 0.92 | 0.03 | 0.92 |
| (2,1268) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HB2 | 16 | 0.92 | 0.04 | 0.92 |
| (2,1284) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:66:ASN:H | 16 | 0.92 | 0.03 | 0.92 |
| (2,1055) | 1:A:52:LYS:HG3 | 1:A:52:LYS:H | 16 | 0.91 | 0.07 | 0.9 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:84:HIS:HB3 | 16 | 0.9 | 0.03 | 0.9 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:84:HIS:HB3 | 16 | 0.9 | 0.03 | 0.9 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:84:HIS:HB3 | 16 | 0.9 | 0.03 | 0.9 |
| (2,130) | 1:A:7:THR:HB | 1:A:8:ASP:H | 16 | 0.9 | 0.04 | 0.9 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB1 | 16 | 0.9 | 0.03 | 0.89 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB2 | 16 | 0.9 | 0.03 | 0.89 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB3 | 16 | 0.9 | 0.03 | 0.89 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD11 | 16 | 0.89 | 0.05 | 0.89 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD12 | 16 | 0.89 | 0.05 | 0.89 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD13 | 16 | 0.89 | 0.05 | 0.89 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD11 | 16 | 0.89 | 0.05 | 0.89 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD12 | 16 | 0.89 | 0.05 | 0.89 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD13 | 16 | 0.89 | 0.05 | 0.89 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD11 | 16 | 0.89 | 0.05 | 0.89 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD12 | 16 | 0.89 | 0.05 | 0.89 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD13 | 16 | 0.89 | 0.05 | 0.89 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD11 | 16 | 0.89 | 0.04 | 0.9 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD12 | 16 | 0.89 | 0.04 | 0.9 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD13 | 16 | 0.89 | 0.04 | 0.9 |
| (2,128) | 1:A:7:THR:HB | 1:A:8:ASP:HA | 16 | 0.88 | 0.02 | 0.88 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD21 | 16 | 0.88 | 0.01 | 0.88 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD22 | 16 | 0.88 | 0.01 | 0.88 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD23 | 16 | 0.88 | 0.01 | 0.88 |
| (2,1327) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:68:LEU:H | 16 | 0.88 | 0.33 | 1.08 |
| (2,1518) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:21:GLN:HG3 | 16 | 0.88 | 0.05 | 0.88 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD11 | 16 | 0.87 | 0.04 | 0.86 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD12 | 16 | 0.87 | 0.04 | 0.86 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD13 | 16 | 0.87 | 0.04 | 0.86 |
| (2,381) | 1:A:18:PRO:HB2 | 1:A:19:GLN:H | 16 | 0.86 | 0.08 | 0.85 |
| (1,205) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:47:PRO:HD2 | 16 | 0.86 | 0.08 | 0.88 |
| (2,1670) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:90:LEU:HB2 | 16 | 0.86 | 0.0 | 0.86 |
| (2,1515) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:16:LEU:HB2 | 16 | 0.86 | 0.0 | 0.86 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD21 | 16 | 0.85 | 0.05 | 0.87 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD22 | 16 | 0.85 | 0.05 | 0.87 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD23 | 16 | 0.85 | 0.05 | 0.87 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD21 | 16 | 0.85 | 0.05 | 0.87 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD22 | 16 | 0.85 | 0.05 | 0.87 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD23 | 16 | 0.85 | 0.05 | 0.87 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD21 | 16 | 0.85 | 0.05 | 0.87 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD22 | 16 | 0.85 | 0.05 | 0.87 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD23 | 16 | 0.85 | 0.05 | 0.87 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 16 | 0.85 | 0.01 | 0.85 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 16 | 0.85 | 0.01 | 0.85 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 16 | 0.85 | 0.01 | 0.85 |
| (2,1921) | 1:A:76:LEU:HB3 | 1:A:76:LEU:HB2 | 16 | 0.85 | 0.0 | 0.85 |
| (2,424) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:HB3 | 16 | 0.85 | 0.0 | 0.85 |
| (2,282) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:21:GLN:HA | 16 | 0.84 | 0.09 | 0.84 |
| (2,1343) | 1:A:70:HIS:HA | 1:A:73:GLY:HA3 | 16 | 0.84 | 0.05 | 0.84 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:22:GLN:HB2 | 16 | 0.84 | 0.05 | 0.84 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 16 | 0.84 | 0.05 | 0.84 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:22:GLN:HB2 | 16 | 0.84 | 0.05 | 0.84 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 16 | 0.84 | 0.08 | 0.83 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 16 | 0.84 | 0.08 | 0.83 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 16 | 0.84 | 0.08 | 0.83 |
| (2,441) | 1:A:21:GLN:HG3 | 1:A:21:GLN:HG2 | 16 | 0.83 | 0.0 | 0.83 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG21 | 16 | 0.83 | 0.01 | 0.83 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG22 | 16 | 0.83 | 0.01 | 0.83 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG23 | 16 | 0.83 | 0.01 | 0.83 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HA | 16 | 0.82 | 0.0 | 0.82 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HA | 16 | 0.82 | 0.0 | 0.82 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HA | 16 | 0.82 | 0.0 | 0.82 |
| (2,1011) | 1:A:75:ASP:HA | 1:A:74:LEU:HG | 16 | 0.82 | 0.47 | 0.62 |
| (2,1768) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:96:THR:HB | 16 | 0.82 | 0.16 | 0.8 |
| (2,1193) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:65:ARG:HB2 | 16 | 0.82 | 0.12 | 0.84 |
| (2,1200) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:62:LEU:H | 16 | 0.82 | 0.02 | 0.82 |
| (2,1624) | 1:A:87:PRO:HB2 | 1:A:26:ALA:HA | 16 | 0.82 | 0.15 | 0.81 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:92:GLN:HB3 | 16 | 0.82 | 0.02 | 0.82 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:92:GLN:HB3 | 16 | 0.82 | 0.02 | 0.82 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:92:GLN:HB3 | 16 | 0.82 | 0.02 | 0.82 |
| (2,338) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 16 | 0.81 | 0.04 | 0.8 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD11 | 16 | 0.81 | 0.01 | 0.81 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD12 | 16 | 0.81 | 0.01 | 0.81 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD13 | 16 | 0.81 | 0.01 | 0.81 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 16 | 0.81 | 0.01 | 0.81 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 16 | 0.81 | 0.01 | 0.81 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 16 | 0.81 | 0.01 | 0.81 |
| (2,104) | 1:A:5:ALA:HA | 1:A:5:ALA:H | 16 | 0.81 | 0.02 | 0.81 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,183) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:11:ALA:H | 16 | 0.8 | 0.02 | 0.81 |
| (2,90) | 1:A:4:SER:HA | 1:A:5:ALA:H | 16 | 0.8 | 0.15 | 0.86 |
| (2,203) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HB2 | 16 | 0.8 | 0.08 | 0.8 |
| (2,345) | 1:A:15:GLY:HA2 | 1:A:15:GLY:H | 16 | 0.8 | 0.12 | 0.83 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD11 | 16 | 0.8 | 0.11 | 0.8 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD12 | 16 | 0.8 | 0.11 | 0.8 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD13 | 16 | 0.8 | 0.11 | 0.8 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:27:THR:HB | 16 | 0.78 | 0.05 | 0.76 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:27:THR:HB | 16 | 0.78 | 0.05 | 0.76 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:27:THR:HB | 16 | 0.78 | 0.05 | 0.76 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:88:HIS:HB2 | 16 | 0.78 | 0.01 | 0.78 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:88:HIS:HB2 | 16 | 0.78 | 0.01 | 0.78 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:88:HIS:HB2 | 16 | 0.78 | 0.01 | 0.78 |
| (1,471) | 1:A:8:ASP:H | 1:A:9:LEU:H | 16 | 0.77 | 0.05 | 0.78 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD21 | 16 | 0.77 | 0.06 | 0.76 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD22 | 16 | 0.77 | 0.06 | 0.76 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD23 | 16 | 0.77 | 0.06 | 0.76 |
| (2,1298) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:HD21 | 16 | 0.77 | 0.02 | 0.77 |
| (1,366) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG2 | 16 | 0.77 | 0.09 | 0.82 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:ASN:HA | 16 | 0.77 | 0.06 | 0.76 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:ASN:HA | 16 | 0.77 | 0.06 | 0.76 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:ASN:HA | 16 | 0.77 | 0.06 | 0.76 |
| (2,320) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:51:PHE:HA | 16 | 0.76 | 0.07 | 0.72 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD21 | 16 | 0.75 | 0.73 | 0.39 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD22 | 16 | 0.75 | 0.73 | 0.39 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD23 | 16 | 0.75 | 0.73 | 0.39 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:51:PHE:HB2 | 16 | 0.75 | 0.02 | 0.74 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:51:PHE:HB2 | 16 | 0.75 | 0.02 | 0.74 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:51:PHE:HB2 | 16 | 0.75 | 0.02 | 0.74 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB1 | 16 | 0.75 | 0.05 | 0.73 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB2 | 16 | 0.75 | 0.05 | 0.73 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB3 | 16 | 0.75 | 0.05 | 0.73 |
| (2,1528) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:17:SER:H | 16 | 0.75 | 0.04 | 0.75 |
| (2,1026) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:52:LYS:H | 16 | 0.74 | 0.03 | 0.75 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:85:PRO:HA | 16 | 0.74 | 0.08 | 0.75 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:85:PRO:HA | 16 | 0.74 | 0.08 | 0.75 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:85:PRO:HA | 16 | 0.74 | 0.08 | 0.75 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 16 | 0.74 | 0.04 | 0.74 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 16 | 0.74 | 0.04 | 0.74 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 16 | 0.74 | 0.04 | 0.74 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD21 | 16 | 0.74 | 0.09 | 0.72 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD22 | 16 | 0.74 | 0.09 | 0.72 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD23 | 16 | 0.74 | 0.09 | 0.72 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HG2 | 16 | 0.74 | 0.04 | 0.74 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HG2 | 16 | 0.74 | 0.04 | 0.74 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HG2 | 16 | 0.74 | 0.04 | 0.74 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 16 | 0.73 | 0.05 | 0.73 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 16 | 0.73 | 0.05 | 0.73 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 16 | 0.73 | 0.05 | 0.73 |
| (2,534) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:23:GLN:HB3 | 16 | 0.73 | 0.04 | 0.74 |
| (2,1696) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:25:LEU:HB3 | 16 | 0.73 | 0.07 | 0.72 |
| (2,1471) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:74:LEU:H | 16 | 0.73 | 0.07 | 0.72 |
| (2,318) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:87:PRO:HD2 | 16 | 0.72 | 0.01 | 0.72 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 16 | 0.72 | 0.04 | 0.73 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 16 | 0.72 | 0.04 | 0.73 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 16 | 0.72 | 0.04 | 0.73 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD21 | 16 | 0.72 | 0.02 | 0.72 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD22 | 16 | 0.72 | 0.02 | 0.72 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD23 | 16 | 0.72 | 0.02 | 0.72 |
| (2,1675) | 1:A:90:LEU:HB2 | 1:A:90:LEU:H | 16 | 0.72 | 0.08 | 0.75 |
| (2,1451) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:88:HIS:HD2 | 16 | 0.72 | 0.01 | 0.72 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB1 | 16 | 0.72 | 0.03 | 0.71 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB2 | 16 | 0.72 | 0.03 | 0.71 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB3 | 16 | 0.72 | 0.03 | 0.71 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD11 | 16 | 0.72 | 0.06 | 0.72 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD12 | 16 | 0.72 | 0.06 | 0.72 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD13 | 16 | 0.72 | 0.06 | 0.72 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:64:LEU:HG | 16 | 0.71 | 0.03 | 0.7 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:64:LEU:HG | 16 | 0.71 | 0.03 | 0.7 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:64:LEU:HG | 16 | 0.71 | 0.03 | 0.7 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:90:LEU:HB3 | 16 | 0.71 | 0.04 | 0.71 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:90:LEU:HB3 | 16 | 0.71 | 0.04 | 0.71 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:90:LEU:HB3 | 16 | 0.71 | 0.04 | 0.71 |
| (1,191) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:65:ARG:HB2 | 16 | 0.71 | 0.17 | 0.72 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG21 | 16 | 0.71 | 0.02 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG22 | 16 | 0.71 | 0.02 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG23 | 16 | 0.71 | 0.02 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG21 | 16 | 0.71 | 0.02 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG22 | 16 | 0.71 | 0.02 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG23 | 16 | 0.71 | 0.02 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG21 | 16 | 0.71 | 0.02 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG22 | 16 | 0.71 | 0.02 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG23 | 16 | 0.71 | 0.02 | 0.71 |
| (2,454) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:17:SER:H | 16 | 0.71 | 0.08 | 0.72 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,1549) | 1:A:81:ILE:HB | 1:A:82:PHE:H | 16 | 0.71 | 0.05 | 0.7 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD21 | 16 | 0.7 | 0.12 | 0.72 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD22 | 16 | 0.7 | 0.12 | 0.72 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD23 | 16 | 0.7 | 0.12 | 0.72 |
| (2,1369) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:97:ARG:H | 16 | 0.7 | 0.04 | 0.71 |
| (2,1522) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:13:LEU:HA | 16 | 0.7 | 0.07 | 0.7 |
| (2,117) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:4:SER:HA | 16 | 0.7 | 0.19 | 0.72 |
| (1,469) | 1:A:8:ASP:H | 1:A:7:THR:HB | 16 | 0.7 | 0.04 | 0.7 |
| (2,101) | 1:A:5:ALA:HA | 1:A:8:ASP:HB2 | 16 | 0.7 | 0.05 | 0.72 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG21 | 1:A:33:THR:HB | 16 | 0.7 | 0.04 | 0.71 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG22 | 1:A:33:THR:HB | 16 | 0.7 | 0.04 | 0.71 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG23 | 1:A:33:THR:HB | 16 | 0.7 | 0.04 | 0.71 |
| (2,1740) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:97:ARG:HB2 | 16 | 0.7 | 0.05 | 0.71 |
| (2,425) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:21:GLN:HG2 | 16 | 0.7 | 0.02 | 0.69 |
| (2,1442) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:89:ALA:H | 16 | 0.69 | 0.02 | 0.7 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD11 | 16 | 0.68 | 0.2 | 0.62 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD12 | 16 | 0.68 | 0.2 | 0.62 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD13 | 16 | 0.68 | 0.2 | 0.62 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:91:THR:HA | 16 | 0.68 | 0.11 | 0.66 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:91:THR:HA | 16 | 0.68 | 0.11 | 0.66 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:91:THR:HA | 16 | 0.68 | 0.11 | 0.66 |
| (2,1614) | 1:A:87:PRO:HA | 1:A:51:PHE:HZ | 16 | 0.68 | 0.03 | 0.68 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:56:ILE:HG12 | 16 | 0.67 | 0.11 | 0.68 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:56:ILE:HG12 | 16 | 0.67 | 0.11 | 0.68 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:56:ILE:HG12 | 16 | 0.67 | 0.11 | 0.68 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG21 | 16 | 0.66 | 0.02 | 0.66 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG22 | 16 | 0.66 | 0.02 | 0.66 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG23 | 16 | 0.66 | 0.02 | 0.66 |
| (2,1212) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:ASN:HD21 | 16 | 0.66 | 0.12 | 0.66 |
| (2,1068) | 1:A:54:LEU:HB3 | 1:A:54:LEU:HB2 | 16 | 0.65 | 0.0 | 0.65 |
| (2,1469) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:74:LEU:HB3 | 16 | 0.65 | 0.0 | 0.65 |
| (2,835) | 1:A:37:LEU:HB2 | 1:A:37:LEU:HB3 | 16 | 0.65 | 0.0 | 0.65 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 16 | 0.65 | 0.1 | 0.64 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 16 | 0.65 | 0.1 | 0.64 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 16 | 0.65 | 0.1 | 0.64 |
| (2,1577) | 1:A:84:HIS:HB3 | 1:A:84:HIS:HB2 | 16 | 0.65 | 0.0 | 0.65 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG21 | 16 | 0.65 | 0.07 | 0.66 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG22 | 16 | 0.65 | 0.07 | 0.66 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG23 | 16 | 0.65 | 0.07 | 0.66 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 16 | 0.65 | 0.07 | 0.66 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 16 | 0.65 | 0.07 | 0.66 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 16 | 0.65 | 0.07 | 0.66 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:51:PHE:HB3 | 16 | 0.65 | 0.04 | 0.65 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:51:PHE:HB3 | 16 | 0.65 | 0.04 | 0.65 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:51:PHE:HB3 | 16 | 0.65 | 0.04 | 0.65 |
| (2,1571) | 1:A:84:HIS:HD2 | 1:A:83:ASP:HB3 | 16 | 0.65 | 0.03 | 0.65 |
| (2,1376) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:97:ARG:HB3 | 16 | 0.65 | 0.0 | 0.65 |
| (2,322) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:88:HIS:H | 16 | 0.64 | 0.02 | 0.64 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD21 | 16 | 0.64 | 0.06 | 0.64 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD22 | 16 | 0.64 | 0.06 | 0.64 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD23 | 16 | 0.64 | 0.06 | 0.64 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD21 | 16 | 0.64 | 0.06 | 0.64 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD22 | 16 | 0.64 | 0.06 | 0.64 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD23 | 16 | 0.64 | 0.06 | 0.64 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD21 | 16 | 0.64 | 0.06 | 0.64 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD22 | 16 | 0.64 | 0.06 | 0.64 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD23 | 16 | 0.64 | 0.06 | 0.64 |
| (2,367) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:17:SER:HB2 | 16 | 0.64 | 0.0 | 0.64 |
| (2,1237) | 1:A:64:LEU:HB2 | 1:A:64:LEU:HB3 | 16 | 0.64 | 0.0 | 0.64 |
| (2,1359) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:93:HIS:HB2 | 16 | 0.64 | 0.0 | 0.64 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HB2 | 16 | 0.64 | 0.02 | 0.64 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HB2 | 16 | 0.64 | 0.02 | 0.64 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HB2 | 16 | 0.64 | 0.02 | 0.64 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:71:ASN:HB2 | 16 | 0.63 | 0.05 | 0.62 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:71:ASN:HB2 | 16 | 0.63 | 0.05 | 0.62 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:71:ASN:HB2 | 16 | 0.63 | 0.05 | 0.62 |
| (2,1537) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:H | 16 | 0.63 | 0.04 | 0.62 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HG12 | 16 | 0.63 | 0.06 | 0.64 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HG12 | 16 | 0.63 | 0.06 | 0.64 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HG12 | 16 | 0.63 | 0.06 | 0.64 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:34:ALA:HA | 16 | 0.63 | 0.03 | 0.62 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:34:ALA:HA | 16 | 0.63 | 0.03 | 0.62 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:34:ALA:HA | 16 | 0.63 | 0.03 | 0.62 |
| (2,1392) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:81:ILE:H | 16 | 0.62 | 0.05 | 0.62 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:5:ALA:H | 16 | 0.62 | 0.02 | 0.62 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:5:ALA:H | 16 | 0.62 | 0.02 | 0.62 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:5:ALA:H | 16 | 0.62 | 0.02 | 0.62 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HD1 | 16 | 0.62 | 0.04 | 0.62 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HD2 | 16 | 0.62 | 0.04 | 0.62 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HD1 | 16 | 0.62 | 0.04 | 0.62 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HD2 | 16 | 0.62 | 0.04 | 0.62 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HD1 | 16 | 0.62 | 0.04 | 0.62 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HD2 | 16 | 0.62 | 0.04 | 0.62 |
| (2,217) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HB2 | 16 | 0.62 | 0.02 | 0.62 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG21 | 1:A:25:LEU:HB2 | 16 | 0.62 | 0.05 | 0.62 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG22 | 1:A:25:LEU:HB2 | 16 | 0.62 | 0.05 | 0.62 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG23 | 1:A:25:LEU:HB2 | 16 | 0.62 | 0.05 | 0.62 |
| (2,1869) | 1:A:65:ARG:HD2 | 1:A:65:ARG:HE | 16 | 0.61 | 0.05 | 0.64 |
| (1,279) | 1:A:14:ASN:HD21 | 1:A:14:ASN:HB2 | 16 | 0.61 | 0.04 | 0.6 |
| (1,274) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:80:LEU:H | 16 | 0.61 | 0.05 | 0.61 |
| (2,40) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HD1 | 16 | 0.61 | 0.07 | 0.64 |
| (2,40) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HD2 | 16 | 0.61 | 0.07 | 0.64 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 16 | 0.6 | 0.1 | 0.62 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 16 | 0.6 | 0.1 | 0.62 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 16 | 0.6 | 0.1 | 0.62 |
| (2,313) | 1:A:85:PRO:HD2 | 1:A:84:HIS:HA | 16 | 0.6 | 0.03 | 0.6 |
| (2,1192) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:65:ARG:HB2 | 16 | 0.6 | 0.14 | 0.6 |
| (2,153) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:70:HIS:HB2 | 16 | 0.6 | 0.05 | 0.6 |
| (2,1529) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:21:GLN:H | 16 | 0.6 | 0.07 | 0.6 |
| (2,1014) | 1:A:50:ALA:HA | 1:A:51:PHE:HB3 | 16 | 0.6 | 0.01 | 0.6 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HG | 16 | 0.59 | 0.04 | 0.6 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HG | 16 | 0.59 | 0.04 | 0.6 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HG | 16 | 0.59 | 0.04 | 0.6 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD21 | 16 | 0.59 | 0.01 | 0.59 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD22 | 16 | 0.59 | 0.01 | 0.59 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD23 | 16 | 0.59 | 0.01 | 0.59 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB1 | 16 | 0.59 | 0.16 | 0.65 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB2 | 16 | 0.59 | 0.16 | 0.65 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB3 | 16 | 0.59 | 0.16 | 0.65 |
| (2,1575) | 1:A:84:HIS:HB2 | 1:A:84:HIS:H | 16 | 0.59 | 0.01 | 0.59 |
| (2,1304) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:H | 16 | 0.59 | 0.05 | 0.58 |
| (1,576) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:27:THR:H | 16 | 0.58 | 0.01 | 0.59 |
| (2,658) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:28:LEU:HB2 | 16 | 0.58 | 0.01 | 0.58 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:74:LEU:HA | 16 | 0.58 | 0.15 | 0.64 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:74:LEU:HA | 16 | 0.58 | 0.15 | 0.64 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:74:LEU:HA | 16 | 0.58 | 0.15 | 0.64 |
| (1,584) | 1:A:96:THR:H | 1:A:92:GLN:HB2 | 16 | 0.58 | 0.05 | 0.58 |
| (2,1525) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:16:LEU:H | 16 | 0.58 | 0.05 | 0.56 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:32:ALA:H | 16 | 0.58 | 0.03 | 0.58 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:32:ALA:H | 16 | 0.58 | 0.03 | 0.58 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:32:ALA:H | 16 | 0.58 | 0.03 | 0.58 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:64:LEU:HB3 | 16 | 0.57 | 0.08 | 0.6 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:64:LEU:HB3 | 16 | 0.57 | 0.08 | 0.6 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:64:LEU:HB3 | 16 | 0.57 | 0.08 | 0.6 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:7:THR:H | 16 | 0.57 | 0.06 | 0.58 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:7:THR:H | 16 | 0.57 | 0.06 | 0.58 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:7:THR:H | 16 | 0.57 | 0.06 | 0.58 |
| (2,634) | 1:A:28:LEU:HG | 1:A:27:THR:H | 16 | 0.57 | 0.01 | 0.57 |
| (2,888) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:41:THR:HA | 16 | 0.57 | 0.09 | 0.56 |
| (1,282) | 1:A:14:ASN:HD21 | 1:A:11:ALA:HA | 16 | 0.57 | 0.21 | 0.5 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD11 | 16 | 0.57 | 0.05 | 0.57 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD12 | 16 | 0.57 | 0.05 | 0.57 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD13 | 16 | 0.57 | 0.05 | 0.57 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD11 | 16 | 0.57 | 0.05 | 0.57 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD12 | 16 | 0.57 | 0.05 | 0.57 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD13 | 16 | 0.57 | 0.05 | 0.57 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD11 | 16 | 0.57 | 0.05 | 0.57 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD12 | 16 | 0.57 | 0.05 | 0.57 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD13 | 16 | 0.57 | 0.05 | 0.57 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD11 | 1:A:65:ARG:H | 16 | 0.57 | 0.03 | 0.58 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD12 | 1:A:65:ARG:H | 16 | 0.57 | 0.03 | 0.58 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD13 | 1:A:65:ARG:H | 16 | 0.57 | 0.03 | 0.58 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB1 | 16 | 0.57 | 0.06 | 0.56 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB2 | 16 | 0.57 | 0.06 | 0.56 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB3 | 16 | 0.57 | 0.06 | 0.56 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD11 | 16 | 0.56 | 0.01 | 0.56 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD12 | 16 | 0.56 | 0.01 | 0.56 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD13 | 16 | 0.56 | 0.01 | 0.56 |
| (2,417) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:H | 16 | 0.56 | 0.03 | 0.56 |
| (2,747) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:36:VAL:H | 16 | 0.56 | 0.02 | 0.56 |
| (2,1024) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HB2 | 16 | 0.56 | 0.01 | 0.56 |
| (2,1024) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HB2 | 16 | 0.56 | 0.01 | 0.56 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 16 | 0.56 | 0.04 | 0.56 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 16 | 0.56 | 0.04 | 0.56 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 16 | 0.56 | 0.04 | 0.56 |
| (1,558) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:23:GLN:HB3 | 16 | 0.56 | 0.01 | 0.55 |
| (2,1365) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:94:LEU:H | 16 | 0.55 | 0.03 | 0.54 |
| (2,1317) | 1:A:68:LEU:HB3 | 1:A:68:LEU:HB2 | 16 | 0.55 | 0.0 | 0.55 |
| (2,554) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:25:LEU:HB3 | 16 | 0.55 | 0.0 | 0.55 |
| (2,1745) | 1:A:94:LEU:HB2 | 1:A:94:LEU:HB3 | 16 | 0.55 | 0.0 | 0.55 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB1 | 16 | 0.55 | 0.03 | 0.56 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB2 | 16 | 0.55 | 0.03 | 0.56 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB3 | 16 | 0.55 | 0.03 | 0.56 |
| (2,1296) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:63:GLU:HA | 16 | 0.55 | 0.05 | 0.55 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB1 | 16 | 0.54 | 0.03 | 0.54 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB2 | 16 | 0.54 | 0.03 | 0.54 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB3 | 16 | 0.54 | 0.03 | 0.54 |
| (2,451) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:20:GLN:H | 16 | 0.54 | 0.02 | 0.54 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,1751) | 1:A:95:HIS:HB3 | 1:A:95:HIS:HB2 | 16 | 0.54 | 0.0 | 0.54 |
| (2,1573) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:83:ASP:HB2 | 16 | 0.54 | 0.0 | 0.54 |
| (2,1129) | 1:A:57:ASP:HB3 | 1:A:57:ASP:HB2 | 16 | 0.54 | 0.0 | 0.54 |
| (2,1866) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:65:ARG:HD2 | 16 | 0.54 | 0.0 | 0.54 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:86:THR:H | 16 | 0.54 | 0.04 | 0.55 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:86:THR:H | 16 | 0.54 | 0.04 | 0.55 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:86:THR:H | 16 | 0.54 | 0.04 | 0.55 |
| (2,1521) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:21:GLN:HG2 | 16 | 0.53 | 0.11 | 0.54 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB1 | 16 | 0.53 | 0.01 | 0.53 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB2 | 16 | 0.53 | 0.01 | 0.53 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB3 | 16 | 0.53 | 0.01 | 0.53 |
| (2,427) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:HG3 | 16 | 0.52 | 0.02 | 0.52 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD11 | 16 | 0.52 | 0.44 | 0.36 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD12 | 16 | 0.52 | 0.44 | 0.36 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD13 | 16 | 0.52 | 0.44 | 0.36 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:45:ILE:HG13 | 16 | 0.52 | 0.09 | 0.52 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:45:ILE:HG13 | 16 | 0.52 | 0.09 | 0.52 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:45:ILE:HG13 | 16 | 0.52 | 0.09 | 0.52 |
| (2,1863) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:65:ARG:HE | 16 | 0.52 | 0.14 | 0.46 |
| (1,143) | 1:A:49:THR:H | 1:A:50:ALA:H | 16 | 0.52 | 0.05 | 0.52 |
| (1,557) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:23:GLN:HG3 | 16 | 0.52 | 0.04 | 0.52 |
| (2,513) | 1:A:23:GLN:HG3 | 1:A:23:GLN:H | 16 | 0.52 | 0.04 | 0.52 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB1 | 16 | 0.52 | 0.01 | 0.52 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB2 | 16 | 0.52 | 0.01 | 0.52 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB3 | 16 | 0.52 | 0.01 | 0.52 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG21 | 16 | 0.51 | 0.15 | 0.52 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG22 | 16 | 0.51 | 0.15 | 0.52 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG23 | 16 | 0.51 | 0.15 | 0.52 |
| (2,423) | 1:A:18:PRO:HA | 1:A:21:GLN:HB2 | 16 | 0.51 | 0.06 | 0.51 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:54:LEU:HA | 16 | 0.51 | 0.02 | 0.52 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:54:LEU:HA | 16 | 0.51 | 0.02 | 0.52 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:54:LEU:HA | 16 | 0.51 | 0.02 | 0.52 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 16 | 0.51 | 0.01 | 0.51 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 16 | 0.51 | 0.01 | 0.51 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 16 | 0.51 | 0.01 | 0.51 |
| (2,1239) | 1:A:64:LEU:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 16 | 0.51 | 0.02 | 0.51 |
| (1,349) | 1:A:17:SER:H | 1:A:20:GLN:HB2 | 16 | 0.51 | 0.08 | 0.52 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:51:PHE:HB3 | 16 | 0.51 | 0.03 | 0.51 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:51:PHE:HB3 | 16 | 0.51 | 0.03 | 0.51 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:51:PHE:HB3 | 16 | 0.51 | 0.03 | 0.51 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 16 | 0.5 | 0.08 | 0.5 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 16 | 0.5 | 0.08 | 0.5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 16 | 0.5 | 0.08 | 0.5 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 16 | 0.5 | 0.08 | 0.5 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 16 | 0.5 | 0.08 | 0.5 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 16 | 0.5 | 0.08 | 0.5 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 16 | 0.5 | 0.08 | 0.5 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 16 | 0.5 | 0.08 | 0.5 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 16 | 0.5 | 0.08 | 0.5 |
| (2,838) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:37:LEU:HB2 | 16 | 0.5 | 0.01 | 0.5 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HA | 16 | 0.49 | 0.08 | 0.5 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HA | 16 | 0.49 | 0.08 | 0.5 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HA | 16 | 0.49 | 0.08 | 0.5 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG21 | 16 | 0.49 | 0.09 | 0.5 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG22 | 16 | 0.49 | 0.09 | 0.5 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG23 | 16 | 0.49 | 0.09 | 0.5 |
| (2,622) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:25:LEU:HA | 16 | 0.49 | 0.02 | 0.49 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:63:GLU:HB2 | 16 | 0.49 | 0.03 | 0.5 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:63:GLU:HB2 | 16 | 0.49 | 0.03 | 0.5 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:63:GLU:HB2 | 16 | 0.49 | 0.03 | 0.5 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:28:LEU:HG | 16 | 0.49 | 0.0 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:28:LEU:HG | 16 | 0.49 | 0.0 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:28:LEU:HG | 16 | 0.49 | 0.0 | 0.49 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG21 | 16 | 0.49 | 0.05 | 0.5 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG22 | 16 | 0.49 | 0.05 | 0.5 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG23 | 16 | 0.49 | 0.05 | 0.5 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG21 | 16 | 0.49 | 0.05 | 0.5 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG22 | 16 | 0.49 | 0.05 | 0.5 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG23 | 16 | 0.49 | 0.05 | 0.5 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD11 | 16 | 0.49 | 0.03 | 0.48 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD12 | 16 | 0.49 | 0.03 | 0.48 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD13 | 16 | 0.49 | 0.03 | 0.48 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD11 | 16 | 0.49 | 0.03 | 0.48 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD12 | 16 | 0.49 | 0.03 | 0.48 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD13 | 16 | 0.49 | 0.03 | 0.48 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD11 | 16 | 0.49 | 0.03 | 0.48 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD12 | 16 | 0.49 | 0.03 | 0.48 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD13 | 16 | 0.49 | 0.03 | 0.48 |
| (1,318) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HG | 16 | 0.49 | 0.01 | 0.49 |
| (2,434) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:21:GLN:HA | 16 | 0.48 | 0.01 | 0.48 |
| (2,1332) | 1:A:94:LEU:HG | 1:A:94:LEU:H | 16 | 0.48 | 0.03 | 0.47 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:20:GLN:HB3 | 16 | 0.48 | 0.05 | 0.49 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:20:GLN:HB3 | 16 | 0.48 | 0.05 | 0.49 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:20:GLN:HB3 | 16 | 0.48 | 0.05 | 0.49 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,1641) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:47:PRO:HB3 | 16 | 0.48 | 0.04 | 0.48 |
| (2,1423) | 1:A:93:HIS:HD2 | 1:A:93:HIS:HB3 | 16 | 0.48 | 0.02 | 0.48 |
| (2,952) | 1:A:47:PRO:HB3 | 1:A:48:ALA:HA | 16 | 0.48 | 0.01 | 0.48 |
| (2,1625) | 1:A:87:PRO:HB2 | 1:A:88:HIS:H | 16 | 0.48 | 0.04 | 0.48 |
| (2,1016) | 1:A:50:ALA:HA | 1:A:50:ALA:H | 16 | 0.48 | 0.0 | 0.48 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG21 | 16 | 0.47 | 0.06 | 0.48 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG22 | 16 | 0.47 | 0.06 | 0.48 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG23 | 16 | 0.47 | 0.06 | 0.48 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB1 | 16 | 0.47 | 0.01 | 0.47 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB2 | 16 | 0.47 | 0.01 | 0.47 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB3 | 16 | 0.47 | 0.01 | 0.47 |
| (2,984) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HD1 | 16 | 0.46 | 0.03 | 0.46 |
| (2,984) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HD2 | 16 | 0.46 | 0.03 | 0.46 |
| (1,262) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:56:ILE:H | 16 | 0.46 | 0.03 | 0.46 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG21 | 16 | 0.46 | 0.04 | 0.46 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG22 | 16 | 0.46 | 0.04 | 0.46 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG23 | 16 | 0.46 | 0.04 | 0.46 |
| (2,1858) | 1:A:25:LEU:HG | 1:A:21:GLN:HA | 16 | 0.46 | 0.08 | 0.44 |
| (2,1530) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HB3 | 16 | 0.46 | 0.01 | 0.46 |
| (2,911) | 1:A:43:GLU:HB2 | 1:A:43:GLU:H | 16 | 0.46 | 0.09 | 0.48 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:71:ASN:HB3 | 16 | 0.46 | 0.09 | 0.44 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:71:ASN:HB3 | 16 | 0.46 | 0.09 | 0.44 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:71:ASN:HB3 | 16 | 0.46 | 0.09 | 0.44 |
| (2,179) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:8:ASP:H | 16 | 0.46 | 0.03 | 0.45 |
| (2,508) | 1:A:23:GLN:HB3 | 1:A:20:GLN:HA | 16 | 0.45 | 0.1 | 0.44 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:45:ILE:HB | 16 | 0.45 | 0.02 | 0.45 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:45:ILE:HB | 16 | 0.45 | 0.02 | 0.45 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:45:ILE:HB | 16 | 0.45 | 0.02 | 0.45 |
| (2,302) | 1:A:13:LEU:HB2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 16 | 0.45 | 0.0 | 0.45 |
| (2,1519) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:21:GLN:HG3 | 16 | 0.45 | 0.12 | 0.46 |
| (2,199) | 1:A:9:LEU:HB3 | 1:A:9:LEU:HB2 | 16 | 0.45 | 0.0 | 0.45 |
| (2,1463) | 1:A:73:GLY:HA2 | 1:A:73:GLY:HA3 | 16 | 0.45 | 0.0 | 0.45 |
| (2,1386) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG12 | 16 | 0.45 | 0.0 | 0.45 |
| (2,1294) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:HB3 | 16 | 0.45 | 0.0 | 0.45 |
| (1,113) | 1:A:88:HIS:H | 1:A:87:PRO:HD2 | 16 | 0.44 | 0.02 | 0.44 |
| (2,865) | 1:A:38:GLY:HA2 | 1:A:38:GLY:HA3 | 16 | 0.44 | 0.0 | 0.44 |
| (1,336) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HB2 | 16 | 0.44 | 0.01 | 0.44 |
| (2,1564) | 1:A:82:PHE:HB3 | 1:A:82:PHE:HB2 | 16 | 0.44 | 0.0 | 0.44 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 16 | 0.44 | 0.04 | 0.43 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 16 | 0.44 | 0.04 | 0.43 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 16 | 0.44 | 0.04 | 0.43 |
| (2,299) | 1:A:13:LEU:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 16 | 0.44 | 0.09 | 0.45 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,638) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:45:ILE:HG13 | 16 | 0.44 | 0.0 | 0.44 |
| (2,1094) | 1:A:56:ILE:HG12 | 1:A:56:ILE:HB | 16 | 0.44 | 0.01 | 0.44 |
| (2,1493) | 1:A:79:THR:HB | 1:A:82:PHE:HB2 | 16 | 0.44 | 0.09 | 0.44 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB1 | 16 | 0.43 | 0.01 | 0.44 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB2 | 16 | 0.43 | 0.01 | 0.44 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB3 | 16 | 0.43 | 0.01 | 0.44 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 16 | 0.43 | 0.15 | 0.44 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 16 | 0.43 | 0.15 | 0.44 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 16 | 0.43 | 0.15 | 0.44 |
| (1,451) | 1:A:10:ALA:H | 1:A:9:LEU:HB3 | 16 | 0.43 | 0.02 | 0.44 |
| (2,418) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 16 | 0.43 | 0.12 | 0.42 |
| (2,311) | 1:A:85:PRO:HD2 | 1:A:85:PRO:HD3 | 16 | 0.43 | 0.0 | 0.43 |
| (2,382) | 1:A:18:PRO:HG2 | 1:A:18:PRO:HG3 | 16 | 0.43 | 0.01 | 0.43 |
| (2,881) | 1:A:42:PRO:HD3 | 1:A:42:PRO:HD2 | 16 | 0.43 | 0.0 | 0.43 |
| (1,304) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HB2 | 16 | 0.43 | 0.07 | 0.42 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG21 | 16 | 0.43 | 0.02 | 0.42 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG22 | 16 | 0.43 | 0.02 | 0.42 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG23 | 16 | 0.43 | 0.02 | 0.42 |
| (1,208) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:47:PRO:HG3 | 16 | 0.42 | 0.06 | 0.4 |
| (2,41) | 1:A:82:PHE:HD1 | 1:A:82:PHE:HB3 | 16 | 0.42 | 0.02 | 0.43 |
| (2,41) | 1:A:82:PHE:HD2 | 1:A:82:PHE:HB3 | 16 | 0.42 | 0.02 | 0.43 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HE1 | 16 | 0.42 | 0.0 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HE2 | 16 | 0.42 | 0.0 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HE1 | 16 | 0.42 | 0.0 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HE2 | 16 | 0.42 | 0.0 | 0.42 |
| (1,270) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:81:ILE:HG12 | 16 | 0.42 | 0.05 | 0.42 |
| (2,957) | 1:A:47:PRO:HD3 | 1:A:47:PRO:HD2 | 16 | 0.42 | 0.0 | 0.42 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:9:LEU:HA | 16 | 0.42 | 0.01 | 0.42 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:9:LEU:HA | 16 | 0.42 | 0.01 | 0.42 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:9:LEU:HA | 16 | 0.42 | 0.01 | 0.42 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG21 | 16 | 0.41 | 0.09 | 0.42 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG22 | 16 | 0.41 | 0.09 | 0.42 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG23 | 16 | 0.41 | 0.09 | 0.42 |
| (1,527) | 1:A:93:HIS:H | 1:A:92:GLN:HB3 | 16 | 0.41 | 0.07 | 0.44 |
| (1,414) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HB3 | 16 | 0.41 | 0.01 | 0.41 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HZ | 16 | 0.41 | 0.12 | 0.46 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HZ | 16 | 0.41 | 0.12 | 0.46 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HZ | 16 | 0.41 | 0.12 | 0.46 |
| (2,547) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:29:VAL:H | 16 | 0.41 | 0.05 | 0.41 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:10:ALA:H | 16 | 0.41 | 0.02 | 0.41 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:10:ALA:H | 16 | 0.41 | 0.02 | 0.41 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:10:ALA:H | 16 | 0.41 | 0.02 | 0.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,1845) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:51:PHE:HZ | 16 | 0.4 | 0.0 | 0.4 |
| (2,1845) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:51:PHE:HZ | 16 | 0.4 | 0.0 | 0.4 |
| (2,412) | 1:A:19:GLN:HB2 | 1:A:19:GLN:H | 16 | 0.4 | 0.04 | 0.4 |
| (1,445) | 1:A:3:ALA:H | 1:A:3:ALA:HA | 16 | 0.4 | 0.26 | 0.28 |
| (2,414) | 1:A:9:LEU:HA | 1:A:8:ASP:HB2 | 16 | 0.4 | 0.05 | 0.4 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG21 | 16 | 0.4 | 0.02 | 0.39 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG22 | 16 | 0.4 | 0.02 | 0.39 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG23 | 16 | 0.4 | 0.02 | 0.39 |
| (2,335) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 16 | 0.39 | 0.04 | 0.4 |
| (1,33) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:55:GLY:H | 16 | 0.39 | 0.04 | 0.4 |
| (2,295) | 1:A:59:LEU:HB2 | 1:A:60:THR:H | 16 | 0.39 | 0.04 | 0.39 |
| (1,415) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HB2 | 16 | 0.39 | 0.01 | 0.38 |
| (2,1697) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:94:LEU:HB3 | 16 | 0.39 | 0.06 | 0.39 |
| (2,1881) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HG | 16 | 0.38 | 0.09 | 0.41 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:54:LEU:H | 16 | 0.38 | 0.04 | 0.38 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:54:LEU:H | 16 | 0.38 | 0.04 | 0.38 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:54:LEU:H | 16 | 0.38 | 0.04 | 0.38 |
| (2,946) | 1:A:47:PRO:HD3 | 1:A:46:SER:HA | 16 | 0.38 | 0.02 | 0.38 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:40:HIS:HB2 | 16 | 0.37 | 0.14 | 0.36 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:40:HIS:HB2 | 16 | 0.37 | 0.14 | 0.36 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:40:HIS:HB2 | 16 | 0.37 | 0.14 | 0.36 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD11 | 16 | 0.37 | 0.02 | 0.38 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD12 | 16 | 0.37 | 0.02 | 0.38 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD13 | 16 | 0.37 | 0.02 | 0.38 |
| (2,1524) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:16:LEU:HA | 16 | 0.37 | 0.02 | 0.36 |
| (2,279) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:12:ARG:HA | 16 | 0.36 | 0.25 | 0.22 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:33:THR:HG1 | 16 | 0.36 | 0.04 | 0.36 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:33:THR:HG1 | 16 | 0.36 | 0.04 | 0.36 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:33:THR:HG1 | 16 | 0.36 | 0.04 | 0.36 |
| (2,745) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HA | 16 | 0.36 | 0.04 | 0.36 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD21 | 16 | 0.36 | 0.11 | 0.42 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD22 | 16 | 0.36 | 0.11 | 0.42 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD23 | 16 | 0.36 | 0.11 | 0.42 |
| (1,82) | 1:A:86:THR:H | 1:A:84:HIS:HB2 | 16 | 0.36 | 0.04 | 0.36 |
| (2,636) | 1:A:28:LEU:HG | 1:A:29:VAL:HA | 16 | 0.36 | 0.02 | 0.36 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD21 | 16 | 0.35 | 0.01 | 0.36 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD22 | 16 | 0.35 | 0.01 | 0.36 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD23 | 16 | 0.35 | 0.01 | 0.36 |
| (2,321) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:86:THR:HA | 16 | 0.35 | 0.01 | 0.35 |
| (1,368) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:93:HIS:HB3 | 16 | 0.35 | 0.03 | 0.34 |
| (2,1318) | 1:A:68:LEU:HB3 | 1:A:68:LEU:HA | 16 | 0.35 | 0.05 | 0.38 |
| (2,619) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:28:LEU:HB2 | 16 | 0.35 | 0.0 | 0.35 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,884) | 1:A:42:PRO:HD3 | 1:A:42:PRO:HB2 | 16 | 0.35 | 0.01 | 0.35 |
| (1,73) | 1:A:65:ARG:H | 1:A:64:LEU:H | 16 | 0.34 | 0.03 | 0.34 |
| (2,1772) | 1:A:97:ARG:HD3 | 1:A:97:ARG:HD2 | 16 | 0.34 | 0.0 | 0.34 |
| (1,599) | 1:A:33:THR:H | 1:A:33:THR:HG1 | 16 | 0.34 | 0.03 | 0.34 |
| (1,286) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HB2 | 16 | 0.34 | 0.09 | 0.35 |
| (2,1086) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:55:GLY:HA2 | 16 | 0.34 | 0.0 | 0.34 |
| (2,466) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:20:GLN:HB3 | 16 | 0.34 | 0.0 | 0.34 |
| (2,471) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HB3 | 16 | 0.34 | 0.08 | 0.34 |
| (2,698) | 1:A:83:ASP:HA | 1:A:82:PHE:H | 16 | 0.34 | 0.03 | 0.33 |
| (2,1729) | 1:A:93:HIS:HA | 1:A:90:LEU:HA | 16 | 0.34 | 0.06 | 0.34 |
| (2,204) | 1:A:9:LEU:HB3 | 1:A:10:ALA:H | 16 | 0.33 | 0.02 | 0.34 |
| (1,561) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:21:GLN:HB2 | 16 | 0.33 | 0.12 | 0.32 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 16 | 0.33 | 0.08 | 0.33 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 16 | 0.33 | 0.08 | 0.33 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 16 | 0.33 | 0.08 | 0.33 |
| (2,1228) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:63:GLU:H | 16 | 0.33 | 0.15 | 0.3 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB1 | 16 | 0.33 | 0.01 | 0.33 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB2 | 16 | 0.33 | 0.01 | 0.33 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB3 | 16 | 0.33 | 0.01 | 0.33 |
| (2,1771) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:98:LEU:H | 16 | 0.33 | 0.05 | 0.33 |
| (2,943) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:47:PRO:HG2 | 16 | 0.33 | 0.02 | 0.33 |
| (2,366) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:17:SER:HA | 16 | 0.32 | 0.03 | 0.32 |
| (2,309) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HD3 | 16 | 0.32 | 0.0 | 0.32 |
| (2,306) | 1:A:85:PRO:HG2 | 1:A:85:PRO:HD2 | 16 | 0.32 | 0.0 | 0.32 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD11 | 16 | 0.32 | 0.04 | 0.31 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD12 | 16 | 0.32 | 0.04 | 0.31 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD13 | 16 | 0.32 | 0.04 | 0.31 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD11 | 16 | 0.32 | 0.04 | 0.31 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD12 | 16 | 0.32 | 0.04 | 0.31 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD13 | 16 | 0.32 | 0.04 | 0.31 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD11 | 16 | 0.32 | 0.04 | 0.31 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD12 | 16 | 0.32 | 0.04 | 0.31 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD13 | 16 | 0.32 | 0.04 | 0.31 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:29:VAL:H | 16 | 0.32 | 0.0 | 0.32 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:29:VAL:H | 16 | 0.32 | 0.0 | 0.32 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:29:VAL:H | 16 | 0.32 | 0.0 | 0.32 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB1 | 16 | 0.32 | 0.02 | 0.32 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB2 | 16 | 0.32 | 0.02 | 0.32 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB3 | 16 | 0.32 | 0.02 | 0.32 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB1 | 16 | 0.32 | 0.02 | 0.32 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB2 | 16 | 0.32 | 0.02 | 0.32 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB3 | 16 | 0.32 | 0.02 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:H | 16 | 0.32 | 0.02 | 0.32 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:H | 16 | 0.32 | 0.02 | 0.32 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 16 | 0.32 | 0.02 | 0.32 |
| (2,1363) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:93:HIS:H | 16 | 0.32 | 0.03 | 0.33 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:29:VAL:H | 16 | 0.32 | 0.01 | 0.32 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:29:VAL:H | 16 | 0.32 | 0.01 | 0.32 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:29:VAL:H | 16 | 0.32 | 0.01 | 0.32 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB1 | 16 | 0.32 | 0.03 | 0.32 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB2 | 16 | 0.32 | 0.03 | 0.32 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB3 | 16 | 0.32 | 0.03 | 0.32 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB1 | 16 | 0.32 | 0.03 | 0.32 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB2 | 16 | 0.32 | 0.03 | 0.32 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB3 | 16 | 0.32 | 0.03 | 0.32 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB1 | 16 | 0.32 | 0.03 | 0.32 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB2 | 16 | 0.32 | 0.03 | 0.32 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB3 | 16 | 0.32 | 0.03 | 0.32 |
| (1,390) | 1:A:65:ARG:HE | 1:A:65:ARG:HD3 | 16 | 0.32 | 0.14 | 0.26 |
| (2,433) | 1:A:21:GLN:HG2 | 1:A:21:GLN:HA | 16 | 0.32 | 0.06 | 0.3 |
| (2,1030) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG13 | 16 | 0.32 | 0.05 | 0.32 |
| (2,1567) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:83:ASP:H | 16 | 0.32 | 0.03 | 0.32 |
| (2,1194) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 16 | 0.32 | 0.03 | 0.32 |
| (1,528) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HB3 | 16 | 0.31 | 0.01 | 0.31 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 16 | 0.31 | 0.06 | 0.32 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 16 | 0.31 | 0.06 | 0.32 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 16 | 0.31 | 0.06 | 0.32 |
| (1,331) | 1:A:64:LEU:H | 1:A:64:LEU:HB2 | 16 | 0.31 | 0.02 | 0.31 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB1 | 1:A:47:PRO:HA | 16 | 0.31 | 0.02 | 0.31 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB2 | 1:A:47:PRO:HA | 16 | 0.31 | 0.02 | 0.31 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB3 | 1:A:47:PRO:HA | 16 | 0.31 | 0.02 | 0.31 |
| (2,1053) | 1:A:52:LYS:HG2 | 1:A:52:LYS:HA | 16 | 0.31 | 0.05 | 0.32 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ALA:H | 16 | 0.31 | 0.07 | 0.33 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ALA:H | 16 | 0.31 | 0.07 | 0.33 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ALA:H | 16 | 0.31 | 0.07 | 0.33 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG21 | 16 | 0.31 | 0.06 | 0.33 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG22 | 16 | 0.31 | 0.06 | 0.33 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG23 | 16 | 0.31 | 0.06 | 0.33 |
| (2,1601) | 1:A:86:THR:HB | 1:A:87:PRO:HD2 | 16 | 0.31 | 0.03 | 0.3 |
| (2,1888) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:13:LEU:H | 16 | 0.31 | 0.04 | 0.3 |
| (2,904) | 1:A:42:PRO:HG3 | 1:A:42:PRO:HD3 | 16 | 0.3 | 0.03 | 0.29 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:71:ASN:HB3 | 16 | 0.3 | 0.05 | 0.3 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:71:ASN:HB3 | 16 | 0.3 | 0.05 | 0.3 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:71:ASN:HB3 | 16 | 0.3 | 0.05 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB1 | 16 | 0.3 | 0.06 | 0.32 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB2 | 16 | 0.3 | 0.06 | 0.32 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB3 | 16 | 0.3 | 0.06 | 0.32 |
| (2,641) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:54:LEU:HA | 16 | 0.3 | 0.03 | 0.29 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HB | 16 | 0.3 | 0.06 | 0.3 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HB | 16 | 0.3 | 0.06 | 0.3 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HB | 16 | 0.3 | 0.06 | 0.3 |
| (1,80) | 1:A:86:THR:H | 1:A:85:PRO:HD2 | 16 | 0.3 | 0.06 | 0.3 |
| (2,262) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:12:ARG:H | 16 | 0.3 | 0.02 | 0.3 |
| (1,552) | 1:A:12:ARG:H | 1:A:12:ARG:HB3 | 16 | 0.3 | 0.01 | 0.3 |
| (2,1204) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:59:LEU:HA | 16 | 0.29 | 0.06 | 0.3 |
| (1,312) | 1:A:46:SER:H | 1:A:45:ILE:HG12 | 16 | 0.29 | 0.01 | 0.29 |
| (2,1047) | 1:A:52:LYS:HB2 | 1:A:53:ASP:H | 16 | 0.29 | 0.03 | 0.29 |
| (1,56) | 1:A:60:THR:H | 1:A:59:LEU:HB2 | 16 | 0.29 | 0.04 | 0.29 |
| (1,342) | 1:A:66:ASN:H | 1:A:66:ASN:HB2 | 16 | 0.29 | 0.05 | 0.29 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:51:PHE:HD1 | 16 | 0.29 | 0.03 | 0.28 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:51:PHE:HD2 | 16 | 0.29 | 0.03 | 0.28 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:51:PHE:HD1 | 16 | 0.29 | 0.03 | 0.28 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:51:PHE:HD2 | 16 | 0.29 | 0.03 | 0.28 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:51:PHE:HD1 | 16 | 0.29 | 0.03 | 0.28 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:51:PHE:HD2 | 16 | 0.29 | 0.03 | 0.28 |
| (2,1589) | 1:A:85:PRO:HB3 | 1:A:85:PRO:HA | 16 | 0.29 | 0.0 | 0.29 |
| (2,1688) | 1:A:91:THR:HB | 1:A:91:THR:HA | 16 | 0.29 | 0.0 | 0.29 |
| (2,1915) | 1:A:91:THR:HB | 1:A:91:THR:H | 16 | 0.28 | 0.02 | 0.29 |
| (2,624) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 16 | 0.28 | 0.01 | 0.28 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD11 | 16 | 0.28 | 0.04 | 0.28 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD12 | 16 | 0.28 | 0.04 | 0.28 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD13 | 16 | 0.28 | 0.04 | 0.28 |
| (2,1586) | 1:A:85:PRO:HG2 | 1:A:85:PRO:HB2 | 16 | 0.28 | 0.0 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HB2 | 16 | 0.28 | 0.0 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HB2 | 16 | 0.28 | 0.0 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HB2 | 16 | 0.28 | 0.0 | 0.28 |
| (2,1595) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HB3 | 16 | 0.28 | 0.0 | 0.28 |
| (1,145) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:50:ALA:HA | 16 | 0.28 | 0.0 | 0.28 |
| (2,976) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:50:ALA:H | 16 | 0.28 | 0.05 | 0.26 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HA | 16 | 0.28 | 0.03 | 0.28 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HA | 16 | 0.28 | 0.03 | 0.28 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HA | 16 | 0.28 | 0.03 | 0.28 |
| (2,1023) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HB3 | 16 | 0.27 | 0.01 | 0.28 |
| (1,493) | 1:A:25:LEU:H | 1:A:26:ALA:H | 16 | 0.27 | 0.01 | 0.27 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:29:VAL:HA | 16 | 0.27 | 0.02 | 0.28 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:29:VAL:HA | 16 | 0.27 | 0.02 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:29:VAL:HA | 16 | 0.27 | 0.02 | 0.28 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB1 | 16 | 0.27 | 0.03 | 0.27 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB2 | 16 | 0.27 | 0.03 | 0.27 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB3 | 16 | 0.27 | 0.03 | 0.27 |
| (2,17) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:95:HIS:HB2 | 16 | 0.27 | 0.04 | 0.27 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:85:PRO:HD2 | 16 | 0.27 | 0.06 | 0.28 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:85:PRO:HD2 | 16 | 0.27 | 0.06 | 0.28 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:85:PRO:HD2 | 16 | 0.27 | 0.06 | 0.28 |
| (1,25) | 1:A:83:ASP:H | 1:A:84:HIS:H | 16 | 0.26 | 0.05 | 0.28 |
| (2,447) | 1:A:20:GLN:HB3 | 1:A:20:GLN:HA | 16 | 0.26 | 0.02 | 0.26 |
| (1,309) | 1:A:56:ILE:H | 1:A:51:PHE:HB2 | 16 | 0.26 | 0.04 | 0.25 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 16 | 0.26 | 0.06 | 0.26 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 16 | 0.26 | 0.06 | 0.26 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 16 | 0.26 | 0.06 | 0.26 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:34:ALA:HA | 16 | 0.26 | 0.03 | 0.26 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:34:ALA:HA | 16 | 0.26 | 0.03 | 0.26 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:34:ALA:HA | 16 | 0.26 | 0.03 | 0.26 |
| (2,458) | 1:A:20:GLN:HB3 | 1:A:16:LEU:HB3 | 16 | 0.25 | 0.08 | 0.24 |
| (2,571) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:ALA:H | 16 | 0.25 | 0.06 | 0.24 |
| (2,533) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:25:LEU:HB2 | 16 | 0.25 | 0.06 | 0.24 |
| (2,832) | 1:A:37:LEU:HB2 | 1:A:37:LEU:H | 16 | 0.25 | 0.03 | 0.26 |
| (2,785) | 1:A:27:THR:HB | 1:A:23:GLN:HB2 | 16 | 0.25 | 0.05 | 0.24 |
| (2,870) | 1:A:42:PRO:HG2 | 1:A:42:PRO:HA | 16 | 0.25 | 0.01 | 0.25 |
| (2,1195) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:63:GLU:HB3 | 16 | 0.25 | 0.01 | 0.25 |
| (2,831) | 1:A:37:LEU:HA | 1:A:37:LEU:HB3 | 16 | 0.24 | 0.01 | 0.24 |
| (1,239) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG13 | 16 | 0.24 | 0.1 | 0.21 |
| (1,275) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:82:PHE:H | 16 | 0.24 | 0.03 | 0.24 |
| (2,921) | 1:A:44:SER:HB2 | 1:A:44:SER:HB3 | 16 | 0.24 | 0.0 | 0.24 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG21 | 16 | 0.24 | 0.02 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG22 | 16 | 0.24 | 0.02 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG23 | 16 | 0.24 | 0.02 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG21 | 16 | 0.24 | 0.02 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG22 | 16 | 0.24 | 0.02 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG23 | 16 | 0.24 | 0.02 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG21 | 16 | 0.24 | 0.02 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG22 | 16 | 0.24 | 0.02 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG23 | 16 | 0.24 | 0.02 | 0.25 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD11 | 16 | 0.24 | 0.07 | 0.22 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD12 | 16 | 0.24 | 0.07 | 0.22 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD13 | 16 | 0.24 | 0.07 | 0.22 |
| (2,1293) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:65:ARG:H | 16 | 0.24 | 0.04 | 0.24 |
| (2,477) | 1:A:25:LEU:HG | 1:A:25:LEU:H | 16 | 0.24 | 0.05 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:64:LEU:H | 16 | 0.23 | 0.08 | 0.22 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:64:LEU:H | 16 | 0.23 | 0.08 | 0.22 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:64:LEU:H | 16 | 0.23 | 0.08 | 0.22 |
| (2,298) | 1:A:94:LEU:HB2 | 1:A:94:LEU:H | 16 | 0.23 | 0.02 | 0.24 |
| (2,506) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:24:THR:H | 16 | 0.23 | 0.04 | 0.26 |
| (2,385) | 1:A:18:PRO:HB3 | 1:A:18:PRO:HB2 | 16 | 0.23 | 0.0 | 0.23 |
| (2,1598) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HG2 | 16 | 0.23 | 0.0 | 0.23 |
| (1,34) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:72:THR:H | 16 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (2,1548) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:81:ILE:HB | 16 | 0.22 | 0.01 | 0.22 |
| (2,18) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:95:HIS:HD2 | 16 | 0.22 | 0.04 | 0.22 |
| (2,388) | 1:A:45:ILE:HA | 1:A:46:SER:H | 16 | 0.22 | 0.03 | 0.22 |
| (2,1523) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:16:LEU:HA | 16 | 0.22 | 0.01 | 0.22 |
| (2,1445) | 1:A:88:HIS:HB2 | 1:A:88:HIS:H | 16 | 0.21 | 0.03 | 0.22 |
| (1,110) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:52:LYS:HG3 | 16 | 0.21 | 0.07 | 0.2 |
| (2,612) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HB2 | 16 | 0.21 | 0.0 | 0.21 |
| (2,963) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:93:HIS:HA | 16 | 0.21 | 0.01 | 0.21 |
| (2,344) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:15:GLY:H | 16 | 0.21 | 0.16 | 0.17 |
| (1,516) | 1:A:82:PHE:H | 1:A:82:PHE:HB2 | 16 | 0.21 | 0.01 | 0.2 |
| (2,525) | 1:A:96:THR:HB | 1:A:96:THR:H | 16 | 0.21 | 0.03 | 0.2 |
| (2,1562) | 1:A:82:PHE:HB2 | 1:A:82:PHE:H | 16 | 0.21 | 0.01 | 0.2 |
| (2,1885) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:13:LEU:HA | 16 | 0.21 | 0.04 | 0.2 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB1 | 16 | 0.21 | 0.05 | 0.19 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB2 | 16 | 0.21 | 0.05 | 0.19 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB3 | 16 | 0.21 | 0.05 | 0.19 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:90:LEU:H | 16 | 0.21 | 0.05 | 0.19 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:90:LEU:H | 16 | 0.21 | 0.05 | 0.19 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:90:LEU:H | 16 | 0.21 | 0.05 | 0.19 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD21 | 16 | 0.2 | 0.01 | 0.2 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD22 | 16 | 0.2 | 0.01 | 0.2 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD23 | 16 | 0.2 | 0.01 | 0.2 |
| (2,528) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:35:THR:H | 16 | 0.2 | 0.02 | 0.21 |
| (2,411) | 1:A:19:GLN:HB3 | 1:A:19:GLN:H | 16 | 0.2 | 0.03 | 0.2 |
| (2,1185) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:H | 16 | 0.2 | 0.02 | 0.2 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG21 | 16 | 0.2 | 0.04 | 0.19 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG22 | 16 | 0.2 | 0.04 | 0.19 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG23 | 16 | 0.2 | 0.04 | 0.19 |
| (2,52) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:85:PRO:HA | 16 | 0.2 | 0.05 | 0.2 |
| (2,52) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:85:PRO:HA | 16 | 0.2 | 0.05 | 0.2 |
| (2,33) | 1:A:84:HIS:HB2 | 1:A:84:HIS:HD2 | 16 | 0.2 | 0.02 | 0.19 |
| (1,74) | 1:A:89:ALA:H | 1:A:88:HIS:H | 16 | 0.19 | 0.02 | 0.19 |
| (2,269) | 1:A:12:ARG:HG2 | 1:A:13:LEU:H | 16 | 0.19 | 0.05 | 0.19 |
| (1,134) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:25:LEU:HB2 | 16 | 0.19 | 0.03 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,29) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:61:ALA:H | 16 | 0.19 | 0.02 | 0.19 |
| (2,1054) | 1:A:52:LYS:HG2 | 1:A:53:ASP:H | 16 | 0.19 | 0.02 | 0.19 |
| (2,377) | 1:A:18:PRO:HA | 1:A:18:PRO:HB3 | 16 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (2,1444) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:88:HIS:H | 16 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (1,171) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:28:LEU:HB3 | 16 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (2,435) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:20:GLN:HA | 16 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,601) | 1:A:33:THR:H | 1:A:34:ALA:H | 16 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,532) | 1:A:93:HIS:H | 1:A:93:HIS:HD2 | 16 | 0.18 | 0.03 | 0.16 |
| (2,1281) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:65:ARG:HA | 16 | 0.17 | 0.04 | 0.18 |
| (2,1138) | 1:A:86:THR:HA | 1:A:86:THR:H | 16 | 0.17 | 0.0 | 0.17 |
| (1,386) | 1:A:66:ASN:HD21 | 1:A:66:ASN:HD22 | 16 | 0.17 | 0.0 | 0.17 |
| (2,1462) | 1:A:73:GLY:HA2 | 1:A:73:GLY:H | 16 | 0.17 | 0.01 | 0.17 |
| (2,882) | 1:A:42:PRO:HD2 | 1:A:42:PRO:HG2 | 16 | 0.16 | 0.01 | 0.16 |
| (2,1073) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:54:LEU:HB2 | 16 | 0.16 | 0.01 | 0.16 |
| (2,527) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:24:THR:H | 16 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (1,125) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:21:GLN:HB2 | 16 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (2,383) | 1:A:18:PRO:HB3 | 1:A:18:PRO:HG3 | 16 | 0.16 | 0.03 | 0.15 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG21 | 16 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG22 | 16 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG23 | 16 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (1,68) | 1:A:20:GLN:H | 1:A:21:GLN:H | 16 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (2,977) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:49:THR:H | 16 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (2,552) | 1:A:25:LEU:HB3 | 1:A:25:LEU:HA | 16 | 0.15 | 0.01 | 0.15 |
| (2,389) | 1:A:19:GLN:HA | 1:A:19:GLN:H | 16 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (2,256) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:12:ARG:HB2 | 16 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (2,1711) | 1:A:92:GLN:HB2 | 1:A:92:GLN:HB3 | 16 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (2,1662) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:H | 16 | 0.15 | 0.01 | 0.15 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG21 | 16 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG22 | 16 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG23 | 16 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (2,930) | 1:A:45:ILE:HB | 1:A:45:ILE:HG13 | 16 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (2,51) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HB3 | 16 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,51) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HB3 | 16 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,874) | 1:A:42:PRO:HB3 | 1:A:42:PRO:HA | 16 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,1689) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:91:THR:H | 16 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:56:ILE:HB | 16 | 0.13 | 0.0 | 0.13 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:56:ILE:HB | 16 | 0.13 | 0.0 | 0.13 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:56:ILE:HB | 16 | 0.13 | 0.0 | 0.13 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:7:THR:HA | 16 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:7:THR:HA | 16 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:7:THR:HA | 16 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (2,879) | 1:A:60:THR:HB | 1:A:63:GLU:HB2 | 15 | 1.5 | 0.05 | 1.52 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,146) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:53:ASP:HB3 | 15 | 1.33 | 0.07 | 1.35 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG11 | 15 | 0.84 | 0.02 | 0.84 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG12 | 15 | 0.84 | 0.02 | 0.84 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG13 | 15 | 0.84 | 0.02 | 0.84 |
| (2,1864) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:ASN:HA | 15 | 0.83 | 0.21 | 0.92 |
| (2,448) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:36:VAL:HA | 15 | 0.81 | 0.1 | 0.82 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:40:HIS:HD2 | 15 | 0.76 | 0.42 | 0.62 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:40:HIS:HD2 | 15 | 0.76 | 0.42 | 0.62 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:40:HIS:HD2 | 15 | 0.76 | 0.42 | 0.62 |
| (2,1064) | 1:A:53:ASP:HB3 | 1:A:50:ALA:H | 15 | 0.73 | 0.07 | 0.75 |
| (2,330) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:15:GLY:H | 15 | 0.67 | 0.01 | 0.67 |
| (1,389) | 1:A:65:ARG:HE | 1:A:65:ARG:HG2 | 15 | 0.66 | 0.08 | 0.66 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG21 | 15 | 0.61 | 0.19 | 0.69 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG22 | 15 | 0.61 | 0.19 | 0.69 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG23 | 15 | 0.61 | 0.19 | 0.69 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:99:THR:H | 15 | 0.61 | 0.19 | 0.69 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:99:THR:H | 15 | 0.61 | 0.19 | 0.69 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:99:THR:H | 15 | 0.61 | 0.19 | 0.69 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG21 | 15 | 0.57 | 0.19 | 0.63 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG22 | 15 | 0.57 | 0.19 | 0.63 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG23 | 15 | 0.57 | 0.19 | 0.63 |
| (1,158) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:4:SER:HA | 15 | 0.53 | 0.11 | 0.57 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HB2 | 15 | 0.5 | 0.19 | 0.58 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HB2 | 15 | 0.5 | 0.19 | 0.58 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HB2 | 15 | 0.5 | 0.19 | 0.58 |
| (1,602) | 1:A:57:ASP:H | 1:A:57:ASP:HB3 | 15 | 0.5 | 0.16 | 0.54 |
| (2,449) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:H | 15 | 0.49 | 0.05 | 0.48 |
| (1,51) | 1:A:15:GLY:H | 1:A:14:ASN:HA | 15 | 0.47 | 0.01 | 0.47 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG21 | 1:A:63:GLU:HB2 | 15 | 0.47 | 0.04 | 0.47 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG22 | 1:A:63:GLU:HB2 | 15 | 0.47 | 0.04 | 0.47 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG23 | 1:A:63:GLU:HB2 | 15 | 0.47 | 0.04 | 0.47 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG21 | 15 | 0.45 | 0.1 | 0.43 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG22 | 15 | 0.45 | 0.1 | 0.43 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG23 | 15 | 0.45 | 0.1 | 0.43 |
| (1,329) | 1:A:64:LEU:H | 1:A:63:GLU:HB2 | 15 | 0.42 | 0.01 | 0.42 |
| (1,40) | 1:A:16:LEU:H | 1:A:15:GLY:H | 15 | 0.39 | 0.08 | 0.41 |
| (1,189) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:53:ASP:HB3 | 15 | 0.36 | 0.02 | 0.36 |
| (2,1483) | 1:A:60:THR:HA | 1:A:63:GLU:HB2 | 15 | 0.33 | 0.03 | 0.32 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB1 | 15 | 0.3 | 0.14 | 0.29 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB2 | 15 | 0.3 | 0.14 | 0.29 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB3 | 15 | 0.3 | 0.14 | 0.29 |
| (2,511) | 1:A:23:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HA | 15 | 0.29 | 0.05 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,1720) | 1:A:92:GLN:HG3 | 1:A:89:ALA:HA | 15 | 0.28 | 0.08 | 0.3 |
| (1,213) | 1:A:38:GLY:H | 1:A:38:GLY:HA2 | 15 | 0.28 | 0.06 | 0.3 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG21 | 15 | 0.27 | 0.04 | 0.27 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG22 | 15 | 0.27 | 0.04 | 0.27 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG23 | 15 | 0.27 | 0.04 | 0.27 |
| (2,932) | 1:A:45:ILE:HG13 | 1:A:42:PRO:HA | 15 | 0.27 | 0.1 | 0.25 |
| (2,1543) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:51:PHE:HD1 | 15 | 0.27 | 0.07 | 0.25 |
| (2,1543) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:51:PHE:HD2 | 15 | 0.27 | 0.07 | 0.25 |
| (2,1663) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:84:HIS:HB3 | 15 | 0.26 | 0.06 | 0.25 |
| (1,22) | 1:A:43:GLU:H | 1:A:44:SER:H | 15 | 0.26 | 0.1 | 0.3 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 15 | 0.24 | 0.04 | 0.25 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 15 | 0.24 | 0.04 | 0.25 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 15 | 0.24 | 0.04 | 0.25 |
| (1,23) | 1:A:44:SER:H | 1:A:45:ILE:H | 15 | 0.24 | 0.08 | 0.26 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG21 | 15 | 0.23 | 0.06 | 0.24 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG22 | 15 | 0.23 | 0.06 | 0.24 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG23 | 15 | 0.23 | 0.06 | 0.24 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG21 | 15 | 0.23 | 0.06 | 0.24 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG22 | 15 | 0.23 | 0.06 | 0.24 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG23 | 15 | 0.23 | 0.06 | 0.24 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG21 | 15 | 0.23 | 0.06 | 0.24 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG22 | 15 | 0.23 | 0.06 | 0.24 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG23 | 15 | 0.23 | 0.06 | 0.24 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB1 | 1:A:64:LEU:HB3 | 15 | 0.23 | 0.05 | 0.22 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB2 | 1:A:64:LEU:HB3 | 15 | 0.23 | 0.05 | 0.22 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB3 | 1:A:64:LEU:HB3 | 15 | 0.23 | 0.05 | 0.22 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD11 | 15 | 0.22 | 0.05 | 0.22 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD12 | 15 | 0.22 | 0.05 | 0.22 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD13 | 15 | 0.22 | 0.05 | 0.22 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD11 | 15 | 0.22 | 0.05 | 0.22 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD12 | 15 | 0.22 | 0.05 | 0.22 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD13 | 15 | 0.22 | 0.05 | 0.22 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD11 | 15 | 0.22 | 0.05 | 0.22 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD12 | 15 | 0.22 | 0.05 | 0.22 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD13 | 15 | 0.22 | 0.05 | 0.22 |
| (2,876) | 1:A:42:PRO:HB2 | 1:A:43:GLU:H | 15 | 0.21 | 0.05 | 0.2 |
| (2,1299) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:67:THR:H | 15 | 0.21 | 0.05 | 0.22 |
| (2,201) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HB3 | 15 | 0.2 | 0.04 | 0.19 |
| (2,1029) | 1:A:51:PHE:HB3 | 1:A:52:LYS:HG2 | 15 | 0.2 | 0.07 | 0.18 |
| (2,1224) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:63:GLU:HA | 15 | 0.19 | 0.02 | 0.19 |
| (1,38) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:74:LEU:H | 15 | 0.18 | 0.03 | 0.18 |
| (2,1850) | 1:A:70:HIS:HD2 | 1:A:70:HIS:HB3 | 15 | 0.17 | 0.03 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:45:ILE:HA | 15 | 0.16 | 0.02 | 0.17 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:45:ILE:HA | 15 | 0.16 | 0.02 | 0.17 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:45:ILE:HA | 15 | 0.16 | 0.02 | 0.17 |
| (2,1602) | 1:A:86:THR:HB | 1:A:88:HIS:H | 15 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (2,1135) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:58:SER:HA | 15 | 0.16 | 0.04 | 0.14 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB1 | 15 | 0.16 | 0.02 | 0.15 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB2 | 15 | 0.16 | 0.02 | 0.15 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB3 | 15 | 0.16 | 0.02 | 0.15 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:50:ALA:H | 15 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:50:ALA:H | 15 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:50:ALA:H | 15 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG21 | 15 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG22 | 15 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG23 | 15 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:93:HIS:HA | 14 | 2.03 | 0.07 | 2.02 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:93:HIS:HA | 14 | 2.03 | 0.07 | 2.02 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:93:HIS:HA | 14 | 2.03 | 0.07 | 2.02 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD21 | 14 | 1.59 | 0.06 | 1.62 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD22 | 14 | 1.59 | 0.06 | 1.62 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD23 | 14 | 1.59 | 0.06 | 1.62 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD11 | 14 | 1.36 | 0.03 | 1.35 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD12 | 14 | 1.36 | 0.03 | 1.35 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD13 | 14 | 1.36 | 0.03 | 1.35 |
| (2,1486) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:H | 14 | 1.31 | 0.36 | 1.37 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD21 | 14 | 1.27 | 0.62 | 0.89 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD22 | 14 | 1.27 | 0.62 | 0.89 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD23 | 14 | 1.27 | 0.62 | 0.89 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD21 | 14 | 1.06 | 0.07 | 1.08 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD22 | 14 | 1.06 | 0.07 | 1.08 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD23 | 14 | 1.06 | 0.07 | 1.08 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD21 | 14 | 0.98 | 0.08 | 0.98 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD22 | 14 | 0.98 | 0.08 | 0.98 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD23 | 14 | 0.98 | 0.08 | 0.98 |
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HA | 14 | 0.95 | 0.03 | 0.95 |
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HA | 14 | 0.95 | 0.03 | 0.95 |
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HA | 14 | 0.95 | 0.03 | 0.95 |
| (1,609) | 1:A:67:THR:H | 1:A:68:LEU:HB3 | 14 | 0.88 | 0.03 | 0.88 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD21 | 14 | 0.79 | 0.28 | 0.94 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD22 | 14 | 0.79 | 0.28 | 0.94 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD23 | 14 | 0.79 | 0.28 | 0.94 |
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:39:HIS:HB2 | 14 | 0.73 | 0.27 | 0.8 |
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:39:HIS:HB2 | 14 | 0.73 | 0.27 | 0.8 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:39:HIS:HB2 | 14 | 0.73 | 0.27 | 0.8 |
| (1,127) | 1:A:69:THR:H | 1:A:68:LEU:HB2 | 14 | 0.69 | 0.16 | 0.75 |
| (2,1920) | 1:A:76:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 14 | 0.65 | 0.13 | 0.66 |
| (2,1673) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:91:THR:H | 14 | 0.63 | 0.06 | 0.64 |
| (2,1868) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:ASN:H | 14 | 0.61 | 0.17 | 0.7 |
| (2,1676) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HB3 | 14 | 0.61 | 0.01 | 0.61 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD21 | 14 | 0.54 | 0.05 | 0.52 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD22 | 14 | 0.54 | 0.05 | 0.52 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD23 | 14 | 0.54 | 0.05 | 0.52 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:68:LEU:HB2 | 14 | 0.49 | 0.12 | 0.53 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:68:LEU:HB2 | 14 | 0.49 | 0.12 | 0.53 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:68:LEU:HB2 | 14 | 0.49 | 0.12 | 0.53 |
| (2,292) | 1:A:68:LEU:HB2 | 1:A:65:ARG:HA | 14 | 0.41 | 0.03 | 0.41 |
| (2,31) | 1:A:39:HIS:HD2 | 1:A:37:LEU:HB3 | 14 | 0.41 | 0.21 | 0.34 |
| (1,11) | 1:A:96:THR:H | 1:A:95:HIS:H | 14 | 0.4 | 0.05 | 0.42 |
| (2,1677) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HA | 14 | 0.38 | 0.02 | 0.38 |
| (1,590) | 1:A:96:THR:H | 1:A:97:ARG:H | 14 | 0.35 | 0.04 | 0.36 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD21 | 14 | 0.35 | 0.05 | 0.36 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD22 | 14 | 0.35 | 0.05 | 0.36 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD23 | 14 | 0.35 | 0.05 | 0.36 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD11 | 14 | 0.31 | 0.14 | 0.3 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD12 | 14 | 0.31 | 0.14 | 0.3 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD13 | 14 | 0.31 | 0.14 | 0.3 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD11 | 14 | 0.31 | 0.14 | 0.3 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD12 | 14 | 0.31 | 0.14 | 0.3 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD13 | 14 | 0.31 | 0.14 | 0.3 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD11 | 14 | 0.31 | 0.14 | 0.3 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD12 | 14 | 0.31 | 0.14 | 0.3 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD13 | 14 | 0.31 | 0.14 | 0.3 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:H | 14 | 0.3 | 0.09 | 0.3 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:H | 14 | 0.3 | 0.09 | 0.3 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:H | 14 | 0.3 | 0.09 | 0.3 |
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HB3 | 14 | 0.3 | 0.09 | 0.29 |
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HB3 | 14 | 0.3 | 0.09 | 0.29 |
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HB3 | 14 | 0.3 | 0.09 | 0.29 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD11 | 14 | 0.29 | 0.05 | 0.3 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD12 | 14 | 0.29 | 0.05 | 0.3 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD13 | 14 | 0.29 | 0.05 | 0.3 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD11 | 14 | 0.29 | 0.05 | 0.3 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD12 | 14 | 0.29 | 0.05 | 0.3 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD13 | 14 | 0.29 | 0.05 | 0.3 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD11 | 14 | 0.29 | 0.05 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD12 | 14 | 0.29 | 0.05 | 0.3 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD13 | 14 | 0.29 | 0.05 | 0.3 |
| (2,1540) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:95:HIS:HA | 14 | 0.29 | 0.13 | 0.24 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG11 | 14 | 0.28 | 0.09 | 0.27 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG12 | 14 | 0.28 | 0.09 | 0.27 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG13 | 14 | 0.28 | 0.09 | 0.27 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD11 | 14 | 0.26 | 0.06 | 0.29 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD12 | 14 | 0.26 | 0.06 | 0.29 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD13 | 14 | 0.26 | 0.06 | 0.29 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HE1 | 14 | 0.25 | 0.08 | 0.25 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HE2 | 14 | 0.25 | 0.08 | 0.25 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HE1 | 14 | 0.25 | 0.08 | 0.25 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HE2 | 14 | 0.25 | 0.08 | 0.25 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HE1 | 14 | 0.25 | 0.08 | 0.25 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HE2 | 14 | 0.25 | 0.08 | 0.25 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:74:LEU:H | 14 | 0.24 | 0.05 | 0.22 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:74:LEU:H | 14 | 0.24 | 0.05 | 0.22 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:74:LEU:H | 14 | 0.24 | 0.05 | 0.22 |
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG21 | 14 | 0.23 | 0.07 | 0.25 |
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG22 | 14 | 0.23 | 0.07 | 0.25 |
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG23 | 14 | 0.23 | 0.07 | 0.25 |
| (2,1630) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:51:PHE:H | 14 | 0.23 | 0.05 | 0.24 |
| (2,1848) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:22:GLN:H | 14 | 0.22 | 0.05 | 0.24 |
| (2,1301) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:65:ARG:H | 14 | 0.22 | 0.04 | 0.22 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:33:THR:HA | 14 | 0.21 | 0.05 | 0.22 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:33:THR:HA | 14 | 0.21 | 0.05 | 0.22 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:33:THR:HA | 14 | 0.21 | 0.05 | 0.22 |
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD21 | 14 | 0.21 | 0.06 | 0.22 |
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD22 | 14 | 0.21 | 0.06 | 0.22 |
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD23 | 14 | 0.21 | 0.06 | 0.22 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HB2 | 14 | 0.21 | 0.04 | 0.22 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:HB2 | 14 | 0.21 | 0.04 | 0.22 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:HB2 | 14 | 0.21 | 0.04 | 0.22 |
| (2,1453) | 1:A:40:HIS:HA | 1:A:40:HIS:HB2 | 14 | 0.2 | 0.05 | 0.2 |
| (2,1367) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:98:LEU:H | 14 | 0.2 | 0.06 | 0.19 |
| (2,1714) | 1:A:92:GLN:HG2 | 1:A:92:GLN:HA | 14 | 0.19 | 0.05 | 0.18 |
| (2,1542) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:84:HIS:H | 14 | 0.19 | 0.04 | 0.18 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:36:VAL:H | 14 | 0.19 | 0.05 | 0.17 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:36:VAL:H | 14 | 0.19 | 0.05 | 0.17 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:36:VAL:H | 14 | 0.19 | 0.05 | 0.17 |
| (2,1569) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:84:HIS:H | 14 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (2,1566) | 1:A:83:ASP:HB2 | 1:A:83:ASP:H | 14 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,1769) | 1:A:97:ARG:HA | 1:A:97:ARG:HG3 | 14 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (1,600) | 1:A:33:THR:H | 1:A:30:ALA:HA | 14 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (2,360) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:20:GLN:H | 13 | 1.21 | 0.04 | 1.21 |
| (2,360) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:20:GLN:H | 13 | 1.21 | 0.04 | 1.21 |
| (2,360) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:20:GLN:H | 13 | 1.21 | 0.04 | 1.21 |
| (1,91) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:71:ASN:HB2 | 13 | 1.07 | 0.01 | 1.07 |
| (2,461) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HD21 | 13 | 0.93 | 0.02 | 0.94 |
| (2,461) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HD22 | 13 | 0.93 | 0.02 | 0.94 |
| (2,461) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HD23 | 13 | 0.93 | 0.02 | 0.94 |
| (2,913) | 1:A:43:GLU:HG2 | 1:A:42:PRO:HA | 13 | 0.77 | 0.26 | 0.78 |
| (2,682) | 1:A:62:LEU:HD11 | 1:A:78:PRO:HB2 | 13 | 0.71 | 0.24 | 0.84 |
| (2,682) | 1:A:62:LEU:HD12 | 1:A:78:PRO:HB2 | 13 | 0.71 | 0.24 | 0.84 |
| (2,682) | 1:A:62:LEU:HD13 | 1:A:78:PRO:HB2 | 13 | 0.71 | 0.24 | 0.84 |
| (2,1497) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:79:THR:H | 13 | 0.71 | 0.01 | 0.7 |
| (1,351) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HD21 | 13 | 0.68 | 0.02 | 0.68 |
| (1,351) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HD22 | 13 | 0.68 | 0.02 | 0.68 |
| (1,351) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HD23 | 13 | 0.68 | 0.02 | 0.68 |
| (2,1538) | 1:A:98:LEU:HB3 | 1:A:99:THR:H | 13 | 0.51 | 0.28 | 0.55 |
| (1,45) | 1:A:79:THR:H | 1:A:79:THR:HA | 13 | 0.51 | 0.01 | 0.5 |
| (2,1480) | 1:A:78:PRO:HA | 1:A:79:THR:H | 13 | 0.45 | 0.06 | 0.46 |
| (2,356) | 1:A:16:LEU:HG | 1:A:16:LEU:HB3 | 13 | 0.41 | 0.01 | 0.41 |
| (2,364) | 1:A:17:SER:HB2 | 1:A:17:SER:H | 13 | 0.39 | 0.05 | 0.41 |
| (2,347) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:LEU:HD21 | 13 | 0.39 | 0.04 | 0.39 |
| (2,347) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:LEU:HD22 | 13 | 0.39 | 0.04 | 0.39 |
| (2,347) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:LEU:HD23 | 13 | 0.39 | 0.04 | 0.39 |
| (1,21) | 1:A:7:THR:H | 1:A:6:ALA:H | 13 | 0.34 | 0.04 | 0.33 |
| (2,1481) | 1:A:78:PRO:HA | 1:A:80:LEU:H | 13 | 0.34 | 0.05 | 0.34 |
| (2,473) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HD11 | 13 | 0.28 | 0.06 | 0.28 |
| (2,473) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HD12 | 13 | 0.28 | 0.06 | 0.28 |
| (2,473) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HD13 | 13 | 0.28 | 0.06 | 0.28 |
| (1,94) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:68:LEU:HA | 13 | 0.27 | 0.03 | 0.28 |
| (2,1722) | 1:A:92:GLN:HG3 | 1:A:92:GLN:H | 13 | 0.27 | 0.08 | 0.28 |
| (1,44) | 1:A:79:THR:H | 1:A:78:PRO:HA | 13 | 0.25 | 0.06 | 0.26 |
| (2,889) | 1:A:42:PRO:HD2 | 1:A:41:THR:HA | 13 | 0.18 | 0.05 | 0.16 |
| (2,361) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:17:SER:H | 13 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (2,361) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:17:SER:H | 13 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (2,361) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:17:SER:H | 13 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,95) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:71:ASN:HA | 13 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (2,156) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:71:ASN:HD22 | 13 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:61:ALA:HB1 | 13 | 0.17 | 0.04 | 0.15 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:61:ALA:HB2 | 13 | 0.17 | 0.04 | 0.15 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:61:ALA:HB3 | 13 | 0.17 | 0.04 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE2 | 1:A:61:ALA:HB1 | 13 | 0.17 | 0.04 | 0.15 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE2 | 1:A:61:ALA:HB2 | 13 | 0.17 | 0.04 | 0.15 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE2 | 1:A:61:ALA:HB3 | 13 | 0.17 | 0.04 | 0.15 |
| (2,1490) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:79:THR:HB | 13 | 0.16 | 0.03 | 0.15 |
| (2,1270) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:68:LEU:HB3 | 13 | 0.15 | 0.02 | 0.14 |
| (1,103) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:71:ASN:HB2 | 13 | 0.15 | 0.02 | 0.14 |
| (2,1710) | 1:A:92:GLN:HB2 | 1:A:89:ALA:HA | 13 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,20) | 1:A:35:THR:H | 1:A:34:ALA:H | 13 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (2,1379) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:97:ARG:HB2 | 13 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,52) | 1:A:15:GLY:H | 1:A:15:GLY:HA2 | 13 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,900) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:43:GLU:HB3 | 12 | 0.88 | 0.41 | 1.08 |
| (2,900) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:43:GLU:HB3 | 12 | 0.88 | 0.41 | 1.08 |
| (2,900) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:43:GLU:HB3 | 12 | 0.88 | 0.41 | 1.08 |
| (2,1749) | 1:A:95:HIS:HA | 1:A:98:LEU:HB3 | 12 | 0.75 | 0.03 | 0.75 |
| (2,1378) | 1:A:97:ARG:HB3 | 1:A:74:LEU:HD21 | 12 | 0.52 | 0.1 | 0.53 |
| (2,1378) | 1:A:97:ARG:HB3 | 1:A:74:LEU:HD22 | 12 | 0.52 | 0.1 | 0.53 |
| (2,1378) | 1:A:97:ARG:HB3 | 1:A:74:LEU:HD23 | 12 | 0.52 | 0.1 | 0.53 |
| (2,1044) | 1:A:52:LYS:HB2 | 1:A:52:LYS:HE2 | 12 | 0.42 | 0.28 | 0.33 |
| (2,1801) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:96:THR:HG21 | 12 | 0.36 | 0.08 | 0.4 |
| (2,1801) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:96:THR:HG22 | 12 | 0.36 | 0.08 | 0.4 |
| (2,1801) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:96:THR:HG23 | 12 | 0.36 | 0.08 | 0.4 |
| (2,1433) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:70:HIS:HD2 | 12 | 0.32 | 0.12 | 0.32 |
| (2,478) | 1:A:59:LEU:HG | 1:A:60:THR:H | 12 | 0.31 | 0.02 | 0.3 |
| (1,566) | 1:A:98:LEU:H | 1:A:98:LEU:HB3 | 12 | 0.28 | 0.03 | 0.28 |
| (2,1534) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD21 | 12 | 0.26 | 0.02 | 0.27 |
| (2,1534) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD22 | 12 | 0.26 | 0.02 | 0.27 |
| (2,1534) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD23 | 12 | 0.26 | 0.02 | 0.27 |
| (2,1402) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:44:SER:HB3 | 12 | 0.25 | 0.09 | 0.23 |
| (2,1402) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:44:SER:HB3 | 12 | 0.25 | 0.09 | 0.23 |
| (2,1402) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:44:SER:HB3 | 12 | 0.25 | 0.09 | 0.23 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:64:LEU:HD11 | 12 | 0.24 | 0.1 | 0.22 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:64:LEU:HD12 | 12 | 0.24 | 0.1 | 0.22 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:64:LEU:HD13 | 12 | 0.24 | 0.1 | 0.22 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:64:LEU:HD11 | 12 | 0.24 | 0.1 | 0.22 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:64:LEU:HD12 | 12 | 0.24 | 0.1 | 0.22 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:64:LEU:HD13 | 12 | 0.24 | 0.1 | 0.22 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:33:THR:HG21 | 12 | 0.24 | 0.05 | 0.25 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:33:THR:HG22 | 12 | 0.24 | 0.05 | 0.25 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:33:THR:HG23 | 12 | 0.24 | 0.05 | 0.25 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:33:THR:HG21 | 12 | 0.24 | 0.05 | 0.25 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:33:THR:HG22 | 12 | 0.24 | 0.05 | 0.25 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:33:THR:HG23 | 12 | 0.24 | 0.05 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:33:THR:HG21 | 12 | 0.24 | 0.05 | 0.25 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:33:THR:HG22 | 12 | 0.24 | 0.05 | 0.25 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:33:THR:HG23 | 12 | 0.24 | 0.05 | 0.25 |
| (2,34) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:51:PHE:HZ | 12 | 0.24 | 0.07 | 0.24 |
| (2,1157) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:60:THR:HB | 12 | 0.22 | 0.06 | 0.21 |
| (2,1157) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:60:THR:HB | 12 | 0.22 | 0.06 | 0.21 |
| (2,1157) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:60:THR:HB | 12 | 0.22 | 0.06 | 0.21 |
| (2,325) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 12 | 0.2 | 0.04 | 0.21 |
| (2,325) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 12 | 0.2 | 0.04 | 0.21 |
| (2,325) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 12 | 0.2 | 0.04 | 0.21 |
| (2,1560) | 1:A:82:PHE:HB2 | 1:A:83:ASP:H | 12 | 0.17 | 0.06 | 0.15 |
| (1,416) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 12 | 0.17 | 0.05 | 0.16 |
| (1,416) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 12 | 0.17 | 0.05 | 0.16 |
| (1,416) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 12 | 0.17 | 0.05 | 0.16 |
| (2,1188) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:63:GLU:H | 12 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (1,350) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HB3 | 12 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (1,529) | 1:A:65:ARG:H | 1:A:64:LEU:HB3 | 12 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (2,794) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:36:VAL:H | 12 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (2,794) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:36:VAL:H | 12 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (2,794) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:36:VAL:H | 12 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (2,875) | 1:A:78:PRO:HB3 | 1:A:78:PRO:HA | 12 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,503) | 1:A:100:GLN:H | 1:A:99:THR:HA | 12 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,194) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HG2 | 12 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,362) | 1:A:17:SER:HA | 1:A:17:SER:H | 12 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,1557) | 1:A:82:PHE:HA | 1:A:82:PHE:HB3 | 12 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,551) | 1:A:12:ARG:H | 1:A:12:ARG:HD3 | 11 | 1.04 | 0.05 | 1.04 |
| (1,234) | 1:A:102:HIS:H | 1:A:101:SER:HB2 | 11 | 0.99 | 0.19 | 1.02 |
| (2,1799) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:100:GLN:H | 11 | 0.88 | 0.08 | 0.86 |
| (2,1799) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:100:GLN:H | 11 | 0.88 | 0.08 | 0.86 |
| (2,1799) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:100:GLN:H | 11 | 0.88 | 0.08 | 0.86 |
| (2,191) | 1:A:9:LEU:HA | 1:A:12:ARG:HD3 | 11 | 0.72 | 0.06 | 0.69 |
| (2,1133) | 1:A:58:SER:HB3 | 1:A:59:LEU:HG | 11 | 0.68 | 0.49 | 0.38 |
| (2,139) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:4:SER:HB3 | 11 | 0.65 | 0.09 | 0.67 |
| (2,139) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:4:SER:HB3 | 11 | 0.65 | 0.09 | 0.67 |
| (2,139) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:4:SER:HB3 | 11 | 0.65 | 0.09 | 0.67 |
| (2,281) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:12:ARG:H | 11 | 0.64 | 0.05 | 0.64 |
| (2,923) | 1:A:101:SER:HB2 | 1:A:102:HIS:H | 11 | 0.59 | 0.19 | 0.62 |
| (2,394) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:19:GLN:HA | 11 | 0.54 | 0.02 | 0.54 |
| (1,479) | 1:A:68:LEU:H | 1:A:68:LEU:HG | 11 | 0.4 | 0.04 | 0.41 |
| (1,17) | 1:A:100:GLN:H | 1:A:99:THR:H | 11 | 0.31 | 0.14 | 0.31 |
| (2,1272) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 11 | 0.22 | 0.03 | 0.22 |
| (2,1272) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 11 | 0.22 | 0.03 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,1272) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 11 | 0.22 | 0.03 | 0.22 |
| (2,1334) | 1:A:69:THR:HA | 1:A:74:LEU:H | 11 | 0.21 | 0.08 | 0.18 |
| (2,1203) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:63:GLU:H | 11 | 0.21 | 0.09 | 0.16 |
| (2,220) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:10:ALA:HA | 11 | 0.2 | 0.03 | 0.2 |
| (2,220) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:10:ALA:HA | 11 | 0.2 | 0.03 | 0.2 |
| (2,220) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:10:ALA:HA | 11 | 0.2 | 0.03 | 0.2 |
| (1,86) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:28:LEU:HD11 | 11 | 0.2 | 0.05 | 0.19 |
| (1,86) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:28:LEU:HD12 | 11 | 0.2 | 0.05 | 0.19 |
| (1,86) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:28:LEU:HD13 | 11 | 0.2 | 0.05 | 0.19 |
| (2,1219) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:60:THR:HG21 | 11 | 0.19 | 0.06 | 0.17 |
| (2,1219) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:60:THR:HG22 | 11 | 0.19 | 0.06 | 0.17 |
| (2,1219) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:60:THR:HG23 | 11 | 0.19 | 0.06 | 0.17 |
| (2,997) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HG | 11 | 0.17 | 0.06 | 0.16 |
| (2,997) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HG | 11 | 0.17 | 0.06 | 0.16 |
| (2,997) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HG | 11 | 0.17 | 0.06 | 0.16 |
| (2,1789) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:H | 11 | 0.17 | 0.04 | 0.17 |
| (2,1679) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HB3 | 11 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (2,1679) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:HB3 | 11 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (2,1679) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:HB3 | 11 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (2,141) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:43:GLU:HG2 | 10 | 0.66 | 0.22 | 0.76 |
| (2,141) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:43:GLU:HG2 | 10 | 0.66 | 0.22 | 0.76 |
| (2,141) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:43:GLU:HG2 | 10 | 0.66 | 0.22 | 0.76 |
| (2,229) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:14:ASN:HD22 | 10 | 0.64 | 0.07 | 0.66 |
| (2,229) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:14:ASN:HD22 | 10 | 0.64 | 0.07 | 0.66 |
| (2,229) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:14:ASN:HD22 | 10 | 0.64 | 0.07 | 0.66 |
| (2,1764) | 1:A:97:ARG:HD2 | 1:A:97:ARG:HA | 10 | 0.64 | 0.06 | 0.64 |
| (2,1539) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:99:THR:H | 10 | 0.56 | 0.12 | 0.58 |
| (1,382) | 1:A:14:ASN:HD22 | 1:A:11:ALA:HB1 | 10 | 0.4 | 0.03 | 0.39 |
| (1,382) | 1:A:14:ASN:HD22 | 1:A:11:ALA:HB2 | 10 | 0.4 | 0.03 | 0.39 |
| (1,382) | 1:A:14:ASN:HD22 | 1:A:11:ALA:HB3 | 10 | 0.4 | 0.03 | 0.39 |
| (2,1377) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:74:LEU:HD21 | 10 | 0.31 | 0.07 | 0.3 |
| (2,1377) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:74:LEU:HD22 | 10 | 0.31 | 0.07 | 0.3 |
| (2,1377) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:74:LEU:HD23 | 10 | 0.31 | 0.07 | 0.3 |
| (2,492) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:19:GLN:HA | 10 | 0.29 | 0.11 | 0.25 |
| (2,403) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:20:GLN:H | 10 | 0.24 | 0.05 | 0.24 |
| (2,402) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:23:GLN:H | 10 | 0.23 | 0.06 | 0.24 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD11 | 10 | 0.22 | 0.07 | 0.25 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD12 | 10 | 0.22 | 0.07 | 0.25 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD13 | 10 | 0.22 | 0.07 | 0.25 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD11 | 10 | 0.22 | 0.07 | 0.25 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD12 | 10 | 0.22 | 0.07 | 0.25 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD13 | 10 | 0.22 | 0.07 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD11 | 10 | 0.22 | 0.07 | 0.25 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD12 | 10 | 0.22 | 0.07 | 0.25 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD13 | 10 | 0.22 | 0.07 | 0.25 |
| (2,980) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:54:LEU:HG | 10 | 0.22 | 0.1 | 0.21 |
| (2,274) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:12:ARG:HD3 | 10 | 0.17 | 0.04 | 0.17 |
| (2,639) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG21 | 9 | 0.87 | 0.1 | 0.88 |
| (2,639) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG22 | 9 | 0.87 | 0.1 | 0.88 |
| (2,639) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG23 | 9 | 0.87 | 0.1 | 0.88 |
| (2,891) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:43:GLU:H | 9 | 0.84 | 0.09 | 0.79 |
| (1,526) | 1:A:20:GLN:H | 1:A:20:GLN:HG3 | 9 | 0.59 | 0.04 | 0.61 |
| (2,1374) | 1:A:97:ARG:HD2 | 1:A:97:ARG:HB3 | 9 | 0.48 | 0.18 | 0.54 |
| (1,162) | 1:A:46:SER:H | 1:A:46:SER:HB3 | 9 | 0.46 | 0.02 | 0.46 |
| (2,890) | 1:A:41:THR:HA | 1:A:41:THR:HG21 | 9 | 0.38 | 0.02 | 0.37 |
| (2,890) | 1:A:41:THR:HA | 1:A:41:THR:HG22 | 9 | 0.38 | 0.02 | 0.37 |
| (2,890) | 1:A:41:THR:HA | 1:A:41:THR:HG23 | 9 | 0.38 | 0.02 | 0.37 |
| (2,1100) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:90:LEU:HB2 | 9 | 0.29 | 0.21 | 0.19 |
| (2,1100) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:90:LEU:HB2 | 9 | 0.29 | 0.21 | 0.19 |
| (2,1100) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:90:LEU:HB2 | 9 | 0.29 | 0.21 | 0.19 |
| (2,494) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:23:GLN:H | 9 | 0.26 | 0.14 | 0.25 |
| (2,897) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:44:SER:HB3 | 9 | 0.25 | 0.04 | 0.24 |
| (2,897) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:44:SER:HB3 | 9 | 0.25 | 0.04 | 0.24 |
| (2,897) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:44:SER:HB3 | 9 | 0.25 | 0.04 | 0.24 |
| (1,398) | 1:A:44:SER:H | 1:A:43:GLU:HG2 | 9 | 0.23 | 0.1 | 0.17 |
| (2,1499) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:78:PRO:HB3 | 9 | 0.21 | 0.14 | 0.16 |
| (2,960) | 1:A:47:PRO:HD2 | 1:A:46:SER:HB3 | 9 | 0.2 | 0.05 | 0.2 |
| (2,857) | 1:A:37:LEU:HD21 | 1:A:54:LEU:H | 9 | 0.19 | 0.06 | 0.18 |
| (2,857) | 1:A:37:LEU:HD22 | 1:A:54:LEU:H | 9 | 0.19 | 0.06 | 0.18 |
| (2,857) | 1:A:37:LEU:HD23 | 1:A:54:LEU:H | 9 | 0.19 | 0.06 | 0.18 |
| (2,464) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HA | 9 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (2,133) | 1:A:35:THR:HG21 | 1:A:36:VAL:H | 9 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (2,133) | 1:A:35:THR:HG22 | 1:A:36:VAL:H | 9 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (2,133) | 1:A:35:THR:HG23 | 1:A:36:VAL:H | 9 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (1,224) | 1:A:35:THR:H | 1:A:35:THR:HB | 9 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,571) | 1:A:24:THR:H | 1:A:23:GLN:HG2 | 9 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (2,404) | 1:A:23:GLN:HG2 | 1:A:24:THR:H | 9 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (2,1809) | 1:A:101:SER:HB2 | 1:A:100:GLN:H | 8 | 0.91 | 0.15 | 0.88 |
| (2,355) | 1:A:16:LEU:HG | 1:A:20:GLN:HG3 | 8 | 0.76 | 0.49 | 0.54 |
| (2,894) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:43:GLU:HB2 | 8 | 0.55 | 0.16 | 0.6 |
| (2,370) | 1:A:17:SER:HB2 | 1:A:20:GLN:HG3 | 8 | 0.49 | 0.16 | 0.48 |
| (2,1468) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:75:ASP:H | 8 | 0.42 | 0.1 | 0.47 |
| (2,917) | 1:A:44:SER:HA | 1:A:41:THR:HG21 | 8 | 0.41 | 0.1 | 0.45 |
| (2,917) | 1:A:44:SER:HA | 1:A:41:THR:HG22 | 8 | 0.41 | 0.1 | 0.45 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,917) | 1:A:44:SER:HA | 1:A:41:THR:HG23 | 8 | 0.41 | 0.1 | 0.45 |
| (2,1755) | 1:A:92:GLN:HA | 1:A:95:HIS:HB3 | 8 | 0.19 | 0.04 | 0.18 |
| (2,496) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:23:GLN:HG2 | 8 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (2,237) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:85:PRO:HB3 | 8 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (2,237) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:85:PRO:HB3 | 8 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (2,237) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:85:PRO:HB3 | 8 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (2,314) | 1:A:85:PRO:HD2 | 1:A:84:HIS:H | 8 | 0.14 | 0.03 | 0.14 |
| (2,786) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:34:ALA:HB1 | 8 | 0.14 | 0.03 | 0.13 |
| (2,786) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:34:ALA:HB2 | 8 | 0.14 | 0.03 | 0.13 |
| (2,786) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:34:ALA:HB3 | 8 | 0.14 | 0.03 | 0.13 |
| (2,1005) | 1:A:57:ASP:HA | 1:A:57:ASP:HB2 | 8 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (1,159) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HA | 8 | 0.13 | 0.01 | 0.12 |
| (1,24) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:14:ASN:H | 8 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG11 | 8 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG12 | 8 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG13 | 8 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG11 | 8 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG12 | 8 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG13 | 8 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG11 | 8 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG12 | 8 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG13 | 8 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,1765) | 1:A:97:ARG:HD3 | 1:A:97:ARG:HA | 7 | 0.81 | 0.16 | 0.86 |
| (2,337) | 1:A:11:ALA:HA | 1:A:14:ASN:HB2 | 7 | 0.33 | 0.08 | 0.33 |
| (1,233) | 1:A:102:HIS:H | 1:A:102:HIS:HB2 | 7 | 0.32 | 0.1 | 0.34 |
| (1,268) | 1:A:99:THR:H | 1:A:98:LEU:HD21 | 7 | 0.3 | 0.19 | 0.31 |
| (1,268) | 1:A:99:THR:H | 1:A:98:LEU:HD22 | 7 | 0.3 | 0.19 | 0.31 |
| (1,268) | 1:A:99:THR:H | 1:A:98:LEU:HD23 | 7 | 0.3 | 0.19 | 0.31 |
| (2,19) | 1:A:102:HIS:HB3 | 1:A:102:HIS:HD2 | 7 | 0.3 | 0.07 | 0.3 |
| (2,896) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:42:PRO:HD2 | 7 | 0.25 | 0.02 | 0.25 |
| (2,896) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:42:PRO:HD2 | 7 | 0.25 | 0.02 | 0.25 |
| (2,896) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:42:PRO:HD2 | 7 | 0.25 | 0.02 | 0.25 |
| (2,296) | 1:A:68:LEU:HB2 | 1:A:68:LEU:H | 7 | 0.23 | 0.13 | 0.13 |
| (2,7) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:71:ASN:HA | 7 | 0.22 | 0.06 | 0.22 |
| (2,7) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:71:ASN:HA | 7 | 0.22 | 0.06 | 0.22 |
| (2,7) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:71:ASN:HA | 7 | 0.22 | 0.06 | 0.22 |
| (1,376) | 1:A:58:SER:H | 1:A:58:SER:HB3 | 7 | 0.2 | 0.05 | 0.18 |
| (2,483) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 7 | 0.2 | 0.05 | 0.22 |
| (2,1914) | 1:A:91:THR:HB | 1:A:92:GLN:H | 7 | 0.14 | 0.03 | 0.13 |
| (1,406) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:47:PRO:HA | 7 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (2,565) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:71:ASN:HB2 | 7 | 0.14 | 0.03 | 0.13 |
| (2,565) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:71:ASN:HB2 | 7 | 0.14 | 0.03 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,565) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:71:ASN:HB2 | 7 | 0.14 | 0.03 | 0.13 |
| (1,347) | 1:A:17:SER:H | 1:A:17:SER:HB2 | 7 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (2,486) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:22:GLN:HB2 | 7 | 0.13 | 0.0 | 0.13 |
| (1,588) | 1:A:96:THR:H | 1:A:96:THR:HB | 7 | 0.13 | 0.03 | 0.12 |
| (2,1231) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:64:LEU:H | 7 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,187) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HD11 | 7 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,187) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HD12 | 7 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,187) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HD13 | 7 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (2,250) | 1:A:12:ARG:HG2 | 1:A:12:ARG:HB3 | 7 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (2,1234) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:65:ARG:HA | 7 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (2,1773) | 1:A:97:ARG:HD2 | 1:A:100:GLN:H | 6 | 0.72 | 0.17 | 0.76 |
| (2,892) | 1:A:43:GLU:HG2 | 1:A:41:THR:HB | 6 | 0.7 | 0.34 | 0.8 |
| (1,409) | 1:A:4:SER:H | 1:A:4:SER:HB2 | 6 | 0.34 | 0.11 | 0.38 |
| (1,249) | 1:A:99:THR:H | 1:A:98:LEU:HB2 | 6 | 0.24 | 0.06 | 0.24 |
| (2,198) | 1:A:9:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD21 | 6 | 0.24 | 0.1 | 0.22 |
| (2,198) | 1:A:9:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD22 | 6 | 0.24 | 0.1 | 0.22 |
| (2,198) | 1:A:9:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD23 | 6 | 0.24 | 0.1 | 0.22 |
| (2,20) | 1:A:102:HIS:HB2 | 1:A:102:HIS:HD2 | 6 | 0.24 | 0.06 | 0.26 |
| (1,443) | 1:A:75:ASP:H | 1:A:74:LEU:HB2 | 6 | 0.23 | 0.03 | 0.23 |
| (2,1220) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:35:THR:HG21 | 6 | 0.22 | 0.17 | 0.15 |
| (2,1220) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:35:THR:HG22 | 6 | 0.22 | 0.17 | 0.15 |
| (2,1220) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:35:THR:HG23 | 6 | 0.22 | 0.17 | 0.15 |
| (2,1803) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:100:GLN:H | 6 | 0.18 | 0.04 | 0.2 |
| (2,1844) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:14:ASN:HB2 | 6 | 0.18 | 0.03 | 0.18 |
| (1,440) | 1:A:75:ASP:H | 1:A:74:LEU:HA | 6 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (2,872) | 1:A:42:PRO:HA | 1:A:30:ALA:HB1 | 6 | 0.17 | 0.05 | 0.16 |
| (2,872) | 1:A:42:PRO:HA | 1:A:30:ALA:HB2 | 6 | 0.17 | 0.05 | 0.16 |
| (2,872) | 1:A:42:PRO:HA | 1:A:30:ALA:HB3 | 6 | 0.17 | 0.05 | 0.16 |
| (2,1668) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 6 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (2,1668) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 6 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (2,1668) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 6 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (2,1835) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:95:HIS:HD2 | 6 | 0.16 | 0.04 | 0.17 |
| (2,1835) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:95:HIS:HD2 | 6 | 0.16 | 0.04 | 0.17 |
| (2,1835) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:95:HIS:HD2 | 6 | 0.16 | 0.04 | 0.17 |
| (2,651) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:H | 6 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (2,651) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:H | 6 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (2,651) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:H | 6 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (2,1500) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:74:LEU:H | 6 | 0.13 | 0.01 | 0.14 |
| (2,1500) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:74:LEU:H | 6 | 0.13 | 0.01 | 0.14 |
| (2,1500) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:74:LEU:H | 6 | 0.13 | 0.01 | 0.14 |
| (2,1753) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:95:HIS:HA | 6 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (2,280) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:H | 5 | 1.06 | 0.02 | 1.05 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,444) | 1:A:75:ASP:H | 1:A:74:LEU:HD21 | 5 | 0.81 | 0.08 | 0.81 |
| (1,444) | 1:A:75:ASP:H | 1:A:74:LEU:HD22 | 5 | 0.81 | 0.08 | 0.81 |
| (1,444) | 1:A:75:ASP:H | 1:A:74:LEU:HD23 | 5 | 0.81 | 0.08 | 0.81 |
| (2,1695) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:90:LEU:HG | 5 | 0.65 | 0.63 | 0.19 |
| (2,851) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:ASP:H | 5 | 0.61 | 0.08 | 0.61 |
| (2,851) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:ASP:H | 5 | 0.61 | 0.08 | 0.61 |
| (2,851) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:ASP:H | 5 | 0.61 | 0.08 | 0.61 |
| (2,92) | 1:A:4:SER:HA | 1:A:3:ALA:HB1 | 5 | 0.53 | 0.2 | 0.41 |
| (2,92) | 1:A:4:SER:HA | 1:A:3:ALA:HB2 | 5 | 0.53 | 0.2 | 0.41 |
| (2,92) | 1:A:4:SER:HA | 1:A:3:ALA:HB3 | 5 | 0.53 | 0.2 | 0.41 |
| (2,1429) | 1:A:102:HIS:HD2 | 1:A:101:SER:HB2 | 5 | 0.48 | 0.23 | 0.46 |
| (2,273) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:12:ARG:HD3 | 5 | 0.47 | 0.02 | 0.48 |
| (2,276) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:9:LEU:HD11 | 5 | 0.4 | 0.11 | 0.42 |
| (2,276) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:9:LEU:HD12 | 5 | 0.4 | 0.11 | 0.42 |
| (2,276) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:9:LEU:HD13 | 5 | 0.4 | 0.11 | 0.42 |
| (2,96) | 1:A:4:SER:HB3 | 1:A:7:THR:HB | 5 | 0.32 | 0.14 | 0.4 |
| (2,487) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:95:HIS:HB2 | 5 | 0.31 | 0.17 | 0.33 |
| (2,1007) | 1:A:39:HIS:HA | 1:A:39:HIS:HD2 | 5 | 0.25 | 0.05 | 0.23 |
| (1,442) | 1:A:75:ASP:H | 1:A:75:ASP:HB3 | 5 | 0.2 | 0.09 | 0.17 |
| (2,1473) | 1:A:75:ASP:HB3 | 1:A:75:ASP:H | 5 | 0.2 | 0.09 | 0.17 |
| (2,1174) | 1:A:61:ALA:HB1 | 1:A:58:SER:HB2 | 5 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (2,1174) | 1:A:61:ALA:HB2 | 1:A:58:SER:HB2 | 5 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (2,1174) | 1:A:61:ALA:HB3 | 1:A:58:SER:HB2 | 5 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (2,1350) | 1:A:70:HIS:HB3 | 1:A:71:ASN:H | 5 | 0.14 | 0.03 | 0.14 |
| (2,76) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HE1 | 5 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (2,76) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HE2 | 5 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (2,76) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HE1 | 5 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (2,76) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HE2 | 5 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (2,76) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HE1 | 5 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (2,76) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HE2 | 5 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (2,765) | 1:A:61:ALA:HA | 1:A:56:ILE:HB | 5 | 0.14 | 0.03 | 0.12 |
| (2,1849) | 1:A:84:HIS:HD2 | 1:A:84:HIS:H | 5 | 0.14 | 0.03 | 0.13 |
| (2,1248) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HB3 | 5 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (2,1248) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HB3 | 5 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (2,1248) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HB3 | 5 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (2,1887) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:14:ASN:H | 5 | 0.13 | 0.01 | 0.12 |
| (2,1841) | 1:A:98:LEU:HD21 | 1:A:95:HIS:HD2 | 4 | 1.57 | 0.51 | 1.62 |
| (2,1841) | 1:A:98:LEU:HD22 | 1:A:95:HIS:HD2 | 4 | 1.57 | 0.51 | 1.62 |
| (2,1841) | 1:A:98:LEU:HD23 | 1:A:95:HIS:HD2 | 4 | 1.57 | 0.51 | 1.62 |
| (2,1784) | 1:A:98:LEU:HD11 | 1:A:94:LEU:HA | 4 | 1.21 | 0.07 | 1.22 |
| (2,1784) | 1:A:98:LEU:HD12 | 1:A:94:LEU:HA | 4 | 1.21 | 0.07 | 1.22 |
| (2,1784) | 1:A:98:LEU:HD13 | 1:A:94:LEU:HA | 4 | 1.21 | 0.07 | 1.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,422) | 1:A:66:ASN:HD21 | 1:A:66:ASN:H | 4 | 0.85 | 0.04 | 0.86 |
| (2,686) | 1:A:62:LEU:HD11 | 1:A:66:ASN:HD21 | 4 | 0.83 | 0.04 | 0.84 |
| (2,686) | 1:A:62:LEU:HD12 | 1:A:66:ASN:HD21 | 4 | 0.83 | 0.04 | 0.84 |
| (2,686) | 1:A:62:LEU:HD13 | 1:A:66:ASN:HD21 | 4 | 0.83 | 0.04 | 0.84 |
| (2,1782) | 1:A:98:LEU:HD21 | 1:A:98:LEU:HA | 4 | 0.75 | 0.01 | 0.74 |
| (2,1782) | 1:A:98:LEU:HD22 | 1:A:98:LEU:HA | 4 | 0.75 | 0.01 | 0.74 |
| (2,1782) | 1:A:98:LEU:HD23 | 1:A:98:LEU:HA | 4 | 0.75 | 0.01 | 0.74 |
| (2,914) | 1:A:43:GLU:HG2 | 1:A:43:GLU:H | 4 | 0.68 | 0.09 | 0.68 |
| (2,82) | 1:A:3:ALA:HA | 1:A:4:SER:H | 4 | 0.67 | 0.5 | 0.67 |
| (2,1143) | 1:A:59:LEU:HD11 | 1:A:59:LEU:HA | 4 | 0.64 | 0.01 | 0.64 |
| (2,1143) | 1:A:59:LEU:HD12 | 1:A:59:LEU:HA | 4 | 0.64 | 0.01 | 0.64 |
| (2,1143) | 1:A:59:LEU:HD13 | 1:A:59:LEU:HA | 4 | 0.64 | 0.01 | 0.64 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HD21 | 4 | 0.51 | 0.37 | 0.5 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HD22 | 4 | 0.51 | 0.37 | 0.5 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HD23 | 4 | 0.51 | 0.37 | 0.5 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:HD21 | 4 | 0.51 | 0.37 | 0.5 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:HD22 | 4 | 0.51 | 0.37 | 0.5 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:HD23 | 4 | 0.51 | 0.37 | 0.5 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:HD21 | 4 | 0.51 | 0.37 | 0.5 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:HD22 | 4 | 0.51 | 0.37 | 0.5 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:HD23 | 4 | 0.51 | 0.37 | 0.5 |
| (2,1531) | 1:A:98:LEU:HB3 | 1:A:98:LEU:HD11 | 4 | 0.5 | 0.02 | 0.49 |
| (2,1531) | 1:A:98:LEU:HB3 | 1:A:98:LEU:HD12 | 4 | 0.5 | 0.02 | 0.49 |
| (2,1531) | 1:A:98:LEU:HB3 | 1:A:98:LEU:HD13 | 4 | 0.5 | 0.02 | 0.49 |
| (1,568) | 1:A:98:LEU:H | 1:A:98:LEU:HD11 | 4 | 0.33 | 0.03 | 0.32 |
| (1,568) | 1:A:98:LEU:H | 1:A:98:LEU:HD12 | 4 | 0.33 | 0.03 | 0.32 |
| (1,568) | 1:A:98:LEU:H | 1:A:98:LEU:HD13 | 4 | 0.33 | 0.03 | 0.32 |
| (2,1783) | 1:A:98:LEU:HD11 | 1:A:98:LEU:H | 4 | 0.33 | 0.03 | 0.32 |
| (2,1783) | 1:A:98:LEU:HD12 | 1:A:98:LEU:H | 4 | 0.33 | 0.03 | 0.32 |
| (2,1783) | 1:A:98:LEU:HD13 | 1:A:98:LEU:H | 4 | 0.33 | 0.03 | 0.32 |
| (1,438) | 1:A:75:ASP:H | 1:A:76:LEU:H | 4 | 0.3 | 0.07 | 0.32 |
| (1,7) | 1:A:61:ALA:H | 1:A:57:ASP:H | 4 | 0.25 | 0.04 | 0.26 |
| (1,500) | 1:A:100:GLN:H | 1:A:100:GLN:HB3 | 4 | 0.25 | 0.08 | 0.28 |
| (2,22) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:40:HIS:HB2 | 4 | 0.24 | 0.03 | 0.24 |
| (2,489) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:22:GLN:HA | 4 | 0.23 | 0.06 | 0.21 |
| (2,111) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:4:SER:HB3 | 4 | 0.22 | 0.05 | 0.2 |
| (2,111) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:4:SER:HB3 | 4 | 0.22 | 0.05 | 0.2 |
| (2,111) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:4:SER:HB3 | 4 | 0.22 | 0.05 | 0.2 |
| (2,490) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:22:GLN:HA | 4 | 0.18 | 0.06 | 0.18 |
| (2,401) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:23:GLN:H | 4 | 0.18 | 0.03 | 0.16 |
| (1,292) | 1:A:37:LEU:H | 1:A:36:VAL:HG11 | 4 | 0.16 | 0.08 | 0.12 |
| (1,292) | 1:A:37:LEU:H | 1:A:36:VAL:HG12 | 4 | 0.16 | 0.08 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,292) | 1:A:37:LEU:H | 1:A:36:VAL:HG13 | 4 | 0.16 | 0.08 | 0.12 |
| (2,24) | 1:A:39:HIS:HD2 | 1:A:39:HIS:HB2 | 4 | 0.16 | 0.05 | 0.14 |
| (1,130) | 1:A:69:THR:H | 1:A:69:THR:HB | 4 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (2,1154) | 1:A:60:THR:HB | 1:A:63:GLU:H | 4 | 0.14 | 0.02 | 0.15 |
| (2,1448) | 1:A:95:HIS:HB3 | 1:A:95:HIS:H | 4 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (2,1907) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:56:ILE:HB | 4 | 0.14 | 0.03 | 0.14 |
| (2,1006) | 1:A:57:ASP:HA | 1:A:57:ASP:H | 4 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (2,731) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:42:PRO:HG2 | 4 | 0.13 | 0.01 | 0.14 |
| (1,5) | 1:A:88:HIS:H | 1:A:89:ALA:H | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,105) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:94:LEU:HD21 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,105) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:94:LEU:HD22 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,105) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:94:LEU:HD23 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (2,155) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:71:ASN:HD21 | 3 | 1.28 | 0.03 | 1.27 |
| (1,92) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:71:ASN:HA | 3 | 1.08 | 0.03 | 1.07 |
| (1,392) | 1:A:38:GLY:H | 1:A:37:LEU:HB2 | 3 | 0.98 | 0.08 | 0.95 |
| (2,1718) | 1:A:100:GLN:HG2 | 1:A:99:THR:HB | 3 | 0.81 | 0.46 | 1.04 |
| (1,254) | 1:A:79:THR:H | 1:A:78:PRO:HB3 | 3 | 0.76 | 0.01 | 0.76 |
| (2,358) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:13:LEU:HA | 3 | 0.76 | 0.01 | 0.76 |
| (2,358) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:13:LEU:HA | 3 | 0.76 | 0.01 | 0.76 |
| (2,358) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:13:LEU:HA | 3 | 0.76 | 0.01 | 0.76 |
| (2,1871) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:15:GLY:HA2 | 3 | 0.74 | 0.08 | 0.7 |
| (2,1871) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:15:GLY:HA2 | 3 | 0.74 | 0.08 | 0.7 |
| (2,1871) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:15:GLY:HA2 | 3 | 0.74 | 0.08 | 0.7 |
| (2,1793) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:99:THR:HG21 | 3 | 0.53 | 0.22 | 0.51 |
| (2,1793) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:99:THR:HG22 | 3 | 0.53 | 0.22 | 0.51 |
| (2,1793) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:99:THR:HG23 | 3 | 0.53 | 0.22 | 0.51 |
| (2,365) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:17:SER:H | 3 | 0.51 | 0.03 | 0.53 |
| (2,1431) | 1:A:67:THR:HB | 1:A:71:ASN:HD21 | 3 | 0.5 | 0.07 | 0.46 |
| (2,1505) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:71:ASN:HB2 | 3 | 0.46 | 0.07 | 0.47 |
| (2,1505) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:71:ASN:HB2 | 3 | 0.46 | 0.07 | 0.47 |
| (2,1505) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:71:ASN:HB2 | 3 | 0.46 | 0.07 | 0.47 |
| (2,1446) | 1:A:95:HIS:HB3 | 1:A:96:THR:H | 3 | 0.45 | 0.22 | 0.5 |
| (2,1173) | 1:A:61:ALA:HB1 | 1:A:58:SER:HA | 3 | 0.39 | 0.14 | 0.47 |
| (2,1173) | 1:A:61:ALA:HB2 | 1:A:58:SER:HA | 3 | 0.39 | 0.14 | 0.47 |
| (2,1173) | 1:A:61:ALA:HB3 | 1:A:58:SER:HA | 3 | 0.39 | 0.14 | 0.47 |
| (1,128) | 1:A:69:THR:H | 1:A:69:THR:HG21 | 3 | 0.38 | 0.08 | 0.34 |
| (1,128) | 1:A:69:THR:H | 1:A:69:THR:HG22 | 3 | 0.38 | 0.08 | 0.34 |
| (1,128) | 1:A:69:THR:H | 1:A:69:THR:HG23 | 3 | 0.38 | 0.08 | 0.34 |
| (2,114) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:7:THR:H | 3 | 0.35 | 0.07 | 0.33 |
| (2,114) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:7:THR:H | 3 | 0.35 | 0.07 | 0.33 |
| (2,114) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:7:THR:H | 3 | 0.35 | 0.07 | 0.33 |
| (2,353) | 1:A:16:LEU:HG | 1:A:16:LEU:HA | 3 | 0.3 | 0.01 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,258) | 1:A:72:THR:H | 1:A:71:ASN:HB2 | 3 | 0.27 | 0.02 | 0.29 |
| (1,185) | 1:A:16:LEU:H | 1:A:16:LEU:HD21 | 3 | 0.26 | 0.09 | 0.3 |
| (1,185) | 1:A:16:LEU:H | 1:A:16:LEU:HD22 | 3 | 0.26 | 0.09 | 0.3 |
| (1,185) | 1:A:16:LEU:H | 1:A:16:LEU:HD23 | 3 | 0.26 | 0.09 | 0.3 |
| (1,89) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:71:ASN:HB3 | 3 | 0.23 | 0.02 | 0.23 |
| (2,1426) | 1:A:88:HIS:HD2 | 1:A:92:GLN:HG3 | 3 | 0.21 | 0.02 | 0.21 |
| (2,922) | 1:A:44:SER:HB2 | 1:A:41:THR:HG21 | 3 | 0.2 | 0.03 | 0.19 |
| (2,922) | 1:A:44:SER:HB2 | 1:A:41:THR:HG22 | 3 | 0.2 | 0.03 | 0.19 |
| (2,922) | 1:A:44:SER:HB2 | 1:A:41:THR:HG23 | 3 | 0.2 | 0.03 | 0.19 |
| (2,1736) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:93:HIS:HD2 | 3 | 0.19 | 0.08 | 0.17 |
| (2,1741) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HB2 | 3 | 0.19 | 0.07 | 0.17 |
| (2,465) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:H | 3 | 0.19 | 0.02 | 0.2 |
| (2,1819) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:8:ASP:HB2 | 3 | 0.19 | 0.03 | 0.17 |
| (2,1819) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:8:ASP:HB2 | 3 | 0.19 | 0.03 | 0.17 |
| (2,1819) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:8:ASP:HB2 | 3 | 0.19 | 0.03 | 0.17 |
| (2,1274) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:65:ARG:HG2 | 3 | 0.18 | 0.05 | 0.16 |
| (1,475) | 1:A:68:LEU:H | 1:A:68:LEU:HB2 | 3 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (2,359) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:21:GLN:HG2 | 3 | 0.17 | 0.02 | 0.18 |
| (2,359) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:21:GLN:HG2 | 3 | 0.17 | 0.02 | 0.18 |
| (2,359) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:21:GLN:HG2 | 3 | 0.17 | 0.02 | 0.18 |
| (1,484) | 1:A:68:LEU:H | 1:A:67:THR:HB | 3 | 0.16 | 0.01 | 0.17 |
| (2,265) | 1:A:12:ARG:HG2 | 1:A:11:ALA:HB1 | 3 | 0.16 | 0.03 | 0.14 |
| (2,265) | 1:A:12:ARG:HG2 | 1:A:11:ALA:HB2 | 3 | 0.16 | 0.03 | 0.14 |
| (2,265) | 1:A:12:ARG:HG2 | 1:A:11:ALA:HB3 | 3 | 0.16 | 0.03 | 0.14 |
| (2,1096) | 1:A:56:ILE:HG12 | 1:A:64:LEU:HD11 | 3 | 0.16 | 0.06 | 0.12 |
| (2,1096) | 1:A:56:ILE:HG12 | 1:A:64:LEU:HD12 | 3 | 0.16 | 0.06 | 0.12 |
| (2,1096) | 1:A:56:ILE:HG12 | 1:A:64:LEU:HD13 | 3 | 0.16 | 0.06 | 0.12 |
| (2,354) | 1:A:16:LEU:HG | 1:A:16:LEU:H | 3 | 0.14 | 0.03 | 0.13 |
| (2,351) | 1:A:16:LEU:HA | 1:A:16:LEU:HD21 | 3 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (2,351) | 1:A:16:LEU:HA | 1:A:16:LEU:HD22 | 3 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (2,351) | 1:A:16:LEU:HA | 1:A:16:LEU:HD23 | 3 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (2,736) | 1:A:26:ALA:HA | 1:A:91:THR:HG21 | 3 | 0.14 | 0.02 | 0.15 |
| (2,736) | 1:A:26:ALA:HA | 1:A:91:THR:HG22 | 3 | 0.14 | 0.02 | 0.15 |
| (2,736) | 1:A:26:ALA:HA | 1:A:91:THR:HG23 | 3 | 0.14 | 0.02 | 0.15 |
| (2,1836) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:13:LEU:H | 3 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (2,1836) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:13:LEU:H | 3 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (2,1836) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:13:LEU:H | 3 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (2,1276) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:62:LEU:HA | 3 | 0.14 | 0.03 | 0.13 |
| (2,1409) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:37:LEU:H | 3 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (2,1409) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:37:LEU:H | 3 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (2,1409) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:37:LEU:H | 3 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (2,927) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:56:ILE:HA | 3 | 0.13 | 0.01 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,927) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:56:ILE:HA | 3 | 0.13 | 0.01 | 0.12 |
| (2,927) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:56:ILE:HA | 3 | 0.13 | 0.01 | 0.12 |
| (2,1320) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:68:LEU:HB2 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (2,1303) | 1:A:66:ASN:HB3 | 1:A:66:ASN:HD21 | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,1834) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HD11 | 2 | 1.04 | 0.08 | 1.04 |
| (2,1834) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HD12 | 2 | 1.04 | 0.08 | 1.04 |
| (2,1834) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HD13 | 2 | 1.04 | 0.08 | 1.04 |
| (2,1834) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HD11 | 2 | 1.04 | 0.08 | 1.04 |
| (2,1834) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HD12 | 2 | 1.04 | 0.08 | 1.04 |
| (2,1834) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HD13 | 2 | 1.04 | 0.08 | 1.04 |
| (2,1834) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HD11 | 2 | 1.04 | 0.08 | 1.04 |
| (2,1834) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HD12 | 2 | 1.04 | 0.08 | 1.04 |
| (2,1834) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HD13 | 2 | 1.04 | 0.08 | 1.04 |
| (2,1325) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:65:ARG:HA | 2 | 0.97 | 0.05 | 0.97 |
| (2,1892) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:90:LEU:H | 2 | 0.88 | 0.07 | 0.88 |
| (1,410) | 1:A:4:SER:H | 1:A:2:ALA:HB1 | 2 | 0.84 | 0.02 | 0.84 |
| (1,410) | 1:A:4:SER:H | 1:A:2:ALA:HB2 | 2 | 0.84 | 0.02 | 0.84 |
| (1,410) | 1:A:4:SER:H | 1:A:2:ALA:HB3 | 2 | 0.84 | 0.02 | 0.84 |
| (1,501) | 1:A:100:GLN:H | 1:A:100:GLN:HG3 | 2 | 0.73 | 0.2 | 0.73 |
| (2,1319) | 1:A:68:LEU:HB3 | 1:A:68:LEU:H | 2 | 0.62 | 0.02 | 0.62 |
| (2,1620) | 1:A:87:PRO:HA | 1:A:90:LEU:HB3 | 2 | 0.6 | 0.09 | 0.6 |
| (1,408) | 1:A:4:SER:H | 1:A:3:ALA:HA | 2 | 0.57 | 0.02 | 0.57 |
| (2,1854) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HB2 | 2 | 0.54 | 0.01 | 0.54 |
| (2,1043) | 1:A:52:LYS:HB3 | 1:A:52:LYS:HE2 | 2 | 0.51 | 0.16 | 0.51 |
| (2,240) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD21 | 2 | 0.5 | 0.03 | 0.5 |
| (2,240) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD22 | 2 | 0.5 | 0.03 | 0.5 |
| (2,240) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD23 | 2 | 0.5 | 0.03 | 0.5 |
| (2,240) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD21 | 2 | 0.5 | 0.03 | 0.5 |
| (2,240) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD22 | 2 | 0.5 | 0.03 | 0.5 |
| (2,240) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD23 | 2 | 0.5 | 0.03 | 0.5 |
| (2,240) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD21 | 2 | 0.5 | 0.03 | 0.5 |
| (2,240) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD22 | 2 | 0.5 | 0.03 | 0.5 |
| (2,240) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD23 | 2 | 0.5 | 0.03 | 0.5 |
| (2,1873) | 1:A:98:LEU:HD21 | 1:A:10:ALA:HA | 2 | 0.48 | 0.01 | 0.48 |
| (2,1873) | 1:A:98:LEU:HD22 | 1:A:10:ALA:HA | 2 | 0.48 | 0.01 | 0.48 |
| (2,1873) | 1:A:98:LEU:HD23 | 1:A:10:ALA:HA | 2 | 0.48 | 0.01 | 0.48 |
| (2,235) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:52:LYS:HE2 | 2 | 0.42 | 0.13 | 0.42 |
| (2,235) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:52:LYS:HE2 | 2 | 0.42 | 0.13 | 0.42 |
| (2,235) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:52:LYS:HE2 | 2 | 0.42 | 0.13 | 0.42 |
| (1,569) | 1:A:98:LEU:H | 1:A:98:LEU:HD21 | 2 | 0.34 | 0.01 | 0.34 |
| (1,569) | 1:A:98:LEU:H | 1:A:98:LEU:HD22 | 2 | 0.34 | 0.01 | 0.34 |
| (1,569) | 1:A:98:LEU:H | 1:A:98:LEU:HD23 | 2 | 0.34 | 0.01 | 0.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,1547) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HA | 2 | 0.32 | 0.01 | 0.32 |
| (2,1547) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HA | 2 | 0.32 | 0.01 | 0.32 |
| (2,1547) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HA | 2 | 0.32 | 0.01 | 0.32 |
| (1,586) | 1:A:96:THR:H | 1:A:95:HIS:HB3 | 2 | 0.3 | 0.1 | 0.3 |
| (1,490) | 1:A:102:HIS:H | 1:A:102:HIS:HB3 | 2 | 0.29 | 0.11 | 0.29 |
| (2,372) | 1:A:18:PRO:HA | 1:A:18:PRO:HD3 | 2 | 0.29 | 0.05 | 0.29 |
| (1,248) | 1:A:99:THR:H | 1:A:98:LEU:HB3 | 2 | 0.28 | 0.06 | 0.28 |
| (2,1806) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:97:ARG:HA | 2 | 0.24 | 0.12 | 0.24 |
| (1,478) | 1:A:68:LEU:H | 1:A:68:LEU:HB3 | 2 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (2,36) | 1:A:82:PHE:HZ | 1:A:58:SER:HA | 2 | 0.22 | 0.05 | 0.22 |
| (2,1656) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:51:PHE:HE1 | 2 | 0.21 | 0.01 | 0.21 |
| (2,1656) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:51:PHE:HE2 | 2 | 0.21 | 0.01 | 0.21 |
| (2,1656) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:51:PHE:HE1 | 2 | 0.21 | 0.01 | 0.21 |
| (2,1656) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:51:PHE:HE2 | 2 | 0.21 | 0.01 | 0.21 |
| (2,1656) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:51:PHE:HE1 | 2 | 0.21 | 0.01 | 0.21 |
| (2,1656) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:51:PHE:HE2 | 2 | 0.21 | 0.01 | 0.21 |
| (1,354) | 1:A:91:THR:H | 1:A:90:LEU:HB2 | 2 | 0.21 | 0.0 | 0.21 |
| (2,481) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:GLN:HA | 2 | 0.2 | 0.08 | 0.2 |
| (2,1339) | 1:A:69:THR:HA | 1:A:74:LEU:HB2 | 2 | 0.2 | 0.03 | 0.2 |
| (1,219) | 1:A:7:THR:H | 1:A:6:ALA:HB1 | 2 | 0.19 | 0.06 | 0.19 |
| (1,219) | 1:A:7:THR:H | 1:A:6:ALA:HB2 | 2 | 0.19 | 0.06 | 0.19 |
| (1,219) | 1:A:7:THR:H | 1:A:6:ALA:HB3 | 2 | 0.19 | 0.06 | 0.19 |
| (2,1666) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:90:LEU:HA | 2 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (2,1544) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:84:HIS:HB2 | 2 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (1,348) | 1:A:17:SER:H | 1:A:20:GLN:HB3 | 2 | 0.16 | 0.01 | 0.16 |
| (1,273) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:78:PRO:HA | 2 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (2,136) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:8:ASP:H | 2 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (2,136) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:8:ASP:H | 2 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (2,136) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:8:ASP:H | 2 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (2,376) | 1:A:18:PRO:HA | 1:A:21:GLN:HG2 | 2 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (2,735) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:85:PRO:HB2 | 2 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (2,735) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:85:PRO:HB2 | 2 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (2,735) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:85:PRO:HB2 | 2 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (1,592) | 1:A:101:SER:H | 1:A:101:SER:HB2 | 2 | 0.14 | 0.03 | 0.14 |
| (2,1172) | 1:A:61:ALA:HB1 | 1:A:81:ILE:HB | 2 | 0.14 | 0.0 | 0.14 |
| (2,1172) | 1:A:61:ALA:HB2 | 1:A:81:ILE:HB | 2 | 0.14 | 0.0 | 0.14 |
| (2,1172) | 1:A:61:ALA:HB3 | 1:A:81:ILE:HB | 2 | 0.14 | 0.0 | 0.14 |
| (2,1404) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:H | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (2,1404) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:H | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (2,1404) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:H | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,346) | 1:A:17:SER:H | 1:A:17:SER:HB3 | 2 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (2,1440) | 1:A:72:THR:HB | 1:A:9:LEU:HD21 | 2 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

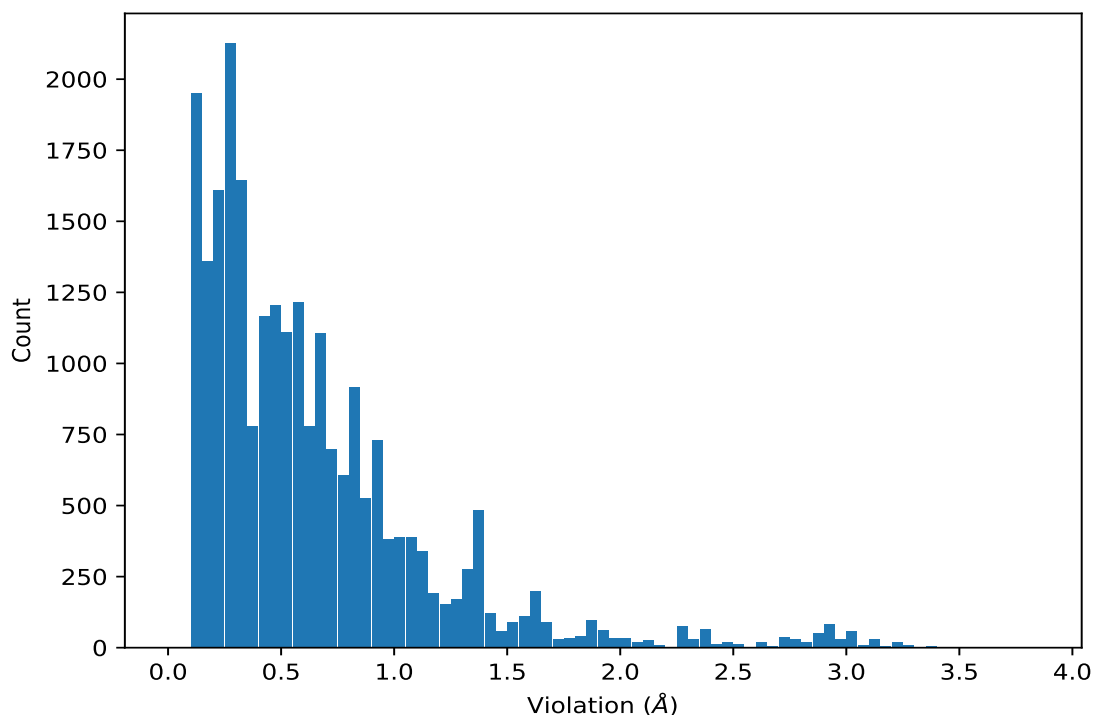
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,1440) | 1:A:72:THR:HB | 1:A:9:LEU:HD22 | 2 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (2,1440) | 1:A:72:THR:HB | 1:A:9:LEU:HD23 | 2 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,353) | 1:A:91:THR:H | 1:A:90:LEU:HB3 | 2 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,3) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:51:PHE:H | 2 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,242) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:42:PRO:HA | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,763) | 1:A:61:ALA:HA | 1:A:64:LEU:HA | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,1004) | 1:A:57:ASP:HB3 | 1:A:57:ASP:HA | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,784) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:37:LEU:H | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (2,1380) | 1:A:97:ARG:HB3 | 1:A:97:ARG:HG3 | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,1439) | 1:A:72:THR:HB | 1:A:74:LEU:HB2 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,19) | 1:A:35:THR:H | 1:A:36:VAL:H | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,472) | 1:A:8:ASP:H | 1:A:8:ASP:HB2 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (2,267) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:13:LEU:H | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (2,10) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:25:LEU:HD11 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,10) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:25:LEU:HD12 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,10) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:25:LEU:HD13 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,702) | 1:A:83:ASP:HB2 | 1:A:83:ASP:HA | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,1278) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:65:ARG:H | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,1701) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:28:LEU:HD21 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,1701) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:28:LEU:HD22 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,1701) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:28:LEU:HD23 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,1701) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:28:LEU:HD21 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,1701) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:28:LEU:HD22 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,1701) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:28:LEU:HD23 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,1701) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:28:LEU:HD21 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,1701) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:28:LEU:HD22 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,1701) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:28:LEU:HD23 | 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) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:101:SER:HB2 | 13 | 3.81 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:101:SER:HB2 | 13 | 3.81 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:101:SER:HB2 | 13 | 3.81 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:95:HIS:HD2 | 6 | 3.71 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:95:HIS:HD2 | 6 | 3.71 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:95:HIS:HD2 | 6 | 3.71 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:95:HIS:HD2 | 7 | 3.65 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:95:HIS:HD2 | 7 | 3.65 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:95:HIS:HD2 | 7 | 3.65 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:101:SER:HB2 | 5 | 3.56 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:101:SER:HB2 | 5 | 3.56 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:101:SER:HB2 | 5 | 3.56 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:95:HIS:HD2 | 1 | 3.53 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:95:HIS:HD2 | 1 | 3.53 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:95:HIS:HD2 | 1 | 3.53 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD21 | 8 | 3.46 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD22 | 8 | 3.46 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD23 | 8 | 3.46 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:101:SER:HB2 | 6 | 3.42 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:101:SER:HB2 | 6 | 3.42 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:101:SER:HB2 | 6 | 3.42 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:95:HIS:HD2 | 16 | 3.38 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:95:HIS:HD2 | 16 | 3.38 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:95:HIS:HD2 | 16 | 3.38 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:95:HIS:HD2 | 14 | 3.36 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:95:HIS:HD2 | 14 | 3.36 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:95:HIS:HD2 | 14 | 3.36 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:95:HIS:HD2 | 13 | 3.34 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:95:HIS:HD2 | 13 | 3.34 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:95:HIS:HD2 | 13 | 3.34 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:95:HIS:HD2 | 12 | 3.3 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:95:HIS:HD2 | 12 | 3.3 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:95:HIS:HD2 | 12 | 3.3 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:95:HIS:HD2 | 15 | 3.3 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:95:HIS:HD2 | 15 | 3.3 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:95:HIS:HD2 | 15 | 3.3 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:101:SER:HB2 | 8 | 3.29 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:101:SER:HB2 | 8 | 3.29 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:101:SER:HB2 | 8 | 3.29 |
| (2,1322) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HG | 3 | 3.25 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD21 | 16 | 3.24 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD22 | 16 | 3.24 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD23 | 16 | 3.24 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD21 | 4 | 3.23 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD22 | 4 | 3.23 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD23 | 4 | 3.23 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:95:HIS:HD2 | 3 | 3.22 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:95:HIS:HD2 | 3 | 3.22 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:95:HIS:HD2 | 3 | 3.22 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD21 | 7 | 3.21 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD22 | 7 | 3.21 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD23 | 7 | 3.21 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD21 | 11 | 3.21 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD22 | 11 | 3.21 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD23 | 11 | 3.21 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD21 | 12 | 3.21 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD22 | 12 | 3.21 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD23 | 12 | 3.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:101:SER:HB2 | 2 | 3.17 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:101:SER:HB2 | 2 | 3.17 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:101:SER:HB2 | 2 | 3.17 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD21 | 5 | 3.16 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD22 | 5 | 3.16 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD23 | 5 | 3.16 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD21 | 13 | 3.15 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD22 | 13 | 3.15 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD23 | 13 | 3.15 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD21 | 15 | 3.15 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD22 | 15 | 3.15 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD23 | 15 | 3.15 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD21 | 9 | 3.14 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD22 | 9 | 3.14 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD23 | 9 | 3.14 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:95:HIS:HD2 | 11 | 3.13 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:95:HIS:HD2 | 11 | 3.13 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:95:HIS:HD2 | 11 | 3.13 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:101:SER:HB2 | 11 | 3.13 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:101:SER:HB2 | 11 | 3.13 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:101:SER:HB2 | 11 | 3.13 |
| (2,1322) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HG | 11 | 3.13 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:101:SER:HB2 | 12 | 3.12 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:101:SER:HB2 | 12 | 3.12 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:101:SER:HB2 | 12 | 3.12 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD21 | 10 | 3.12 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD22 | 10 | 3.12 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD23 | 10 | 3.12 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD21 | 14 | 3.12 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD22 | 14 | 3.12 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD23 | 14 | 3.12 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:101:SER:HB2 | 16 | 3.11 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:101:SER:HB2 | 16 | 3.11 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:101:SER:HB2 | 16 | 3.11 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD21 | 2 | 3.1 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD22 | 2 | 3.1 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD23 | 2 | 3.1 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD21 | 6 | 3.09 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD22 | 6 | 3.09 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD23 | 6 | 3.09 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:101:SER:HB2 | 7 | 3.08 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:101:SER:HB2 | 7 | 3.08 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:101:SER:HB2 | 7 | 3.08 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HB2 | 12 | 3.06 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HB2 | 12 | 3.06 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HB2 | 12 | 3.06 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HB2 | 11 | 3.05 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HB2 | 11 | 3.05 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HB2 | 11 | 3.05 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HB2 | 13 | 3.05 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HB2 | 13 | 3.05 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HB2 | 13 | 3.05 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:95:HIS:HD2 | 10 | 3.05 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:95:HIS:HD2 | 10 | 3.05 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:95:HIS:HD2 | 10 | 3.05 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD21 | 1 | 3.05 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD22 | 1 | 3.05 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD23 | 1 | 3.05 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HB2 | 1 | 3.04 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HB2 | 1 | 3.04 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HB2 | 1 | 3.04 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HB2 | 3 | 3.04 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HB2 | 3 | 3.04 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HB2 | 3 | 3.04 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HB2 | 6 | 3.04 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HB2 | 6 | 3.04 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HB2 | 6 | 3.04 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HB2 | 8 | 3.04 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HB2 | 8 | 3.04 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HB2 | 8 | 3.04 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HB2 | 15 | 3.04 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HB2 | 15 | 3.04 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HB2 | 15 | 3.04 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HB2 | 16 | 3.04 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HB2 | 16 | 3.04 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HB2 | 16 | 3.04 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HB2 | 4 | 3.03 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HB2 | 4 | 3.03 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HB2 | 4 | 3.03 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HB2 | 5 | 3.03 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HB2 | 5 | 3.03 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HB2 | 5 | 3.03 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HB2 | 7 | 3.03 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HB2 | 7 | 3.03 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HB2 | 7 | 3.03 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HB2 | 10 | 3.03 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HB2 | 10 | 3.03 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HB2 | 10 | 3.03 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HB2 | 14 | 3.03 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HB2 | 14 | 3.03 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HB2 | 14 | 3.03 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HB2 | 9 | 3.02 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HB2 | 9 | 3.02 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HB2 | 9 | 3.02 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD21 | 3 | 3.02 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD22 | 3 | 3.02 |
| (2,1198) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:HD23 | 3 | 3.02 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HB2 | 2 | 3.01 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HB2 | 2 | 3.01 |
| (2,683) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HB2 | 2 | 3.01 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:95:HIS:HD2 | 4 | 3.0 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:95:HIS:HD2 | 4 | 3.0 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:95:HIS:HD2 | 4 | 3.0 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:101:SER:HB2 | 9 | 2.97 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:101:SER:HB2 | 9 | 2.97 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:101:SER:HB2 | 9 | 2.97 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD11 | 12 | 2.96 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD12 | 12 | 2.96 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD13 | 12 | 2.96 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD11 | 12 | 2.96 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD12 | 12 | 2.96 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD13 | 12 | 2.96 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD11 | 12 | 2.96 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD12 | 12 | 2.96 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD13 | 12 | 2.96 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD11 | 11 | 2.95 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD12 | 11 | 2.95 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD13 | 11 | 2.95 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD11 | 11 | 2.95 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD12 | 11 | 2.95 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD13 | 11 | 2.95 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD11 | 11 | 2.95 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD12 | 11 | 2.95 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD13 | 11 | 2.95 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD11 | 16 | 2.95 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD12 | 16 | 2.95 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD13 | 16 | 2.95 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD11 | 16 | 2.95 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD12 | 16 | 2.95 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD13 | 16 | 2.95 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD11 | 16 | 2.95 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD12 | 16 | 2.95 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD13 | 16 | 2.95 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD11 | 1 | 2.94 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD12 | 1 | 2.94 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD13 | 1 | 2.94 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD11 | 1 | 2.94 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD12 | 1 | 2.94 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD13 | 1 | 2.94 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD11 | 1 | 2.94 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD12 | 1 | 2.94 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD13 | 1 | 2.94 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD11 | 15 | 2.94 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD12 | 15 | 2.94 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD13 | 15 | 2.94 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD11 | 15 | 2.94 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD12 | 15 | 2.94 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD13 | 15 | 2.94 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD11 | 15 | 2.94 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD12 | 15 | 2.94 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD13 | 15 | 2.94 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD11 | 3 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD12 | 3 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD13 | 3 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD11 | 3 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD12 | 3 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD13 | 3 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD11 | 3 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD12 | 3 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD13 | 3 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD11 | 4 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD12 | 4 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD13 | 4 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD11 | 4 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD12 | 4 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD13 | 4 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD11 | 4 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD12 | 4 | 2.93 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD13 | 4 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD11 | 5 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD12 | 5 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD13 | 5 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD11 | 5 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD12 | 5 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD13 | 5 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD11 | 5 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD12 | 5 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD13 | 5 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD11 | 6 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD12 | 6 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD13 | 6 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD11 | 6 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD12 | 6 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD13 | 6 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD11 | 6 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD12 | 6 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD13 | 6 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD11 | 7 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD12 | 7 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD13 | 7 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD11 | 7 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD12 | 7 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD13 | 7 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD11 | 7 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD12 | 7 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD13 | 7 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD11 | 8 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD12 | 8 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD13 | 8 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD11 | 8 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD12 | 8 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD13 | 8 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD11 | 8 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD12 | 8 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD13 | 8 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD11 | 13 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD12 | 13 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD13 | 13 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD11 | 13 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD12 | 13 | 2.93 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD13 | 13 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD11 | 13 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD12 | 13 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD13 | 13 | 2.93 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD11 | 2 | 2.9 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD12 | 2 | 2.9 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD13 | 2 | 2.9 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD11 | 2 | 2.9 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD12 | 2 | 2.9 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD13 | 2 | 2.9 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD11 | 2 | 2.9 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD12 | 2 | 2.9 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD13 | 2 | 2.9 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD11 | 14 | 2.9 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD12 | 14 | 2.9 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD13 | 14 | 2.9 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD11 | 14 | 2.9 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD12 | 14 | 2.9 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD13 | 14 | 2.9 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD11 | 14 | 2.9 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD12 | 14 | 2.9 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD13 | 14 | 2.9 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD11 | 9 | 2.89 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD12 | 9 | 2.89 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD13 | 9 | 2.89 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD11 | 9 | 2.89 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD12 | 9 | 2.89 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD13 | 9 | 2.89 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD11 | 9 | 2.89 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD12 | 9 | 2.89 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD13 | 9 | 2.89 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD11 | 10 | 2.89 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD12 | 10 | 2.89 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HD13 | 10 | 2.89 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD11 | 10 | 2.89 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD12 | 10 | 2.89 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HD13 | 10 | 2.89 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD11 | 10 | 2.89 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD12 | 10 | 2.89 |
| (2,685) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HD13 | 10 | 2.89 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:32:ALA:HA | 16 | 2.88 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:32:ALA:HA | 16 | 2.88 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:32:ALA:HA | 16 | 2.88 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:32:ALA:HA | 12 | 2.86 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:32:ALA:HA | 12 | 2.86 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:32:ALA:HA | 12 | 2.86 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:32:ALA:HA | 15 | 2.86 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:32:ALA:HA | 15 | 2.86 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:32:ALA:HA | 15 | 2.86 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:101:SER:HB2 | 14 | 2.86 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:101:SER:HB2 | 14 | 2.86 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:101:SER:HB2 | 14 | 2.86 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:32:ALA:HA | 3 | 2.85 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:32:ALA:HA | 3 | 2.85 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:32:ALA:HA | 3 | 2.85 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:32:ALA:HA | 4 | 2.84 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:32:ALA:HA | 4 | 2.84 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:32:ALA:HA | 4 | 2.84 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:32:ALA:HA | 10 | 2.84 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:32:ALA:HA | 10 | 2.84 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:32:ALA:HA | 10 | 2.84 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:32:ALA:HA | 7 | 2.83 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:32:ALA:HA | 7 | 2.83 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:32:ALA:HA | 7 | 2.83 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:32:ALA:HA | 1 | 2.82 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:32:ALA:HA | 1 | 2.82 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:32:ALA:HA | 1 | 2.82 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:32:ALA:HA | 8 | 2.82 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:32:ALA:HA | 8 | 2.82 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:32:ALA:HA | 8 | 2.82 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:32:ALA:HA | 5 | 2.81 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:32:ALA:HA | 5 | 2.81 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:32:ALA:HA | 5 | 2.81 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:32:ALA:HA | 6 | 2.81 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:32:ALA:HA | 6 | 2.81 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:32:ALA:HA | 6 | 2.81 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:32:ALA:HA | 2 | 2.8 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:32:ALA:HA | 2 | 2.8 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:32:ALA:HA | 2 | 2.8 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:32:ALA:HA | 14 | 2.8 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:32:ALA:HA | 14 | 2.8 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:32:ALA:HA | 14 | 2.8 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:32:ALA:HA | 13 | 2.79 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:32:ALA:HA | 13 | 2.79 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:32:ALA:HA | 13 | 2.79 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:32:ALA:HA | 9 | 2.78 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:32:ALA:HA | 9 | 2.78 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:32:ALA:HA | 9 | 2.78 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:32:ALA:HA | 11 | 2.78 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:32:ALA:HA | 11 | 2.78 |
| (2,647) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:32:ALA:HA | 11 | 2.78 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:33:THR:H | 9 | 2.77 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:33:THR:H | 9 | 2.77 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:33:THR:H | 9 | 2.77 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 2 | 2.77 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 2 | 2.77 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 2 | 2.77 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:33:THR:H | 1 | 2.75 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:33:THR:H | 1 | 2.75 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:33:THR:H | 1 | 2.75 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:33:THR:H | 4 | 2.75 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:33:THR:H | 4 | 2.75 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:33:THR:H | 4 | 2.75 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:33:THR:H | 8 | 2.75 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:33:THR:H | 8 | 2.75 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:33:THR:H | 8 | 2.75 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:33:THR:H | 2 | 2.73 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:33:THR:H | 2 | 2.73 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:33:THR:H | 2 | 2.73 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:33:THR:H | 3 | 2.73 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:33:THR:H | 3 | 2.73 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:33:THR:H | 3 | 2.73 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:33:THR:H | 5 | 2.73 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:33:THR:H | 5 | 2.73 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:33:THR:H | 5 | 2.73 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:33:THR:H | 15 | 2.73 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:33:THR:H | 15 | 2.73 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:33:THR:H | 15 | 2.73 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:33:THR:H | 16 | 2.73 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:33:THR:H | 16 | 2.73 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:33:THR:H | 16 | 2.73 |
| (2,1287) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:68:LEU:HB3 | 1 | 2.73 |
| (2,1287) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:68:LEU:HB3 | 12 | 2.73 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:33:THR:H | 7 | 2.72 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:33:THR:H | 7 | 2.72 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:33:THR:H | 7 | 2.72 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1287) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:68:LEU:HB3 | 13 | 2.72 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:33:THR:H | 10 | 2.71 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:33:THR:H | 10 | 2.71 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:33:THR:H | 10 | 2.71 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 14 | 2.71 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 14 | 2.71 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 14 | 2.71 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:33:THR:H | 6 | 2.7 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:33:THR:H | 6 | 2.7 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:33:THR:H | 6 | 2.7 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:33:THR:H | 11 | 2.7 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:33:THR:H | 11 | 2.7 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:33:THR:H | 11 | 2.7 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:33:THR:H | 14 | 2.7 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:33:THR:H | 14 | 2.7 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:33:THR:H | 14 | 2.7 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:33:THR:H | 12 | 2.67 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:33:THR:H | 12 | 2.67 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:33:THR:H | 12 | 2.67 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 5 | 2.66 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 5 | 2.66 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 5 | 2.66 |
| (2,1287) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:68:LEU:HB3 | 6 | 2.66 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:33:THR:H | 13 | 2.65 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:33:THR:H | 13 | 2.65 |
| (2,646) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:33:THR:H | 13 | 2.65 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:95:HIS:HD2 | 2 | 2.65 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:95:HIS:HD2 | 2 | 2.65 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:95:HIS:HD2 | 2 | 2.65 |
| (2,1287) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:68:LEU:HB3 | 4 | 2.64 |
| (2,1287) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:68:LEU:HB3 | 7 | 2.64 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:3:ALA:HA | 5 | 2.64 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:3:ALA:HA | 5 | 2.64 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:3:ALA:HA | 5 | 2.64 |
| (2,1287) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:68:LEU:HB3 | 2 | 2.63 |
| (2,1287) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:68:LEU:HB3 | 16 | 2.63 |
| (2,1287) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:68:LEU:HB3 | 5 | 2.62 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 3 | 2.61 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 3 | 2.61 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 3 | 2.61 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 6 | 2.6 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 6 | 2.6 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 6 | 2.6 |
| (2,1287) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:68:LEU:HB3 | 15 | 2.59 |
| (2,1287) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:68:LEU:HB3 | 14 | 2.55 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB1 | 11 | 2.51 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB2 | 11 | 2.51 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB3 | 11 | 2.51 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB1 | 11 | 2.51 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB2 | 11 | 2.51 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB3 | 11 | 2.51 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB1 | 11 | 2.51 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB2 | 11 | 2.51 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB3 | 11 | 2.51 |
| (2,1287) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:68:LEU:HB3 | 9 | 2.51 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:95:HIS:HD2 | 9 | 2.5 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:95:HIS:HD2 | 9 | 2.5 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:95:HIS:HD2 | 9 | 2.5 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB1 | 14 | 2.49 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB2 | 14 | 2.49 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB3 | 14 | 2.49 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB1 | 14 | 2.49 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB2 | 14 | 2.49 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB3 | 14 | 2.49 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB1 | 14 | 2.49 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB2 | 14 | 2.49 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB3 | 14 | 2.49 |
| (2,1287) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:68:LEU:HB3 | 8 | 2.49 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB1 | 8 | 2.46 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB2 | 8 | 2.46 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB3 | 8 | 2.46 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB1 | 8 | 2.46 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB2 | 8 | 2.46 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB3 | 8 | 2.46 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB1 | 8 | 2.46 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB2 | 8 | 2.46 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB3 | 8 | 2.46 |
| (2,1287) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:68:LEU:HB3 | 10 | 2.46 |
| (2,1287) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:68:LEU:HB3 | 11 | 2.44 |
| (2,1321) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HB2 | 3 | 2.42 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB1 | 3 | 2.41 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB2 | 3 | 2.41 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB3 | 3 | 2.41 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB1 | 3 | 2.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB2 | 3 | 2.41 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB3 | 3 | 2.41 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB1 | 3 | 2.41 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB2 | 3 | 2.41 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB3 | 3 | 2.41 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB1 | 5 | 2.39 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB2 | 5 | 2.39 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB3 | 5 | 2.39 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB1 | 5 | 2.39 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB2 | 5 | 2.39 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB3 | 5 | 2.39 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB1 | 5 | 2.39 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB2 | 5 | 2.39 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB3 | 5 | 2.39 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB1 | 15 | 2.39 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB2 | 15 | 2.39 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB3 | 15 | 2.39 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB1 | 15 | 2.39 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB2 | 15 | 2.39 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB3 | 15 | 2.39 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB1 | 15 | 2.39 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB2 | 15 | 2.39 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB3 | 15 | 2.39 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB1 | 10 | 2.38 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB2 | 10 | 2.38 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB3 | 10 | 2.38 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB1 | 10 | 2.38 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB2 | 10 | 2.38 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB3 | 10 | 2.38 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB1 | 10 | 2.38 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB2 | 10 | 2.38 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB3 | 10 | 2.38 |
| (2,1321) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HB2 | 11 | 2.38 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB1 | 1 | 2.37 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB2 | 1 | 2.37 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB3 | 1 | 2.37 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB1 | 1 | 2.37 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB2 | 1 | 2.37 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB3 | 1 | 2.37 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB1 | 1 | 2.37 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB2 | 1 | 2.37 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB3 | 1 | 2.37 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB1 | 13 | 2.37 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB2 | 13 | 2.37 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB3 | 13 | 2.37 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB1 | 13 | 2.37 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB2 | 13 | 2.37 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB3 | 13 | 2.37 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB1 | 13 | 2.37 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB2 | 13 | 2.37 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB3 | 13 | 2.37 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB1 | 7 | 2.36 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB2 | 7 | 2.36 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB3 | 7 | 2.36 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB1 | 7 | 2.36 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB2 | 7 | 2.36 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB3 | 7 | 2.36 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB1 | 7 | 2.36 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB2 | 7 | 2.36 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB3 | 7 | 2.36 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB1 | 2 | 2.35 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB2 | 2 | 2.35 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB3 | 2 | 2.35 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB1 | 2 | 2.35 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB2 | 2 | 2.35 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB3 | 2 | 2.35 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB1 | 2 | 2.35 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB2 | 2 | 2.35 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB3 | 2 | 2.35 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB1 | 6 | 2.34 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB2 | 6 | 2.34 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB3 | 6 | 2.34 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB1 | 6 | 2.34 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB2 | 6 | 2.34 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB3 | 6 | 2.34 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB1 | 6 | 2.34 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB2 | 6 | 2.34 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB3 | 6 | 2.34 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB1 | 16 | 2.34 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB2 | 16 | 2.34 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB3 | 16 | 2.34 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB1 | 16 | 2.34 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB2 | 16 | 2.34 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB3 | 16 | 2.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB1 | 16 | 2.34 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB2 | 16 | 2.34 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB3 | 16 | 2.34 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:3:ALA:HA | 14 | 2.34 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:3:ALA:HA | 14 | 2.34 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:3:ALA:HA | 14 | 2.34 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB1 | 9 | 2.31 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB2 | 9 | 2.31 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB3 | 9 | 2.31 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB1 | 9 | 2.31 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB2 | 9 | 2.31 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB3 | 9 | 2.31 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB1 | 9 | 2.31 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB2 | 9 | 2.31 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB3 | 9 | 2.31 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HA | 2 | 2.3 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HA | 2 | 2.3 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HA | 2 | 2.3 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HA | 6 | 2.3 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HA | 6 | 2.3 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HA | 6 | 2.3 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HA | 7 | 2.3 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HA | 7 | 2.3 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HA | 7 | 2.3 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HA | 8 | 2.3 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HA | 8 | 2.3 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HA | 8 | 2.3 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HA | 9 | 2.3 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HA | 9 | 2.3 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HA | 9 | 2.3 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HA | 10 | 2.3 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HA | 10 | 2.3 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HA | 10 | 2.3 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HA | 13 | 2.3 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HA | 13 | 2.3 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HA | 13 | 2.3 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HA | 14 | 2.3 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HA | 14 | 2.3 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HA | 14 | 2.3 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HA | 15 | 2.3 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HA | 15 | 2.3 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HA | 15 | 2.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HA | 16 | 2.3 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HA | 16 | 2.3 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HA | 16 | 2.3 |
| (2,1287) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:68:LEU:HB3 | 3 | 2.3 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HA | 1 | 2.29 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HA | 1 | 2.29 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HA | 1 | 2.29 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HA | 3 | 2.29 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HA | 3 | 2.29 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HA | 3 | 2.29 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HA | 4 | 2.29 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HA | 4 | 2.29 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HA | 4 | 2.29 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HA | 5 | 2.29 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HA | 5 | 2.29 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HA | 5 | 2.29 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HA | 11 | 2.29 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HA | 11 | 2.29 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HA | 11 | 2.29 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:HA | 12 | 2.29 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:HA | 12 | 2.29 |
| (2,677) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:HA | 12 | 2.29 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB1 | 4 | 2.29 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB2 | 4 | 2.29 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB3 | 4 | 2.29 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB1 | 4 | 2.29 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB2 | 4 | 2.29 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB3 | 4 | 2.29 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB1 | 4 | 2.29 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB2 | 4 | 2.29 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB3 | 4 | 2.29 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD21 | 6 | 2.28 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD22 | 6 | 2.28 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD23 | 6 | 2.28 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB1 | 12 | 2.28 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB2 | 12 | 2.28 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:11:ALA:HB3 | 12 | 2.28 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB1 | 12 | 2.28 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB2 | 12 | 2.28 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:11:ALA:HB3 | 12 | 2.28 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB1 | 12 | 2.28 |
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB2 | 12 | 2.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1839) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:11:ALA:HB3 | 12 | 2.28 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:95:HIS:HD2 | 8 | 2.25 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:95:HIS:HD2 | 8 | 2.25 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:95:HIS:HD2 | 8 | 2.25 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:3:ALA:HA | 15 | 2.25 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:3:ALA:HA | 15 | 2.25 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:3:ALA:HA | 15 | 2.25 |
| (2,368) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:18:PRO:HB3 | 4 | 2.2 |
| (2,368) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:18:PRO:HB3 | 5 | 2.18 |
| (2,368) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:18:PRO:HB3 | 15 | 2.18 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD21 | 3 | 2.17 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD22 | 3 | 2.17 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD23 | 3 | 2.17 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD21 | 11 | 2.16 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD22 | 11 | 2.16 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD23 | 11 | 2.16 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 9 | 2.14 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 9 | 2.14 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 9 | 2.14 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:3:ALA:HA | 7 | 2.14 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:3:ALA:HA | 7 | 2.14 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:3:ALA:HA | 7 | 2.14 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD21 | 15 | 2.12 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD22 | 15 | 2.12 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD23 | 15 | 2.12 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD21 | 12 | 2.11 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD22 | 12 | 2.11 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD23 | 12 | 2.11 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:93:HIS:HA | 10 | 2.11 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:93:HIS:HA | 10 | 2.11 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:93:HIS:HA | 10 | 2.11 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:101:SER:HB2 | 15 | 2.11 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:101:SER:HB2 | 15 | 2.11 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:101:SER:HB2 | 15 | 2.11 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:93:HIS:HA | 1 | 2.1 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:93:HIS:HA | 1 | 2.1 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:93:HIS:HA | 1 | 2.1 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:93:HIS:HA | 5 | 2.1 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:93:HIS:HA | 5 | 2.1 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:93:HIS:HA | 5 | 2.1 |
| (2,1841) | 1:A:98:LEU:HD21 | 1:A:95:HIS:HD2 | 9 | 2.1 |
| (2,1841) | 1:A:98:LEU:HD22 | 1:A:95:HIS:HD2 | 9 | 2.1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1841) | 1:A:98:LEU:HD23 | 1:A:95:HIS:HD2 | 9 | 2.1 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 5 | 2.09 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 5 | 2.09 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 5 | 2.09 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD21 | 9 | 2.09 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD22 | 9 | 2.09 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD23 | 9 | 2.09 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:93:HIS:HA | 4 | 2.09 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:93:HIS:HA | 4 | 2.09 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:93:HIS:HA | 4 | 2.09 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:93:HIS:HA | 6 | 2.09 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:93:HIS:HA | 6 | 2.09 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:93:HIS:HA | 6 | 2.09 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD21 | 10 | 2.08 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD22 | 10 | 2.08 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD23 | 10 | 2.08 |
| (2,171) | 1:A:53:ASP:HB2 | 1:A:51:PHE:HA | 1 | 2.08 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD21 | 13 | 2.07 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD22 | 13 | 2.07 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD23 | 13 | 2.07 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:93:HIS:HA | 12 | 2.05 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:93:HIS:HA | 12 | 2.05 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:93:HIS:HA | 12 | 2.05 |
| (2,1841) | 1:A:98:LEU:HD21 | 1:A:95:HIS:HD2 | 5 | 2.05 |
| (2,1841) | 1:A:98:LEU:HD22 | 1:A:95:HIS:HD2 | 5 | 2.05 |
| (2,1841) | 1:A:98:LEU:HD23 | 1:A:95:HIS:HD2 | 5 | 2.05 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:73:GLY:HA2 | 4 | 2.03 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:73:GLY:HA2 | 4 | 2.03 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:73:GLY:HA2 | 4 | 2.03 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:93:HIS:HA | 14 | 2.03 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:93:HIS:HA | 14 | 2.03 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:93:HIS:HA | 14 | 2.03 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:95:HIS:HD2 | 5 | 2.03 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:95:HIS:HD2 | 5 | 2.03 |
| (2,1797) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:95:HIS:HD2 | 5 | 2.03 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:73:GLY:HA2 | 1 | 2.02 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:73:GLY:HA2 | 1 | 2.02 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:73:GLY:HA2 | 1 | 2.02 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:93:HIS:HA | 13 | 2.02 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:93:HIS:HA | 13 | 2.02 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:93:HIS:HA | 13 | 2.02 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:93:HIS:HA | 15 | 2.02 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:93:HIS:HA | 15 | 2.02 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:93:HIS:HA | 15 | 2.02 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:93:HIS:HA | 7 | 2.01 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:93:HIS:HA | 7 | 2.01 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:93:HIS:HA | 7 | 2.01 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:101:SER:HB2 | 10 | 2.01 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:101:SER:HB2 | 10 | 2.01 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:101:SER:HB2 | 10 | 2.01 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:73:GLY:HA2 | 16 | 2.0 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:73:GLY:HA2 | 16 | 2.0 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:73:GLY:HA2 | 16 | 2.0 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 4 | 1.99 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 4 | 1.99 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 4 | 1.99 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:93:HIS:HA | 3 | 1.99 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:93:HIS:HA | 3 | 1.99 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:93:HIS:HA | 3 | 1.99 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD21 | 2 | 1.99 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD22 | 2 | 1.99 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD23 | 2 | 1.99 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD21 | 14 | 1.99 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD22 | 14 | 1.99 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD23 | 14 | 1.99 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:73:GLY:HA2 | 10 | 1.98 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:73:GLY:HA2 | 10 | 1.98 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:73:GLY:HA2 | 10 | 1.98 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:73:GLY:HA2 | 14 | 1.98 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:73:GLY:HA2 | 14 | 1.98 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:73:GLY:HA2 | 14 | 1.98 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 15 | 1.98 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 15 | 1.98 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 15 | 1.98 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:73:GLY:HA2 | 7 | 1.96 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:73:GLY:HA2 | 7 | 1.96 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:73:GLY:HA2 | 7 | 1.96 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:73:GLY:HA2 | 13 | 1.96 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:73:GLY:HA2 | 13 | 1.96 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:73:GLY:HA2 | 13 | 1.96 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 2 | 1.96 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 2 | 1.96 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 2 | 1.96 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 14 | 1.96 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 14 | 1.96 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 14 | 1.96 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 3 | 1.95 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 3 | 1.95 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 3 | 1.95 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 13 | 1.95 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 13 | 1.95 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 13 | 1.95 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG21 | 5 | 1.95 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG22 | 5 | 1.95 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG23 | 5 | 1.95 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:93:HIS:HA | 2 | 1.95 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:93:HIS:HA | 2 | 1.95 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:93:HIS:HA | 2 | 1.95 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:3:ALA:HA | 1 | 1.95 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:3:ALA:HA | 1 | 1.95 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:3:ALA:HA | 1 | 1.95 |
| (2,1011) | 1:A:75:ASP:HA | 1:A:74:LEU:HG | 11 | 1.95 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:73:GLY:HA2 | 6 | 1.94 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:73:GLY:HA2 | 6 | 1.94 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:73:GLY:HA2 | 6 | 1.94 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:73:GLY:HA2 | 9 | 1.94 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:73:GLY:HA2 | 9 | 1.94 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:73:GLY:HA2 | 9 | 1.94 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 7 | 1.94 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 7 | 1.94 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 7 | 1.94 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 11 | 1.94 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 11 | 1.94 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 11 | 1.94 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:101:SER:HB2 | 4 | 1.94 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:101:SER:HB2 | 4 | 1.94 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:101:SER:HB2 | 4 | 1.94 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:73:GLY:HA2 | 2 | 1.93 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:73:GLY:HA2 | 2 | 1.93 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:73:GLY:HA2 | 2 | 1.93 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 16 | 1.93 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 16 | 1.93 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 16 | 1.93 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD21 | 6 | 1.93 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD22 | 6 | 1.93 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD23 | 6 | 1.93 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1302) | 1:A:66:ASN:HB3 | 1:A:65:ARG:H | 2 | 1.93 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:73:GLY:HA2 | 3 | 1.92 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:73:GLY:HA2 | 3 | 1.92 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:73:GLY:HA2 | 3 | 1.92 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 1 | 1.92 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 1 | 1.92 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 1 | 1.92 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 10 | 1.92 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 10 | 1.92 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 10 | 1.92 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:93:HIS:HA | 11 | 1.92 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:93:HIS:HA | 11 | 1.92 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:93:HIS:HA | 11 | 1.92 |
| (2,1302) | 1:A:66:ASN:HB3 | 1:A:65:ARG:H | 14 | 1.92 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 9 | 1.92 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 9 | 1.92 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 9 | 1.92 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:73:GLY:HA2 | 12 | 1.91 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:73:GLY:HA2 | 12 | 1.91 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:73:GLY:HA2 | 12 | 1.91 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:73:GLY:HA2 | 8 | 1.9 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:73:GLY:HA2 | 8 | 1.9 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:73:GLY:HA2 | 8 | 1.9 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 8 | 1.9 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 8 | 1.9 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 8 | 1.9 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:93:HIS:HA | 16 | 1.9 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:93:HIS:HA | 16 | 1.9 |
| (2,1894) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:93:HIS:HA | 16 | 1.9 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD21 | 15 | 1.9 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD22 | 15 | 1.9 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD23 | 15 | 1.9 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:101:SER:HB2 | 1 | 1.9 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:101:SER:HB2 | 1 | 1.9 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:101:SER:HB2 | 1 | 1.9 |
| (2,1302) | 1:A:66:ASN:HB3 | 1:A:65:ARG:H | 5 | 1.9 |
| (2,1302) | 1:A:66:ASN:HB3 | 1:A:65:ARG:H | 6 | 1.9 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:3:ALA:HA | 8 | 1.9 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:3:ALA:HA | 8 | 1.9 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:3:ALA:HA | 8 | 1.9 |
| (2,1302) | 1:A:66:ASN:HB3 | 1:A:65:ARG:H | 1 | 1.89 |
| (2,1302) | 1:A:66:ASN:HB3 | 1:A:65:ARG:H | 9 | 1.89 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 5 | 1.89 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 5 | 1.89 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 5 | 1.89 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:73:GLY:HA2 | 5 | 1.88 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:73:GLY:HA2 | 5 | 1.88 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:73:GLY:HA2 | 5 | 1.88 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG11 | 3 | 1.88 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG12 | 3 | 1.88 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG13 | 3 | 1.88 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 12 | 1.88 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 12 | 1.88 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 12 | 1.88 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD21 | 4 | 1.88 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD22 | 4 | 1.88 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD23 | 4 | 1.88 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD21 | 7 | 1.88 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD22 | 7 | 1.88 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD23 | 7 | 1.88 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD21 | 11 | 1.88 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD22 | 11 | 1.88 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD23 | 11 | 1.88 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:3:ALA:HA | 6 | 1.88 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:3:ALA:HA | 6 | 1.88 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:3:ALA:HA | 6 | 1.88 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD11 | 7 | 1.87 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD12 | 7 | 1.87 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD13 | 7 | 1.87 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:92:GLN:H | 9 | 1.87 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:92:GLN:H | 9 | 1.87 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:92:GLN:H | 9 | 1.87 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD21 | 1 | 1.87 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD22 | 1 | 1.87 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD23 | 1 | 1.87 |
| (2,1302) | 1:A:66:ASN:HB3 | 1:A:65:ARG:H | 13 | 1.87 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:3:ALA:HA | 10 | 1.87 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:3:ALA:HA | 10 | 1.87 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:3:ALA:HA | 10 | 1.87 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD11 | 6 | 1.86 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD12 | 6 | 1.86 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD13 | 6 | 1.86 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD11 | 11 | 1.86 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD12 | 11 | 1.86 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD13 | 11 | 1.86 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD11 | 12 | 1.86 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD12 | 12 | 1.86 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD13 | 12 | 1.86 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD11 | 16 | 1.86 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD12 | 16 | 1.86 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD13 | 16 | 1.86 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD21 | 13 | 1.86 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD22 | 13 | 1.86 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD23 | 13 | 1.86 |
| (2,1302) | 1:A:66:ASN:HB3 | 1:A:65:ARG:H | 3 | 1.86 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD11 | 1 | 1.85 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD12 | 1 | 1.85 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD13 | 1 | 1.85 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD11 | 3 | 1.85 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD12 | 3 | 1.85 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD13 | 3 | 1.85 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD11 | 5 | 1.85 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD12 | 5 | 1.85 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD13 | 5 | 1.85 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD11 | 13 | 1.85 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD12 | 13 | 1.85 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD13 | 13 | 1.85 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD11 | 15 | 1.85 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD12 | 15 | 1.85 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD13 | 15 | 1.85 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 6 | 1.85 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 6 | 1.85 |
| (2,522) | 1:A:24:THR:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 6 | 1.85 |
| (2,1302) | 1:A:66:ASN:HB3 | 1:A:65:ARG:H | 10 | 1.85 |
| (2,1302) | 1:A:66:ASN:HB3 | 1:A:65:ARG:H | 15 | 1.85 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD11 | 4 | 1.84 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD12 | 4 | 1.84 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD13 | 4 | 1.84 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD11 | 8 | 1.84 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD12 | 8 | 1.84 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD13 | 8 | 1.84 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD11 | 10 | 1.84 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD12 | 10 | 1.84 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD13 | 10 | 1.84 |
| (2,1011) | 1:A:75:ASP:HA | 1:A:74:LEU:HG | 15 | 1.84 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 1 | 1.84 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 1 | 1.84 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 1 | 1.84 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD11 | 2 | 1.83 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD12 | 2 | 1.83 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD13 | 2 | 1.83 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD11 | 14 | 1.83 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD12 | 14 | 1.83 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD13 | 14 | 1.83 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD21 | 3 | 1.83 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD22 | 3 | 1.83 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD23 | 3 | 1.83 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD21 | 9 | 1.83 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD22 | 9 | 1.83 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD23 | 9 | 1.83 |
| (2,1302) | 1:A:66:ASN:HB3 | 1:A:65:ARG:H | 12 | 1.83 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD11 | 9 | 1.82 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD12 | 9 | 1.82 |
| (2,652) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:28:LEU:HD13 | 9 | 1.82 |
| (2,1302) | 1:A:66:ASN:HB3 | 1:A:65:ARG:H | 4 | 1.81 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD21 | 8 | 1.8 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD22 | 8 | 1.8 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD23 | 8 | 1.8 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD21 | 12 | 1.8 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD22 | 12 | 1.8 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD23 | 12 | 1.8 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD11 | 1:A:95:HIS:HB2 | 8 | 1.8 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD12 | 1:A:95:HIS:HB2 | 8 | 1.8 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD13 | 1:A:95:HIS:HB2 | 8 | 1.8 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG11 | 7 | 1.79 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG12 | 7 | 1.79 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG13 | 7 | 1.79 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG11 | 9 | 1.79 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG12 | 9 | 1.79 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG13 | 9 | 1.79 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG11 | 11 | 1.79 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG12 | 11 | 1.79 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG13 | 11 | 1.79 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD21 | 5 | 1.79 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD22 | 5 | 1.79 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD23 | 5 | 1.79 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG21 | 12 | 1.78 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG22 | 12 | 1.78 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG23 | 12 | 1.78 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:92:GLN:H | 8 | 1.78 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:92:GLN:H | 8 | 1.78 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:92:GLN:H | 8 | 1.78 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD21 | 10 | 1.78 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD22 | 10 | 1.78 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD23 | 10 | 1.78 |
| (2,1302) | 1:A:66:ASN:HB3 | 1:A:65:ARG:H | 11 | 1.78 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG11 | 5 | 1.77 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG12 | 5 | 1.77 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG13 | 5 | 1.77 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG11 | 8 | 1.76 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG12 | 8 | 1.76 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG13 | 8 | 1.76 |
| (2,1302) | 1:A:66:ASN:HB3 | 1:A:65:ARG:H | 8 | 1.76 |
| (2,1302) | 1:A:66:ASN:HB3 | 1:A:65:ARG:H | 16 | 1.76 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 15 | 1.75 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 15 | 1.75 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 15 | 1.75 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG11 | 10 | 1.74 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG12 | 10 | 1.74 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG13 | 10 | 1.74 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG11 | 12 | 1.74 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG12 | 12 | 1.74 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG13 | 12 | 1.74 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG11 | 16 | 1.74 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG12 | 16 | 1.74 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG13 | 16 | 1.74 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD11 | 11 | 1.73 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD12 | 11 | 1.73 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD13 | 11 | 1.73 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 10 | 1.73 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 10 | 1.73 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 10 | 1.73 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD21 | 16 | 1.72 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD22 | 16 | 1.72 |
| (2,1843) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:62:LEU:HD23 | 16 | 1.72 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD11 | 3 | 1.72 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD12 | 3 | 1.72 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD13 | 3 | 1.72 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG11 | 1 | 1.71 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG12 | 1 | 1.71 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG13 | 1 | 1.71 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG11 | 4 | 1.71 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG12 | 4 | 1.71 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG13 | 4 | 1.71 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG11 | 6 | 1.71 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG12 | 6 | 1.71 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG13 | 6 | 1.71 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG11 | 15 | 1.7 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG12 | 15 | 1.7 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG13 | 15 | 1.7 |
| (2,1302) | 1:A:66:ASN:HB3 | 1:A:65:ARG:H | 7 | 1.7 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG11 | 13 | 1.69 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG12 | 13 | 1.69 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG13 | 13 | 1.69 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD11 | 1 | 1.68 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD12 | 1 | 1.68 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD13 | 1 | 1.68 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 7 | 1.68 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 7 | 1.68 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 7 | 1.68 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:H | 3 | 1.67 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:H | 3 | 1.67 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:H | 3 | 1.67 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:H | 5 | 1.67 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:H | 5 | 1.67 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:H | 5 | 1.67 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:H | 13 | 1.67 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:H | 13 | 1.67 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:H | 13 | 1.67 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:H | 15 | 1.67 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:H | 15 | 1.67 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:H | 15 | 1.67 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:H | 16 | 1.67 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:H | 16 | 1.67 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:H | 16 | 1.67 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:25:LEU:HB3 | 2 | 1.67 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:25:LEU:HB3 | 2 | 1.67 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:25:LEU:HB3 | 2 | 1.67 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:25:LEU:HB3 | 5 | 1.67 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:25:LEU:HB3 | 5 | 1.67 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:25:LEU:HB3 | 5 | 1.67 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:25:LEU:HB3 | 6 | 1.67 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:25:LEU:HB3 | 6 | 1.67 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:25:LEU:HB3 | 6 | 1.67 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:25:LEU:HB3 | 7 | 1.67 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:25:LEU:HB3 | 7 | 1.67 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:25:LEU:HB3 | 7 | 1.67 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:25:LEU:HB3 | 11 | 1.67 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:25:LEU:HB3 | 11 | 1.67 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:25:LEU:HB3 | 11 | 1.67 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD21 | 6 | 1.67 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD22 | 6 | 1.67 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD23 | 6 | 1.67 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:ASP:HB3 | 8 | 1.67 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:ASP:HB3 | 8 | 1.67 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:ASP:HB3 | 8 | 1.67 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:H | 1 | 1.66 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:H | 1 | 1.66 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:H | 1 | 1.66 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:H | 2 | 1.66 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:H | 2 | 1.66 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:H | 2 | 1.66 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:H | 4 | 1.66 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:H | 4 | 1.66 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:H | 4 | 1.66 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:H | 7 | 1.66 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:H | 7 | 1.66 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:H | 7 | 1.66 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:H | 11 | 1.66 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:H | 11 | 1.66 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:H | 11 | 1.66 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:H | 12 | 1.66 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:H | 12 | 1.66 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:H | 12 | 1.66 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:25:LEU:HB3 | 1 | 1.66 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:25:LEU:HB3 | 1 | 1.66 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:25:LEU:HB3 | 1 | 1.66 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:25:LEU:HB3 | 3 | 1.66 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:25:LEU:HB3 | 3 | 1.66 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:25:LEU:HB3 | 3 | 1.66 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:25:LEU:HB3 | 9 | 1.66 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:25:LEU:HB3 | 9 | 1.66 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:25:LEU:HB3 | 9 | 1.66 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:25:LEU:HB3 | 10 | 1.66 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:25:LEU:HB3 | 10 | 1.66 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:25:LEU:HB3 | 10 | 1.66 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:25:LEU:HB3 | 14 | 1.66 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:25:LEU:HB3 | 14 | 1.66 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:25:LEU:HB3 | 14 | 1.66 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG11 | 14 | 1.66 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG12 | 14 | 1.66 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG13 | 14 | 1.66 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG21 | 13 | 1.66 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG22 | 13 | 1.66 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG23 | 13 | 1.66 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:H | 6 | 1.65 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:H | 6 | 1.65 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:H | 6 | 1.65 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:H | 8 | 1.65 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:H | 8 | 1.65 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:H | 8 | 1.65 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:H | 10 | 1.65 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:H | 10 | 1.65 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:H | 10 | 1.65 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:H | 14 | 1.65 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:H | 14 | 1.65 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:H | 14 | 1.65 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:25:LEU:HB3 | 8 | 1.65 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:25:LEU:HB3 | 8 | 1.65 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:25:LEU:HB3 | 8 | 1.65 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD21 | 4 | 1.65 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD22 | 4 | 1.65 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD23 | 4 | 1.65 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD21 | 5 | 1.65 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD22 | 5 | 1.65 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD23 | 5 | 1.65 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD11 | 11 | 1.65 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD12 | 11 | 1.65 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD13 | 11 | 1.65 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 8 | 1.65 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 8 | 1.65 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 8 | 1.65 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:28:LEU:H | 9 | 1.64 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:28:LEU:H | 9 | 1.64 |
| (2,688) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:28:LEU:H | 9 | 1.64 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD21 | 4 | 1.64 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD22 | 4 | 1.64 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD23 | 4 | 1.64 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD21 | 4 | 1.64 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD22 | 4 | 1.64 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD23 | 4 | 1.64 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD21 | 4 | 1.64 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD22 | 4 | 1.64 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD23 | 4 | 1.64 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:25:LEU:HB3 | 4 | 1.64 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:25:LEU:HB3 | 4 | 1.64 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:25:LEU:HB3 | 4 | 1.64 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:25:LEU:HB3 | 16 | 1.64 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:25:LEU:HB3 | 16 | 1.64 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:25:LEU:HB3 | 16 | 1.64 |
| (2,1558) | 1:A:82:PHE:HA | 1:A:85:PRO:HB2 | 9 | 1.64 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD21 | 12 | 1.64 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD22 | 12 | 1.64 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD23 | 12 | 1.64 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD21 | 10 | 1.63 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD22 | 10 | 1.63 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD23 | 10 | 1.63 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD21 | 10 | 1.63 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD22 | 10 | 1.63 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD23 | 10 | 1.63 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD21 | 10 | 1.63 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD22 | 10 | 1.63 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD23 | 10 | 1.63 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD21 | 14 | 1.63 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD22 | 14 | 1.63 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD23 | 14 | 1.63 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD21 | 14 | 1.63 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD22 | 14 | 1.63 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD23 | 14 | 1.63 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD21 | 14 | 1.63 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD22 | 14 | 1.63 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD23 | 14 | 1.63 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:101:SER:HB2 | 3 | 1.63 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:101:SER:HB2 | 3 | 1.63 |
| (2,1794) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:101:SER:HB2 | 3 | 1.63 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD21 | 1 | 1.63 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD22 | 1 | 1.63 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD23 | 1 | 1.63 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD11 | 7 | 1.63 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD12 | 7 | 1.63 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD13 | 7 | 1.63 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:ASP:HB3 | 7 | 1.63 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:ASP:HB3 | 7 | 1.63 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:ASP:HB3 | 7 | 1.63 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 2 | 1.63 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 2 | 1.63 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 2 | 1.63 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 4 | 1.63 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 4 | 1.63 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 4 | 1.63 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD21 | 5 | 1.62 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD22 | 5 | 1.62 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD23 | 5 | 1.62 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD21 | 5 | 1.62 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD22 | 5 | 1.62 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD23 | 5 | 1.62 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD21 | 5 | 1.62 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD22 | 5 | 1.62 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD23 | 5 | 1.62 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD21 | 6 | 1.62 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD22 | 6 | 1.62 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD23 | 6 | 1.62 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD21 | 6 | 1.62 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD22 | 6 | 1.62 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD23 | 6 | 1.62 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD21 | 6 | 1.62 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD22 | 6 | 1.62 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD23 | 6 | 1.62 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:25:LEU:HB3 | 15 | 1.62 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:25:LEU:HB3 | 15 | 1.62 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:25:LEU:HB3 | 15 | 1.62 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG11 | 2 | 1.62 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG12 | 2 | 1.62 |
| (2,555) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HG13 | 2 | 1.62 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD11 | 1:A:95:HIS:HB2 | 11 | 1.62 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD12 | 1:A:95:HIS:HB2 | 11 | 1.62 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD13 | 1:A:95:HIS:HB2 | 11 | 1.62 |
| (2,1558) | 1:A:82:PHE:HA | 1:A:85:PRO:HB2 | 15 | 1.62 |
| (2,1486) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:H | 14 | 1.62 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD21 | 13 | 1.62 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD22 | 13 | 1.62 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD23 | 13 | 1.62 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD21 | 15 | 1.62 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD22 | 15 | 1.62 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD23 | 15 | 1.62 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:ASP:HB3 | 4 | 1.62 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:ASP:HB3 | 4 | 1.62 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:ASP:HB3 | 4 | 1.62 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:ASP:HB3 | 5 | 1.62 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:ASP:HB3 | 5 | 1.62 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:ASP:HB3 | 5 | 1.62 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:ASP:HB3 | 12 | 1.62 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:ASP:HB3 | 12 | 1.62 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:ASP:HB3 | 12 | 1.62 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 12 | 1.62 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 12 | 1.62 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 12 | 1.62 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD21 | 1 | 1.61 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD22 | 1 | 1.61 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD23 | 1 | 1.61 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD21 | 1 | 1.61 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD22 | 1 | 1.61 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD23 | 1 | 1.61 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD21 | 1 | 1.61 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD22 | 1 | 1.61 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD23 | 1 | 1.61 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD21 | 2 | 1.61 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD22 | 2 | 1.61 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD23 | 2 | 1.61 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD21 | 2 | 1.61 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD22 | 2 | 1.61 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD23 | 2 | 1.61 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD21 | 2 | 1.61 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD22 | 2 | 1.61 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD23 | 2 | 1.61 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD21 | 16 | 1.61 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD22 | 16 | 1.61 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD23 | 16 | 1.61 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD21 | 16 | 1.61 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD22 | 16 | 1.61 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD23 | 16 | 1.61 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD21 | 16 | 1.61 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD22 | 16 | 1.61 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD23 | 16 | 1.61 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:25:LEU:HB3 | 12 | 1.61 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:25:LEU:HB3 | 12 | 1.61 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:25:LEU:HB3 | 12 | 1.61 |
| (2,1486) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:H | 2 | 1.61 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD21 | 10 | 1.61 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD22 | 10 | 1.61 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD23 | 10 | 1.61 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:ASP:HB3 | 2 | 1.61 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:ASP:HB3 | 2 | 1.61 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:ASP:HB3 | 2 | 1.61 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:ASP:HB3 | 13 | 1.61 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:ASP:HB3 | 13 | 1.61 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:ASP:HB3 | 13 | 1.61 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD21 | 7 | 1.6 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD22 | 7 | 1.6 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD23 | 7 | 1.6 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD21 | 7 | 1.6 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD22 | 7 | 1.6 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD23 | 7 | 1.6 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD21 | 7 | 1.6 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD22 | 7 | 1.6 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD23 | 7 | 1.6 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD21 | 15 | 1.6 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD22 | 15 | 1.6 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD23 | 15 | 1.6 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD21 | 15 | 1.6 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD22 | 15 | 1.6 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD23 | 15 | 1.6 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD21 | 15 | 1.6 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD22 | 15 | 1.6 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD23 | 15 | 1.6 |
| (2,355) | 1:A:16:LEU:HG | 1:A:20:GLN:HG3 | 11 | 1.6 |
| (2,1486) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:H | 3 | 1.6 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD21 | 3 | 1.6 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD22 | 3 | 1.6 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD23 | 3 | 1.6 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:ASP:HB3 | 14 | 1.6 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:ASP:HB3 | 14 | 1.6 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:ASP:HB3 | 14 | 1.6 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD21 | 8 | 1.59 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD22 | 8 | 1.59 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD23 | 8 | 1.59 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD21 | 8 | 1.59 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD22 | 8 | 1.59 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD23 | 8 | 1.59 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD21 | 8 | 1.59 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD22 | 8 | 1.59 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD23 | 8 | 1.59 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD21 | 9 | 1.59 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD22 | 9 | 1.59 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD23 | 9 | 1.59 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD21 | 9 | 1.59 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD22 | 9 | 1.59 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD23 | 9 | 1.59 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD21 | 9 | 1.59 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD22 | 9 | 1.59 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD23 | 9 | 1.59 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:25:LEU:HB3 | 13 | 1.59 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:25:LEU:HB3 | 13 | 1.59 |
| (2,568) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:25:LEU:HB3 | 13 | 1.59 |
| (2,355) | 1:A:16:LEU:HG | 1:A:20:GLN:HG3 | 3 | 1.59 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB1 | 12 | 1.59 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB2 | 12 | 1.59 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB3 | 12 | 1.59 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB1 | 12 | 1.59 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB2 | 12 | 1.59 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB3 | 12 | 1.59 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB1 | 12 | 1.59 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB2 | 12 | 1.59 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB3 | 12 | 1.59 |
| (2,1486) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:H | 13 | 1.59 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:ASP:HB3 | 6 | 1.59 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:ASP:HB3 | 6 | 1.59 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:ASP:HB3 | 6 | 1.59 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:ASP:HB3 | 10 | 1.59 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:ASP:HB3 | 10 | 1.59 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:ASP:HB3 | 10 | 1.59 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:ASP:HB3 | 11 | 1.59 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:ASP:HB3 | 11 | 1.59 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:ASP:HB3 | 11 | 1.59 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG21 | 6 | 1.59 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG22 | 6 | 1.59 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG23 | 6 | 1.59 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG21 | 6 | 1.59 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG22 | 6 | 1.59 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG23 | 6 | 1.59 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG21 | 6 | 1.59 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG22 | 6 | 1.59 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG23 | 6 | 1.59 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD21 | 12 | 1.58 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD22 | 12 | 1.58 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD23 | 12 | 1.58 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD21 | 12 | 1.58 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD22 | 12 | 1.58 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD23 | 12 | 1.58 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD21 | 12 | 1.58 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD22 | 12 | 1.58 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD23 | 12 | 1.58 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD21 | 14 | 1.58 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD22 | 14 | 1.58 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD23 | 14 | 1.58 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:ASP:HB3 | 9 | 1.58 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:ASP:HB3 | 9 | 1.58 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:ASP:HB3 | 9 | 1.58 |
| (2,879) | 1:A:60:THR:HB | 1:A:63:GLU:HB2 | 5 | 1.57 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:3:ALA:HA | 3 | 1.57 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:3:ALA:HA | 3 | 1.57 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:3:ALA:HA | 3 | 1.57 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG21 | 8 | 1.57 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG22 | 8 | 1.57 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG23 | 8 | 1.57 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG21 | 8 | 1.57 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG22 | 8 | 1.57 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG23 | 8 | 1.57 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG21 | 8 | 1.57 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG22 | 8 | 1.57 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG23 | 8 | 1.57 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD11 | 5 | 1.56 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD12 | 5 | 1.56 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD13 | 5 | 1.56 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG21 | 7 | 1.56 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG22 | 7 | 1.56 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG23 | 7 | 1.56 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG21 | 7 | 1.56 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG22 | 7 | 1.56 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG23 | 7 | 1.56 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG21 | 7 | 1.56 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG22 | 7 | 1.56 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG23 | 7 | 1.56 |
| (2,879) | 1:A:60:THR:HB | 1:A:63:GLU:HB2 | 2 | 1.55 |
| (2,879) | 1:A:60:THR:HB | 1:A:63:GLU:HB2 | 13 | 1.55 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD21 | 13 | 1.55 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD22 | 13 | 1.55 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD23 | 13 | 1.55 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD21 | 13 | 1.55 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD22 | 13 | 1.55 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD23 | 13 | 1.55 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD21 | 13 | 1.55 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD22 | 13 | 1.55 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD23 | 13 | 1.55 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD11 | 13 | 1.55 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD12 | 13 | 1.55 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD13 | 13 | 1.55 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:ASP:HB3 | 1 | 1.55 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:ASP:HB3 | 1 | 1.55 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:ASP:HB3 | 1 | 1.55 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 13 | 1.55 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 13 | 1.55 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 13 | 1.55 |
| (2,879) | 1:A:60:THR:HB | 1:A:63:GLU:HB2 | 9 | 1.54 |
| (2,879) | 1:A:60:THR:HB | 1:A:63:GLU:HB2 | 11 | 1.54 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD21 | 3 | 1.54 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD22 | 3 | 1.54 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD23 | 3 | 1.54 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD21 | 3 | 1.54 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD22 | 3 | 1.54 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD23 | 3 | 1.54 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD21 | 3 | 1.54 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD22 | 3 | 1.54 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD23 | 3 | 1.54 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG21 | 4 | 1.54 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG22 | 4 | 1.54 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG23 | 4 | 1.54 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD21 | 2 | 1.54 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD22 | 2 | 1.54 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD23 | 2 | 1.54 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD11 | 4 | 1.54 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD12 | 4 | 1.54 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD13 | 4 | 1.54 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD11 | 12 | 1.54 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD12 | 12 | 1.54 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD13 | 12 | 1.54 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG21 | 10 | 1.54 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG22 | 10 | 1.54 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG23 | 10 | 1.54 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG21 | 10 | 1.54 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG22 | 10 | 1.54 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG23 | 10 | 1.54 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG21 | 10 | 1.54 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG22 | 10 | 1.54 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG23 | 10 | 1.54 |
| (2,1558) | 1:A:82:PHE:HA | 1:A:85:PRO:HB2 | 1 | 1.53 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:40:HIS:HD2 | 3 | 1.52 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:40:HIS:HD2 | 3 | 1.52 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:40:HIS:HD2 | 3 | 1.52 |
| (2,879) | 1:A:60:THR:HB | 1:A:63:GLU:HB2 | 6 | 1.52 |
| (2,879) | 1:A:60:THR:HB | 1:A:63:GLU:HB2 | 12 | 1.52 |
| (2,879) | 1:A:60:THR:HB | 1:A:63:GLU:HB2 | 15 | 1.52 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD11 | 1:A:95:HIS:HB2 | 10 | 1.52 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD12 | 1:A:95:HIS:HB2 | 10 | 1.52 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD13 | 1:A:95:HIS:HB2 | 10 | 1.52 |
| (2,1558) | 1:A:82:PHE:HA | 1:A:85:PRO:HB2 | 13 | 1.52 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD21 | 7 | 1.52 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD22 | 7 | 1.52 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD23 | 7 | 1.52 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD11 | 10 | 1.52 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD12 | 10 | 1.52 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD13 | 10 | 1.52 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:3:ALA:HA | 16 | 1.52 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:3:ALA:HA | 16 | 1.52 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:3:ALA:HA | 16 | 1.52 |
| (2,879) | 1:A:60:THR:HB | 1:A:63:GLU:HB2 | 4 | 1.51 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD21 | 11 | 1.51 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD22 | 11 | 1.51 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD23 | 11 | 1.51 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD11 | 16 | 1.51 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD12 | 16 | 1.51 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD13 | 16 | 1.51 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG21 | 2 | 1.51 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG22 | 2 | 1.51 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG23 | 2 | 1.51 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG21 | 2 | 1.51 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG22 | 2 | 1.51 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG23 | 2 | 1.51 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG21 | 2 | 1.51 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG22 | 2 | 1.51 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG23 | 2 | 1.51 |
| (2,879) | 1:A:60:THR:HB | 1:A:63:GLU:HB2 | 10 | 1.5 |
| (2,879) | 1:A:60:THR:HB | 1:A:63:GLU:HB2 | 16 | 1.5 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:51:PHE:HE1 | 9 | 1.5 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:51:PHE:HE2 | 9 | 1.5 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:51:PHE:HE1 | 9 | 1.5 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:51:PHE:HE2 | 9 | 1.5 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:51:PHE:HE1 | 9 | 1.5 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:51:PHE:HE2 | 9 | 1.5 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD21 | 11 | 1.5 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD22 | 11 | 1.5 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:HD23 | 11 | 1.5 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD21 | 11 | 1.5 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD22 | 11 | 1.5 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:HD23 | 11 | 1.5 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD21 | 11 | 1.5 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD22 | 11 | 1.5 |
| (2,650) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:HD23 | 11 | 1.5 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG21 | 6 | 1.5 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG22 | 6 | 1.5 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG23 | 6 | 1.5 |
| (2,1558) | 1:A:82:PHE:HA | 1:A:85:PRO:HB2 | 10 | 1.49 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD11 | 6 | 1.49 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD12 | 6 | 1.49 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD13 | 6 | 1.49 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:40:HIS:HD2 | 9 | 1.48 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:40:HIS:HD2 | 9 | 1.48 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:40:HIS:HD2 | 9 | 1.48 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 3 | 1.48 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 3 | 1.48 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 3 | 1.48 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD11 | 14 | 1.47 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD12 | 14 | 1.47 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD13 | 14 | 1.47 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG21 | 3 | 1.47 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG22 | 3 | 1.47 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG23 | 3 | 1.47 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG21 | 3 | 1.47 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG22 | 3 | 1.47 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG23 | 3 | 1.47 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG21 | 3 | 1.47 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG22 | 3 | 1.47 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG23 | 3 | 1.47 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG21 | 14 | 1.47 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG22 | 14 | 1.47 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG23 | 14 | 1.47 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG21 | 14 | 1.47 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG22 | 14 | 1.47 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG23 | 14 | 1.47 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG21 | 14 | 1.47 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG22 | 14 | 1.47 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG23 | 14 | 1.47 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 11 | 1.47 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 11 | 1.47 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 11 | 1.47 |
| (2,879) | 1:A:60:THR:HB | 1:A:63:GLU:HB2 | 3 | 1.46 |
| (2,879) | 1:A:60:THR:HB | 1:A:63:GLU:HB2 | 14 | 1.46 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG21 | 1 | 1.46 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG22 | 1 | 1.46 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG23 | 1 | 1.46 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD11 | 1:A:95:HIS:HB2 | 15 | 1.46 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD12 | 1:A:95:HIS:HB2 | 15 | 1.46 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD13 | 1:A:95:HIS:HB2 | 15 | 1.46 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG21 | 12 | 1.46 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG22 | 12 | 1.46 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG23 | 12 | 1.46 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG21 | 12 | 1.46 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG22 | 12 | 1.46 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG23 | 12 | 1.46 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG21 | 12 | 1.46 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG22 | 12 | 1.46 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG23 | 12 | 1.46 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 14 | 1.46 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 14 | 1.46 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 14 | 1.46 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 16 | 1.46 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 16 | 1.46 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 16 | 1.46 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG21 | 9 | 1.45 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG22 | 9 | 1.45 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG23 | 9 | 1.45 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD11 | 1:A:95:HIS:HB2 | 2 | 1.45 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD12 | 1:A:95:HIS:HB2 | 2 | 1.45 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD13 | 1:A:95:HIS:HB2 | 2 | 1.45 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD21 | 16 | 1.45 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD22 | 16 | 1.45 |
| (2,1360) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:90:LEU:HD23 | 16 | 1.45 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB1 | 16 | 1.44 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB2 | 16 | 1.44 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB3 | 16 | 1.44 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB1 | 16 | 1.44 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB2 | 16 | 1.44 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB3 | 16 | 1.44 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB1 | 16 | 1.44 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB2 | 16 | 1.44 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB3 | 16 | 1.44 |
| (2,1486) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:H | 16 | 1.44 |
| (2,1322) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HG | 16 | 1.44 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD11 | 15 | 1.44 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD12 | 15 | 1.44 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD13 | 15 | 1.44 |
| (2,1695) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:90:LEU:HG | 8 | 1.43 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:87:PRO:HA | 7 | 1.43 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:87:PRO:HA | 7 | 1.43 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:87:PRO:HA | 7 | 1.43 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB1 | 4 | 1.43 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB2 | 4 | 1.43 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB3 | 4 | 1.43 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB1 | 4 | 1.43 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB2 | 4 | 1.43 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB3 | 4 | 1.43 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB1 | 4 | 1.43 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB2 | 4 | 1.43 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB3 | 4 | 1.43 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD11 | 1 | 1.43 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD12 | 1 | 1.43 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD13 | 1 | 1.43 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:ASP:HB3 | 15 | 1.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:ASP:HB3 | 15 | 1.43 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:ASP:HB3 | 15 | 1.43 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG21 | 4 | 1.43 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG22 | 4 | 1.43 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG23 | 4 | 1.43 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG21 | 4 | 1.43 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG22 | 4 | 1.43 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG23 | 4 | 1.43 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG21 | 4 | 1.43 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG22 | 4 | 1.43 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG23 | 4 | 1.43 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG21 | 15 | 1.43 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG22 | 15 | 1.43 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG23 | 15 | 1.43 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG21 | 15 | 1.43 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG22 | 15 | 1.43 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG23 | 15 | 1.43 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG21 | 15 | 1.43 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG22 | 15 | 1.43 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG23 | 15 | 1.43 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:40:HIS:HD2 | 2 | 1.42 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:40:HIS:HD2 | 2 | 1.42 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:40:HIS:HD2 | 2 | 1.42 |
| (2,879) | 1:A:60:THR:HB | 1:A:63:GLU:HB2 | 7 | 1.42 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:4:SER:HB2 | 15 | 1.42 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:4:SER:HB2 | 15 | 1.42 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:4:SER:HB2 | 15 | 1.42 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB1 | 7 | 1.42 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB2 | 7 | 1.42 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB3 | 7 | 1.42 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB1 | 7 | 1.42 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB2 | 7 | 1.42 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB3 | 7 | 1.42 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB1 | 7 | 1.42 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB2 | 7 | 1.42 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB3 | 7 | 1.42 |
| (2,1322) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HG | 8 | 1.42 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD11 | 2 | 1.42 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD12 | 2 | 1.42 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD13 | 2 | 1.42 |
| (1,146) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:53:ASP:HB3 | 13 | 1.42 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 10 | 1.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 10 | 1.41 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 10 | 1.41 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG11 | 12 | 1.41 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG12 | 12 | 1.41 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG13 | 12 | 1.41 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG11 | 12 | 1.41 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG12 | 12 | 1.41 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG13 | 12 | 1.41 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG11 | 12 | 1.41 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG12 | 12 | 1.41 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG13 | 12 | 1.41 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:4:SER:HB2 | 4 | 1.41 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:4:SER:HB2 | 4 | 1.41 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:4:SER:HB2 | 4 | 1.41 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD11 | 1:A:95:HIS:HB2 | 4 | 1.41 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD12 | 1:A:95:HIS:HB2 | 4 | 1.41 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD13 | 1:A:95:HIS:HB2 | 4 | 1.41 |
| (2,1695) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:90:LEU:HG | 9 | 1.41 |
| (2,1672) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:90:LEU:HB2 | 7 | 1.41 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:87:PRO:HA | 9 | 1.41 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:87:PRO:HA | 9 | 1.41 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:87:PRO:HA | 9 | 1.41 |
| (2,1322) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HG | 13 | 1.41 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD11 | 16 | 1.41 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD12 | 16 | 1.41 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD13 | 16 | 1.41 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD11 | 3 | 1.41 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD12 | 3 | 1.41 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD13 | 3 | 1.41 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:61:ALA:HA | 6 | 1.41 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:61:ALA:HA | 6 | 1.41 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:61:ALA:HA | 6 | 1.41 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:61:ALA:HA | 8 | 1.41 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:61:ALA:HA | 8 | 1.41 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:61:ALA:HA | 8 | 1.41 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:ASP:HB3 | 3 | 1.41 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:ASP:HB3 | 3 | 1.41 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:ASP:HB3 | 3 | 1.41 |
| (1,146) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:53:ASP:HB3 | 7 | 1.41 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG11 | 1 | 1.4 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG12 | 1 | 1.4 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG13 | 1 | 1.4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG11 | 1 | 1.4 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG12 | 1 | 1.4 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG13 | 1 | 1.4 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG11 | 1 | 1.4 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG12 | 1 | 1.4 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG13 | 1 | 1.4 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG11 | 8 | 1.4 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG12 | 8 | 1.4 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG13 | 8 | 1.4 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG11 | 8 | 1.4 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG12 | 8 | 1.4 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG13 | 8 | 1.4 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG11 | 8 | 1.4 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG12 | 8 | 1.4 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG13 | 8 | 1.4 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:4:SER:HB2 | 1 | 1.4 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:4:SER:HB2 | 1 | 1.4 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:4:SER:HB2 | 1 | 1.4 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:87:PRO:HA | 6 | 1.4 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:87:PRO:HA | 6 | 1.4 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:87:PRO:HA | 6 | 1.4 |
| (2,1486) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:H | 10 | 1.4 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD11 | 7 | 1.4 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD12 | 7 | 1.4 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD13 | 7 | 1.4 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:61:ALA:HA | 5 | 1.4 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:61:ALA:HA | 5 | 1.4 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:61:ALA:HA | 5 | 1.4 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:61:ALA:HA | 12 | 1.4 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:61:ALA:HA | 12 | 1.4 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:61:ALA:HA | 12 | 1.4 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG21 | 9 | 1.4 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG22 | 9 | 1.4 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG23 | 9 | 1.4 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG21 | 9 | 1.4 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG22 | 9 | 1.4 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG23 | 9 | 1.4 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG21 | 9 | 1.4 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG22 | 9 | 1.4 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG23 | 9 | 1.4 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG21 | 11 | 1.4 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG22 | 11 | 1.4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG23 | 11 | 1.4 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG21 | 11 | 1.4 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG22 | 11 | 1.4 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG23 | 11 | 1.4 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG21 | 11 | 1.4 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG22 | 11 | 1.4 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG23 | 11 | 1.4 |
| (2,879) | 1:A:60:THR:HB | 1:A:63:GLU:HB2 | 1 | 1.39 |
| (2,285) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:21:GLN:HG2 | 5 | 1.39 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 11 | 1.39 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 11 | 1.39 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 11 | 1.39 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG11 | 4 | 1.39 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG12 | 4 | 1.39 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG13 | 4 | 1.39 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG11 | 4 | 1.39 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG12 | 4 | 1.39 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG13 | 4 | 1.39 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG11 | 4 | 1.39 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG12 | 4 | 1.39 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG13 | 4 | 1.39 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG11 | 11 | 1.39 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG12 | 11 | 1.39 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG13 | 11 | 1.39 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG11 | 11 | 1.39 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG12 | 11 | 1.39 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG13 | 11 | 1.39 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG11 | 11 | 1.39 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG12 | 11 | 1.39 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG13 | 11 | 1.39 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:4:SER:HB2 | 7 | 1.39 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:4:SER:HB2 | 7 | 1.39 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:4:SER:HB2 | 7 | 1.39 |
| (2,1672) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:90:LEU:HB2 | 16 | 1.39 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB1 | 5 | 1.39 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB2 | 5 | 1.39 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB3 | 5 | 1.39 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB1 | 5 | 1.39 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB2 | 5 | 1.39 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB3 | 5 | 1.39 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB1 | 5 | 1.39 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB2 | 5 | 1.39 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB3 | 5 | 1.39 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB1 | 6 | 1.39 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB2 | 6 | 1.39 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB3 | 6 | 1.39 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB1 | 6 | 1.39 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB2 | 6 | 1.39 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB3 | 6 | 1.39 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB1 | 6 | 1.39 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB2 | 6 | 1.39 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB3 | 6 | 1.39 |
| (2,1486) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:H | 5 | 1.39 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:61:ALA:HA | 4 | 1.39 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:61:ALA:HA | 4 | 1.39 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:61:ALA:HA | 4 | 1.39 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:61:ALA:HA | 10 | 1.39 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:61:ALA:HA | 10 | 1.39 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:61:ALA:HA | 10 | 1.39 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:61:ALA:HA | 13 | 1.39 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:61:ALA:HA | 13 | 1.39 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:61:ALA:HA | 13 | 1.39 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:61:ALA:HA | 14 | 1.39 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:61:ALA:HA | 14 | 1.39 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:61:ALA:HA | 14 | 1.39 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD11 | 14 | 1.39 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD12 | 14 | 1.39 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD13 | 14 | 1.39 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD11 | 4 | 1.39 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD12 | 4 | 1.39 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD13 | 4 | 1.39 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD11 | 4 | 1.39 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD12 | 4 | 1.39 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD13 | 4 | 1.39 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD11 | 4 | 1.39 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD12 | 4 | 1.39 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD13 | 4 | 1.39 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD11 | 13 | 1.39 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD12 | 13 | 1.39 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD13 | 13 | 1.39 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD11 | 13 | 1.39 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD12 | 13 | 1.39 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD13 | 13 | 1.39 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD11 | 13 | 1.39 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD12 | 13 | 1.39 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD13 | 13 | 1.39 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG21 | 5 | 1.39 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG22 | 5 | 1.39 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG23 | 5 | 1.39 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG21 | 5 | 1.39 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG22 | 5 | 1.39 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG23 | 5 | 1.39 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG21 | 5 | 1.39 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG22 | 5 | 1.39 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG23 | 5 | 1.39 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG21 | 16 | 1.39 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG22 | 16 | 1.39 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG23 | 16 | 1.39 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG21 | 16 | 1.39 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG22 | 16 | 1.39 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG23 | 16 | 1.39 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG21 | 16 | 1.39 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG22 | 16 | 1.39 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG23 | 16 | 1.39 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 6 | 1.39 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 6 | 1.39 |
| (1,559) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 6 | 1.39 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 13 | 1.38 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 13 | 1.38 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 13 | 1.38 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG21 | 8 | 1.38 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG22 | 8 | 1.38 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG23 | 8 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG11 | 3 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG12 | 3 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG13 | 3 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG11 | 3 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG12 | 3 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG13 | 3 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG11 | 3 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG12 | 3 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG13 | 3 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG11 | 5 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG12 | 5 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG13 | 5 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG11 | 5 | 1.38 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG12 | 5 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG13 | 5 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG11 | 5 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG12 | 5 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG13 | 5 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG11 | 6 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG12 | 6 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG13 | 6 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG11 | 6 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG12 | 6 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG13 | 6 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG11 | 6 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG12 | 6 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG13 | 6 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG11 | 7 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG12 | 7 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG13 | 7 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG11 | 7 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG12 | 7 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG13 | 7 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG11 | 7 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG12 | 7 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG13 | 7 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG11 | 9 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG12 | 9 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG13 | 9 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG11 | 9 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG12 | 9 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG13 | 9 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG11 | 9 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG12 | 9 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG13 | 9 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG11 | 10 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG12 | 10 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG13 | 10 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG11 | 10 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG12 | 10 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG13 | 10 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG11 | 10 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG12 | 10 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG13 | 10 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG11 | 14 | 1.38 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG12 | 14 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG13 | 14 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG11 | 14 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG12 | 14 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG13 | 14 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG11 | 14 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG12 | 14 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG13 | 14 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG11 | 15 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG12 | 15 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG13 | 15 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG11 | 15 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG12 | 15 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG13 | 15 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG11 | 15 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG12 | 15 | 1.38 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG13 | 15 | 1.38 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:4:SER:HB2 | 13 | 1.38 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:4:SER:HB2 | 13 | 1.38 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:4:SER:HB2 | 13 | 1.38 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD11 | 1:A:95:HIS:HB2 | 5 | 1.38 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD12 | 1:A:95:HIS:HB2 | 5 | 1.38 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD13 | 1:A:95:HIS:HB2 | 5 | 1.38 |
| (2,1672) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:90:LEU:HB2 | 10 | 1.38 |
| (2,1322) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HG | 4 | 1.38 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD11 | 8 | 1.38 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD12 | 8 | 1.38 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD13 | 8 | 1.38 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD11 | 13 | 1.38 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD12 | 13 | 1.38 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD13 | 13 | 1.38 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD11 | 10 | 1.38 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD12 | 10 | 1.38 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD13 | 10 | 1.38 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD11 | 10 | 1.38 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD12 | 10 | 1.38 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD13 | 10 | 1.38 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD11 | 10 | 1.38 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD12 | 10 | 1.38 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD13 | 10 | 1.38 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD11 | 15 | 1.38 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD12 | 15 | 1.38 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD13 | 15 | 1.38 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD11 | 15 | 1.38 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD12 | 15 | 1.38 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD13 | 15 | 1.38 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD11 | 15 | 1.38 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD12 | 15 | 1.38 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD13 | 15 | 1.38 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD11 | 16 | 1.38 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD12 | 16 | 1.38 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD13 | 16 | 1.38 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD11 | 16 | 1.38 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD12 | 16 | 1.38 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD13 | 16 | 1.38 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD11 | 16 | 1.38 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD12 | 16 | 1.38 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD13 | 16 | 1.38 |
| (1,146) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:53:ASP:HB3 | 2 | 1.38 |
| (1,146) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:53:ASP:HB3 | 5 | 1.38 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:51:PHE:HE1 | 7 | 1.37 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:51:PHE:HE2 | 7 | 1.37 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:51:PHE:HE1 | 7 | 1.37 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:51:PHE:HE2 | 7 | 1.37 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:51:PHE:HE1 | 7 | 1.37 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:51:PHE:HE2 | 7 | 1.37 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:33:THR:HG1 | 1 | 1.37 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:33:THR:HG1 | 1 | 1.37 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:33:THR:HG1 | 1 | 1.37 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG11 | 2 | 1.37 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG12 | 2 | 1.37 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG13 | 2 | 1.37 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG11 | 2 | 1.37 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG12 | 2 | 1.37 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG13 | 2 | 1.37 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG11 | 2 | 1.37 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG12 | 2 | 1.37 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG13 | 2 | 1.37 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG11 | 16 | 1.37 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG12 | 16 | 1.37 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG13 | 16 | 1.37 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG11 | 16 | 1.37 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG12 | 16 | 1.37 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG13 | 16 | 1.37 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG11 | 16 | 1.37 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG12 | 16 | 1.37 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG13 | 16 | 1.37 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:4:SER:HB2 | 12 | 1.37 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:4:SER:HB2 | 12 | 1.37 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:4:SER:HB2 | 12 | 1.37 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:87:PRO:HA | 2 | 1.37 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:87:PRO:HA | 2 | 1.37 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:87:PRO:HA | 2 | 1.37 |
| (2,1558) | 1:A:82:PHE:HA | 1:A:85:PRO:HB2 | 2 | 1.37 |
| (2,1558) | 1:A:82:PHE:HA | 1:A:85:PRO:HB2 | 14 | 1.37 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB1 | 2 | 1.37 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB2 | 2 | 1.37 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB3 | 2 | 1.37 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB1 | 2 | 1.37 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB2 | 2 | 1.37 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB3 | 2 | 1.37 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB1 | 2 | 1.37 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB2 | 2 | 1.37 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB3 | 2 | 1.37 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB1 | 8 | 1.37 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB2 | 8 | 1.37 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB3 | 8 | 1.37 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB1 | 8 | 1.37 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB2 | 8 | 1.37 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB3 | 8 | 1.37 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB1 | 8 | 1.37 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB2 | 8 | 1.37 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB3 | 8 | 1.37 |
| (2,1478) | 1:A:75:ASP:HB2 | 1:A:74:LEU:HB2 | 5 | 1.37 |
| (2,1322) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HG | 6 | 1.37 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD11 | 5 | 1.37 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD12 | 5 | 1.37 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD13 | 5 | 1.37 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD11 | 6 | 1.37 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD12 | 6 | 1.37 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD13 | 6 | 1.37 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD11 | 12 | 1.37 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD12 | 12 | 1.37 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD13 | 12 | 1.37 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD11 | 5 | 1.37 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD12 | 5 | 1.37 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD13 | 5 | 1.37 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD11 | 5 | 1.37 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD12 | 5 | 1.37 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD13 | 5 | 1.37 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD11 | 5 | 1.37 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD12 | 5 | 1.37 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD13 | 5 | 1.37 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG21 | 1 | 1.37 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG22 | 1 | 1.37 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG23 | 1 | 1.37 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG21 | 1 | 1.37 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG22 | 1 | 1.37 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG23 | 1 | 1.37 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG21 | 1 | 1.37 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG22 | 1 | 1.37 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG23 | 1 | 1.37 |
| (1,146) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:53:ASP:HB3 | 12 | 1.37 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:51:PHE:HE1 | 8 | 1.36 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:51:PHE:HE2 | 8 | 1.36 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:51:PHE:HE1 | 8 | 1.36 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:51:PHE:HE2 | 8 | 1.36 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:51:PHE:HE1 | 8 | 1.36 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:51:PHE:HE2 | 8 | 1.36 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:33:THR:HG1 | 9 | 1.36 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:33:THR:HG1 | 9 | 1.36 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:33:THR:HG1 | 9 | 1.36 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 10 | 1.36 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 10 | 1.36 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 10 | 1.36 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG11 | 13 | 1.36 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG12 | 13 | 1.36 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:HG13 | 13 | 1.36 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG11 | 13 | 1.36 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG12 | 13 | 1.36 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:HG13 | 13 | 1.36 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG11 | 13 | 1.36 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG12 | 13 | 1.36 |
| (2,1877) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:HG13 | 13 | 1.36 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:87:PRO:HA | 16 | 1.36 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:87:PRO:HA | 16 | 1.36 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:87:PRO:HA | 16 | 1.36 |
| (2,1558) | 1:A:82:PHE:HA | 1:A:85:PRO:HB2 | 7 | 1.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1478) | 1:A:75:ASP:HB2 | 1:A:74:LEU:HB2 | 13 | 1.36 |
| (2,1322) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HG | 15 | 1.36 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD11 | 4 | 1.36 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD12 | 4 | 1.36 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD13 | 4 | 1.36 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:61:ALA:HA | 9 | 1.36 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:61:ALA:HA | 9 | 1.36 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:61:ALA:HA | 9 | 1.36 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:61:ALA:HA | 16 | 1.36 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:61:ALA:HA | 16 | 1.36 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:61:ALA:HA | 16 | 1.36 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:ASP:HB3 | 16 | 1.36 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:ASP:HB3 | 16 | 1.36 |
| (2,109) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:ASP:HB3 | 16 | 1.36 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD11 | 7 | 1.36 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD12 | 7 | 1.36 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD13 | 7 | 1.36 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD11 | 7 | 1.36 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD12 | 7 | 1.36 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD13 | 7 | 1.36 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD11 | 7 | 1.36 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD12 | 7 | 1.36 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD13 | 7 | 1.36 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD11 | 8 | 1.36 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD12 | 8 | 1.36 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD13 | 8 | 1.36 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD11 | 8 | 1.36 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD12 | 8 | 1.36 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD13 | 8 | 1.36 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD11 | 8 | 1.36 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD12 | 8 | 1.36 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD13 | 8 | 1.36 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD11 | 12 | 1.36 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD12 | 12 | 1.36 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD13 | 12 | 1.36 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD11 | 12 | 1.36 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD12 | 12 | 1.36 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD13 | 12 | 1.36 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD11 | 12 | 1.36 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD12 | 12 | 1.36 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD13 | 12 | 1.36 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 1 | 1.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 1 | 1.36 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 1 | 1.36 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 15 | 1.36 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 15 | 1.36 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 15 | 1.36 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 16 | 1.36 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 16 | 1.36 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 16 | 1.36 |
| (1,146) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:53:ASP:HB3 | 11 | 1.36 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:4:SER:HB2 | 5 | 1.35 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:4:SER:HB2 | 5 | 1.35 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:4:SER:HB2 | 5 | 1.35 |
| (2,1672) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:90:LEU:HB2 | 3 | 1.35 |
| (2,1672) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:90:LEU:HB2 | 11 | 1.35 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB1 | 10 | 1.35 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB2 | 10 | 1.35 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB3 | 10 | 1.35 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB1 | 10 | 1.35 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB2 | 10 | 1.35 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB3 | 10 | 1.35 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB1 | 10 | 1.35 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB2 | 10 | 1.35 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB3 | 10 | 1.35 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB1 | 14 | 1.35 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB2 | 14 | 1.35 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB3 | 14 | 1.35 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB1 | 14 | 1.35 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB2 | 14 | 1.35 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB3 | 14 | 1.35 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB1 | 14 | 1.35 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB2 | 14 | 1.35 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB3 | 14 | 1.35 |
| (2,1486) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:H | 11 | 1.35 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD11 | 2 | 1.35 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD12 | 2 | 1.35 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD13 | 2 | 1.35 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD11 | 4 | 1.35 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD12 | 4 | 1.35 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD13 | 4 | 1.35 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD11 | 7 | 1.35 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD12 | 7 | 1.35 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD13 | 7 | 1.35 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD11 | 10 | 1.35 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD12 | 10 | 1.35 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD13 | 10 | 1.35 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD11 | 15 | 1.35 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD12 | 15 | 1.35 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD13 | 15 | 1.35 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:3:ALA:HA | 4 | 1.35 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:3:ALA:HA | 4 | 1.35 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:3:ALA:HA | 4 | 1.35 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG21 | 13 | 1.35 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG22 | 13 | 1.35 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:45:ILE:HG23 | 13 | 1.35 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG21 | 13 | 1.35 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG22 | 13 | 1.35 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:45:ILE:HG23 | 13 | 1.35 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG21 | 13 | 1.35 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG22 | 13 | 1.35 |
| (2,1000) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:45:ILE:HG23 | 13 | 1.35 |
| (1,146) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:53:ASP:HB3 | 3 | 1.35 |
| (1,146) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:53:ASP:HB3 | 15 | 1.35 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:51:PHE:HE1 | 1 | 1.34 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:51:PHE:HE2 | 1 | 1.34 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:51:PHE:HE1 | 1 | 1.34 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:51:PHE:HE2 | 1 | 1.34 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:51:PHE:HE1 | 1 | 1.34 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:51:PHE:HE2 | 1 | 1.34 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:33:THR:HG1 | 5 | 1.34 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:33:THR:HG1 | 5 | 1.34 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:33:THR:HG1 | 5 | 1.34 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:33:THR:HG1 | 8 | 1.34 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:33:THR:HG1 | 8 | 1.34 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:33:THR:HG1 | 8 | 1.34 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 8 | 1.34 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 8 | 1.34 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 8 | 1.34 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:4:SER:HB2 | 10 | 1.34 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:4:SER:HB2 | 10 | 1.34 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:4:SER:HB2 | 10 | 1.34 |
| (2,1672) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:90:LEU:HB2 | 2 | 1.34 |
| (2,1672) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:90:LEU:HB2 | 14 | 1.34 |
| (2,1672) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:90:LEU:HB2 | 15 | 1.34 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB1 | 9 | 1.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB2 | 9 | 1.34 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB3 | 9 | 1.34 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB1 | 9 | 1.34 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB2 | 9 | 1.34 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB3 | 9 | 1.34 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB1 | 9 | 1.34 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB2 | 9 | 1.34 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB3 | 9 | 1.34 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB1 | 15 | 1.34 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB2 | 15 | 1.34 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB3 | 15 | 1.34 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB1 | 15 | 1.34 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB2 | 15 | 1.34 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB3 | 15 | 1.34 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB1 | 15 | 1.34 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB2 | 15 | 1.34 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB3 | 15 | 1.34 |
| (2,1478) | 1:A:75:ASP:HB2 | 1:A:74:LEU:HB2 | 10 | 1.34 |
| (2,1269) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HG | 2 | 1.34 |
| (2,1269) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HG | 6 | 1.34 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:61:ALA:HA | 15 | 1.34 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:61:ALA:HA | 15 | 1.34 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:61:ALA:HA | 15 | 1.34 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD11 | 11 | 1.34 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD12 | 11 | 1.34 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD13 | 11 | 1.34 |
| (2,1133) | 1:A:58:SER:HB3 | 1:A:59:LEU:HG | 16 | 1.34 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD11 | 6 | 1.34 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD12 | 6 | 1.34 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD13 | 6 | 1.34 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD11 | 6 | 1.34 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD12 | 6 | 1.34 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD13 | 6 | 1.34 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD11 | 6 | 1.34 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD12 | 6 | 1.34 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD13 | 6 | 1.34 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD11 | 11 | 1.34 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD12 | 11 | 1.34 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD13 | 11 | 1.34 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD11 | 11 | 1.34 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD12 | 11 | 1.34 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD13 | 11 | 1.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD11 | 11 | 1.34 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD12 | 11 | 1.34 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD13 | 11 | 1.34 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 9 | 1.34 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 9 | 1.34 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 9 | 1.34 |
| (2,893) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:42:PRO:HG3 | 5 | 1.33 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:51:PHE:HE1 | 6 | 1.33 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:51:PHE:HE2 | 6 | 1.33 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:51:PHE:HE1 | 6 | 1.33 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:51:PHE:HE2 | 6 | 1.33 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:51:PHE:HE1 | 6 | 1.33 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:51:PHE:HE2 | 6 | 1.33 |
| (2,493) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:23:GLN:H | 9 | 1.33 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:4:SER:HB2 | 6 | 1.33 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:4:SER:HB2 | 6 | 1.33 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:4:SER:HB2 | 6 | 1.33 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD11 | 1:A:95:HIS:HB2 | 12 | 1.33 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD12 | 1:A:95:HIS:HB2 | 12 | 1.33 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD13 | 1:A:95:HIS:HB2 | 12 | 1.33 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD11 | 1:A:95:HIS:HB2 | 14 | 1.33 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD12 | 1:A:95:HIS:HB2 | 14 | 1.33 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD13 | 1:A:95:HIS:HB2 | 14 | 1.33 |
| (2,1672) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:90:LEU:HB2 | 6 | 1.33 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:87:PRO:HA | 5 | 1.33 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:87:PRO:HA | 5 | 1.33 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:87:PRO:HA | 5 | 1.33 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:87:PRO:HA | 10 | 1.33 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:87:PRO:HA | 10 | 1.33 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:87:PRO:HA | 10 | 1.33 |
| (2,1558) | 1:A:82:PHE:HA | 1:A:85:PRO:HB2 | 6 | 1.33 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB1 | 13 | 1.33 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB2 | 13 | 1.33 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB3 | 13 | 1.33 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB1 | 13 | 1.33 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB2 | 13 | 1.33 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB3 | 13 | 1.33 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB1 | 13 | 1.33 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB2 | 13 | 1.33 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB3 | 13 | 1.33 |
| (2,1322) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HG | 5 | 1.33 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD11 | 5 | 1.33 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD12 | 5 | 1.33 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD13 | 5 | 1.33 |
| (2,1269) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HG | 14 | 1.33 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:61:ALA:HA | 2 | 1.33 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:61:ALA:HA | 2 | 1.33 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:61:ALA:HA | 2 | 1.33 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:61:ALA:HA | 7 | 1.33 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:61:ALA:HA | 7 | 1.33 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:61:ALA:HA | 7 | 1.33 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD11 | 2 | 1.33 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD12 | 2 | 1.33 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD13 | 2 | 1.33 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD11 | 2 | 1.33 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD12 | 2 | 1.33 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD13 | 2 | 1.33 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD11 | 2 | 1.33 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD12 | 2 | 1.33 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD13 | 2 | 1.33 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 5 | 1.33 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 5 | 1.33 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 5 | 1.33 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 11 | 1.33 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 11 | 1.33 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 11 | 1.33 |
| (1,146) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:53:ASP:HB3 | 4 | 1.33 |
| (2,900) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:43:GLU:HB3 | 3 | 1.32 |
| (2,900) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:43:GLU:HB3 | 3 | 1.32 |
| (2,900) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:43:GLU:HB3 | 3 | 1.32 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:33:THR:HG1 | 11 | 1.32 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:33:THR:HG1 | 11 | 1.32 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:33:THR:HG1 | 11 | 1.32 |
| (2,493) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:23:GLN:H | 6 | 1.32 |
| (2,493) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:23:GLN:H | 13 | 1.32 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 15 | 1.32 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 15 | 1.32 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 15 | 1.32 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 16 | 1.32 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 16 | 1.32 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 16 | 1.32 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:4:SER:HB2 | 9 | 1.32 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:4:SER:HB2 | 9 | 1.32 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:4:SER:HB2 | 9 | 1.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1672) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:90:LEU:HB2 | 5 | 1.32 |
| (2,155) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:71:ASN:HD21 | 12 | 1.32 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB1 | 1 | 1.32 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB2 | 1 | 1.32 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB3 | 1 | 1.32 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB1 | 1 | 1.32 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB2 | 1 | 1.32 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB3 | 1 | 1.32 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB1 | 1 | 1.32 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB2 | 1 | 1.32 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB3 | 1 | 1.32 |
| (2,1486) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:H | 8 | 1.32 |
| (2,1478) | 1:A:75:ASP:HB2 | 1:A:74:LEU:HB2 | 16 | 1.32 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD11 | 13 | 1.32 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD12 | 13 | 1.32 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD13 | 13 | 1.32 |
| (2,1269) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HG | 9 | 1.32 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD11 | 16 | 1.32 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD12 | 16 | 1.32 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD13 | 16 | 1.32 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD11 | 14 | 1.32 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD12 | 14 | 1.32 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD13 | 14 | 1.32 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD11 | 14 | 1.32 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD12 | 14 | 1.32 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD13 | 14 | 1.32 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD11 | 14 | 1.32 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD12 | 14 | 1.32 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD13 | 14 | 1.32 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 4 | 1.32 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 4 | 1.32 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 4 | 1.32 |
| (1,384) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:71:ASN:H | 8 | 1.32 |
| (1,146) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:53:ASP:HB3 | 6 | 1.32 |
| (2,893) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:42:PRO:HG3 | 6 | 1.31 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:51:PHE:HE1 | 5 | 1.31 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:51:PHE:HE2 | 5 | 1.31 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:51:PHE:HE1 | 5 | 1.31 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:51:PHE:HE2 | 5 | 1.31 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:51:PHE:HE1 | 5 | 1.31 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:51:PHE:HE2 | 5 | 1.31 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:33:THR:HG1 | 4 | 1.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:33:THR:HG1 | 4 | 1.31 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:33:THR:HG1 | 4 | 1.31 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:33:THR:HG1 | 7 | 1.31 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:33:THR:HG1 | 7 | 1.31 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:33:THR:HG1 | 7 | 1.31 |
| (2,493) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:23:GLN:H | 11 | 1.31 |
| (2,1672) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:90:LEU:HB2 | 13 | 1.31 |
| (2,1322) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HG | 1 | 1.31 |
| (2,1322) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HG | 14 | 1.31 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD11 | 9 | 1.31 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD12 | 9 | 1.31 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD13 | 9 | 1.31 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD11 | 11 | 1.31 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD12 | 11 | 1.31 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD13 | 11 | 1.31 |
| (2,1269) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HG | 1 | 1.31 |
| (2,1269) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HG | 4 | 1.31 |
| (2,1269) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HG | 10 | 1.31 |
| (2,1269) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HG | 13 | 1.31 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:61:ALA:HA | 1 | 1.31 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:61:ALA:HA | 1 | 1.31 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:61:ALA:HA | 1 | 1.31 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:61:ALA:HA | 3 | 1.31 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:61:ALA:HA | 3 | 1.31 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:61:ALA:HA | 3 | 1.31 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:61:ALA:HA | 11 | 1.31 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:61:ALA:HA | 11 | 1.31 |
| (2,1260) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:61:ALA:HA | 11 | 1.31 |
| (2,1133) | 1:A:58:SER:HB3 | 1:A:59:LEU:HG | 6 | 1.31 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD11 | 1 | 1.31 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD12 | 1 | 1.31 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD13 | 1 | 1.31 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD11 | 1 | 1.31 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD12 | 1 | 1.31 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD13 | 1 | 1.31 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD11 | 1 | 1.31 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD12 | 1 | 1.31 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD13 | 1 | 1.31 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD11 | 3 | 1.31 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD12 | 3 | 1.31 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD13 | 3 | 1.31 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD11 | 3 | 1.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD12 | 3 | 1.31 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD13 | 3 | 1.31 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD11 | 3 | 1.31 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD12 | 3 | 1.31 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD13 | 3 | 1.31 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 3 | 1.31 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 3 | 1.31 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 3 | 1.31 |
| (1,384) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:71:ASN:H | 16 | 1.31 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:33:THR:HG1 | 15 | 1.3 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:33:THR:HG1 | 15 | 1.3 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:33:THR:HG1 | 15 | 1.3 |
| (2,1672) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:90:LEU:HB2 | 12 | 1.3 |
| (2,1321) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HB2 | 10 | 1.3 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD11 | 10 | 1.3 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD12 | 10 | 1.3 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD13 | 10 | 1.3 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD11 | 12 | 1.3 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD12 | 12 | 1.3 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD13 | 12 | 1.3 |
| (2,1269) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HG | 5 | 1.3 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD11 | 3 | 1.3 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD12 | 3 | 1.3 |
| (2,1243) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HD13 | 3 | 1.3 |
| (2,1163) | 1:A:60:THR:HA | 1:A:64:LEU:HB3 | 6 | 1.3 |
| (2,1163) | 1:A:60:THR:HA | 1:A:64:LEU:HB3 | 10 | 1.3 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD11 | 9 | 1.3 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD12 | 9 | 1.3 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:LEU:HD13 | 9 | 1.3 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD11 | 9 | 1.3 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD12 | 9 | 1.3 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:LEU:HD13 | 9 | 1.3 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD11 | 9 | 1.3 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD12 | 9 | 1.3 |
| (2,108) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:LEU:HD13 | 9 | 1.3 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 6 | 1.3 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 6 | 1.3 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 6 | 1.3 |
| (1,384) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:71:ASN:H | 9 | 1.3 |
| (1,146) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:53:ASP:HB3 | 16 | 1.3 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD21 | 8 | 1.3 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD22 | 8 | 1.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD23 | 8 | 1.3 |
| (2,893) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:42:PRO:HG3 | 1 | 1.29 |
| (2,893) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:42:PRO:HG3 | 4 | 1.29 |
| (2,893) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:42:PRO:HG3 | 16 | 1.29 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:33:THR:HG1 | 2 | 1.29 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:33:THR:HG1 | 2 | 1.29 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:33:THR:HG1 | 2 | 1.29 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:33:THR:HG1 | 6 | 1.29 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:33:THR:HG1 | 6 | 1.29 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:33:THR:HG1 | 6 | 1.29 |
| (2,493) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:23:GLN:H | 16 | 1.29 |
| (2,360) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:20:GLN:H | 1 | 1.29 |
| (2,360) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:20:GLN:H | 1 | 1.29 |
| (2,360) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:20:GLN:H | 1 | 1.29 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG21 | 5 | 1.29 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG22 | 5 | 1.29 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG23 | 5 | 1.29 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:4:SER:HB2 | 14 | 1.29 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:4:SER:HB2 | 14 | 1.29 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:4:SER:HB2 | 14 | 1.29 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD11 | 1:A:95:HIS:HB2 | 9 | 1.29 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD12 | 1:A:95:HIS:HB2 | 9 | 1.29 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD13 | 1:A:95:HIS:HB2 | 9 | 1.29 |
| (2,1784) | 1:A:98:LEU:HD11 | 1:A:94:LEU:HA | 5 | 1.29 |
| (2,1784) | 1:A:98:LEU:HD12 | 1:A:94:LEU:HA | 5 | 1.29 |
| (2,1784) | 1:A:98:LEU:HD13 | 1:A:94:LEU:HA | 5 | 1.29 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:87:PRO:HA | 3 | 1.29 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:87:PRO:HA | 3 | 1.29 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:87:PRO:HA | 3 | 1.29 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB1 | 3 | 1.29 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB2 | 3 | 1.29 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB3 | 3 | 1.29 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB1 | 3 | 1.29 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB2 | 3 | 1.29 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB3 | 3 | 1.29 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB1 | 3 | 1.29 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB2 | 3 | 1.29 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB3 | 3 | 1.29 |
| (2,1478) | 1:A:75:ASP:HB2 | 1:A:74:LEU:HB2 | 3 | 1.29 |
| (2,1269) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HG | 7 | 1.29 |
| (2,1269) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HG | 12 | 1.29 |
| (2,1163) | 1:A:60:THR:HA | 1:A:64:LEU:HB3 | 8 | 1.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1133) | 1:A:58:SER:HB3 | 1:A:59:LEU:HG | 3 | 1.29 |
| (2,1133) | 1:A:58:SER:HB3 | 1:A:59:LEU:HG | 10 | 1.29 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 2 | 1.29 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 2 | 1.29 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 2 | 1.29 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 12 | 1.29 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 12 | 1.29 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 12 | 1.29 |
| (2,893) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:42:PRO:HG3 | 12 | 1.28 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:33:THR:HG1 | 3 | 1.28 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:33:THR:HG1 | 3 | 1.28 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:33:THR:HG1 | 3 | 1.28 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:33:THR:HG1 | 16 | 1.28 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:33:THR:HG1 | 16 | 1.28 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:33:THR:HG1 | 16 | 1.28 |
| (2,285) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:21:GLN:HG2 | 1 | 1.28 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 9 | 1.28 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 9 | 1.28 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 9 | 1.28 |
| (2,1672) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:90:LEU:HB2 | 4 | 1.28 |
| (2,1322) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HG | 2 | 1.28 |
| (2,1322) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HG | 10 | 1.28 |
| (2,1163) | 1:A:60:THR:HA | 1:A:64:LEU:HB3 | 1 | 1.28 |
| (1,605) | 1:A:43:GLU:H | 1:A:42:PRO:HD2 | 8 | 1.28 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 10 | 1.28 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 10 | 1.28 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 10 | 1.28 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 13 | 1.28 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 13 | 1.28 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 13 | 1.28 |
| (2,893) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:42:PRO:HG3 | 13 | 1.27 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:51:PHE:HE1 | 10 | 1.27 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:51:PHE:HE2 | 10 | 1.27 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:51:PHE:HE1 | 10 | 1.27 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:51:PHE:HE2 | 10 | 1.27 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:51:PHE:HE1 | 10 | 1.27 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:51:PHE:HE2 | 10 | 1.27 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:51:PHE:HE1 | 15 | 1.27 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:51:PHE:HE2 | 15 | 1.27 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:51:PHE:HE1 | 15 | 1.27 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:51:PHE:HE2 | 15 | 1.27 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:51:PHE:HE1 | 15 | 1.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:51:PHE:HE2 | 15 | 1.27 |
| (2,493) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:23:GLN:H | 2 | 1.27 |
| (2,360) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:20:GLN:H | 8 | 1.27 |
| (2,360) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:20:GLN:H | 8 | 1.27 |
| (2,360) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:20:GLN:H | 8 | 1.27 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 4 | 1.27 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 4 | 1.27 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 4 | 1.27 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 7 | 1.27 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 7 | 1.27 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 7 | 1.27 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:87:PRO:HA | 1 | 1.27 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:87:PRO:HA | 1 | 1.27 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:87:PRO:HA | 1 | 1.27 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:87:PRO:HA | 11 | 1.27 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:87:PRO:HA | 11 | 1.27 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:87:PRO:HA | 11 | 1.27 |
| (2,155) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:71:ASN:HD21 | 11 | 1.27 |
| (2,1486) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:H | 4 | 1.27 |
| (2,1163) | 1:A:60:THR:HA | 1:A:64:LEU:HB3 | 12 | 1.27 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 14 | 1.27 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 14 | 1.27 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 14 | 1.27 |
| (1,146) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:53:ASP:HB3 | 8 | 1.27 |
| (1,146) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:53:ASP:HB3 | 9 | 1.27 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:51:PHE:HE1 | 4 | 1.26 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:51:PHE:HE2 | 4 | 1.26 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:51:PHE:HE1 | 4 | 1.26 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:51:PHE:HE2 | 4 | 1.26 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:51:PHE:HE1 | 4 | 1.26 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:51:PHE:HE2 | 4 | 1.26 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 15 | 1.26 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 15 | 1.26 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 15 | 1.26 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD11 | 1:A:95:HIS:HB2 | 13 | 1.26 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD12 | 1:A:95:HIS:HB2 | 13 | 1.26 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD13 | 1:A:95:HIS:HB2 | 13 | 1.26 |
| (2,1784) | 1:A:98:LEU:HD11 | 1:A:94:LEU:HA | 9 | 1.26 |
| (2,1784) | 1:A:98:LEU:HD12 | 1:A:94:LEU:HA | 9 | 1.26 |
| (2,1784) | 1:A:98:LEU:HD13 | 1:A:94:LEU:HA | 9 | 1.26 |
| (2,1322) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HG | 9 | 1.26 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD11 | 15 | 1.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD12 | 15 | 1.26 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD13 | 15 | 1.26 |
| (2,1269) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HG | 8 | 1.26 |
| (2,1163) | 1:A:60:THR:HA | 1:A:64:LEU:HB3 | 2 | 1.26 |
| (2,1163) | 1:A:60:THR:HA | 1:A:64:LEU:HB3 | 5 | 1.26 |
| (2,1163) | 1:A:60:THR:HA | 1:A:64:LEU:HB3 | 13 | 1.26 |
| (2,1163) | 1:A:60:THR:HA | 1:A:64:LEU:HB3 | 14 | 1.26 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 7 | 1.26 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 7 | 1.26 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 7 | 1.26 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 8 | 1.26 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 8 | 1.26 |
| (1,418) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 8 | 1.26 |
| (1,384) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:71:ASN:H | 15 | 1.26 |
| (1,146) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:53:ASP:HB3 | 10 | 1.26 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:51:PHE:HE1 | 11 | 1.25 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:51:PHE:HE2 | 11 | 1.25 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:51:PHE:HE1 | 11 | 1.25 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:51:PHE:HE2 | 11 | 1.25 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:51:PHE:HE1 | 11 | 1.25 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:51:PHE:HE2 | 11 | 1.25 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:51:PHE:HE1 | 16 | 1.25 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:51:PHE:HE2 | 16 | 1.25 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:51:PHE:HE1 | 16 | 1.25 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:51:PHE:HE2 | 16 | 1.25 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:51:PHE:HE1 | 16 | 1.25 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:51:PHE:HE2 | 16 | 1.25 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 8 | 1.25 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 8 | 1.25 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 8 | 1.25 |
| (2,285) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:21:GLN:HG2 | 8 | 1.25 |
| (2,1486) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:H | 6 | 1.25 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD11 | 11 | 1.25 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD12 | 11 | 1.25 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD13 | 11 | 1.25 |
| (2,1321) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HB2 | 7 | 1.25 |
| (2,1321) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HB2 | 12 | 1.25 |
| (2,1269) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HG | 16 | 1.25 |
| (2,1163) | 1:A:60:THR:HA | 1:A:64:LEU:HB3 | 4 | 1.25 |
| (2,1163) | 1:A:60:THR:HA | 1:A:64:LEU:HB3 | 7 | 1.25 |
| (2,1163) | 1:A:60:THR:HA | 1:A:64:LEU:HB3 | 16 | 1.25 |
| (1,384) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:71:ASN:H | 2 | 1.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,384) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:71:ASN:H | 14 | 1.25 |
| (1,234) | 1:A:102:HIS:H | 1:A:101:SER:HB2 | 8 | 1.25 |
| (2,900) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:43:GLU:HB3 | 9 | 1.24 |
| (2,900) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:43:GLU:HB3 | 9 | 1.24 |
| (2,900) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:43:GLU:HB3 | 9 | 1.24 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 7 | 1.24 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 7 | 1.24 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 7 | 1.24 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 12 | 1.24 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 12 | 1.24 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 12 | 1.24 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 13 | 1.24 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 13 | 1.24 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 13 | 1.24 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG21 | 14 | 1.24 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG22 | 14 | 1.24 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG23 | 14 | 1.24 |
| (2,171) | 1:A:53:ASP:HB2 | 1:A:51:PHE:HA | 11 | 1.24 |
| (2,155) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:71:ASN:HD21 | 13 | 1.24 |
| (2,1321) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HB2 | 8 | 1.24 |
| (2,1163) | 1:A:60:THR:HA | 1:A:64:LEU:HB3 | 9 | 1.24 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:33:THR:HG1 | 12 | 1.23 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:33:THR:HG1 | 12 | 1.23 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:33:THR:HG1 | 12 | 1.23 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:33:THR:HG1 | 13 | 1.23 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:33:THR:HG1 | 13 | 1.23 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:33:THR:HG1 | 13 | 1.23 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:33:THR:HG1 | 14 | 1.23 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:33:THR:HG1 | 14 | 1.23 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:33:THR:HG1 | 14 | 1.23 |
| (2,493) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:23:GLN:H | 12 | 1.23 |
| (2,360) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:20:GLN:H | 2 | 1.23 |
| (2,360) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:20:GLN:H | 2 | 1.23 |
| (2,360) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:20:GLN:H | 2 | 1.23 |
| (2,360) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:20:GLN:H | 7 | 1.23 |
| (2,360) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:20:GLN:H | 7 | 1.23 |
| (2,360) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:20:GLN:H | 7 | 1.23 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 1 | 1.23 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 1 | 1.23 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 1 | 1.23 |
| (2,1809) | 1:A:101:SER:HB2 | 1:A:100:GLN:H | 6 | 1.23 |
| (2,1672) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:90:LEU:HB2 | 1 | 1.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1558) | 1:A:82:PHE:HA | 1:A:85:PRO:HB2 | 5 | 1.23 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD11 | 1 | 1.23 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD12 | 1 | 1.23 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD13 | 1 | 1.23 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD11 | 14 | 1.23 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD12 | 14 | 1.23 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD13 | 14 | 1.23 |
| (2,1269) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HG | 15 | 1.23 |
| (1,191) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:65:ARG:HB2 | 11 | 1.23 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG21 | 7 | 1.22 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG22 | 7 | 1.22 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG23 | 7 | 1.22 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:51:PHE:HE1 | 2 | 1.22 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:51:PHE:HE2 | 2 | 1.22 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:51:PHE:HE1 | 2 | 1.22 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:51:PHE:HE2 | 2 | 1.22 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:51:PHE:HE1 | 2 | 1.22 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:51:PHE:HE2 | 2 | 1.22 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:51:PHE:HE1 | 13 | 1.22 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:51:PHE:HE2 | 13 | 1.22 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:51:PHE:HE1 | 13 | 1.22 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:51:PHE:HE2 | 13 | 1.22 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:51:PHE:HE1 | 13 | 1.22 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:51:PHE:HE2 | 13 | 1.22 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:33:THR:HG1 | 10 | 1.22 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:33:THR:HG1 | 10 | 1.22 |
| (2,789) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:33:THR:HG1 | 10 | 1.22 |
| (2,360) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:20:GLN:H | 9 | 1.22 |
| (2,360) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:20:GLN:H | 9 | 1.22 |
| (2,360) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:20:GLN:H | 9 | 1.22 |
| (2,360) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:20:GLN:H | 10 | 1.22 |
| (2,360) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:20:GLN:H | 10 | 1.22 |
| (2,360) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:20:GLN:H | 10 | 1.22 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG21 | 14 | 1.22 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG22 | 14 | 1.22 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG23 | 14 | 1.22 |
| (2,285) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:21:GLN:HG2 | 14 | 1.22 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG21 | 9 | 1.22 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG22 | 9 | 1.22 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG23 | 9 | 1.22 |
| (2,1718) | 1:A:100:GLN:HG2 | 1:A:99:THR:HB | 2 | 1.22 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD11 | 9 | 1.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD12 | 9 | 1.22 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD13 | 9 | 1.22 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD11 | 9 | 1.22 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD12 | 9 | 1.22 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD13 | 9 | 1.22 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD11 | 9 | 1.22 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD12 | 9 | 1.22 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD13 | 9 | 1.22 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB1 | 11 | 1.22 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB2 | 11 | 1.22 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:32:ALA:HB3 | 11 | 1.22 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB1 | 11 | 1.22 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB2 | 11 | 1.22 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:32:ALA:HB3 | 11 | 1.22 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB1 | 11 | 1.22 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB2 | 11 | 1.22 |
| (2,1509) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:32:ALA:HB3 | 11 | 1.22 |
| (2,1322) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HG | 7 | 1.22 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD11 | 3 | 1.22 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD12 | 3 | 1.22 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD13 | 3 | 1.22 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:3:ALA:HA | 9 | 1.22 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:3:ALA:HA | 9 | 1.22 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:3:ALA:HA | 9 | 1.22 |
| (1,605) | 1:A:43:GLU:H | 1:A:42:PRO:HD2 | 14 | 1.22 |
| (1,259) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:56:ILE:HG13 | 4 | 1.22 |
| (1,259) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:56:ILE:HG13 | 9 | 1.22 |
| (2,944) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:47:PRO:HB2 | 4 | 1.21 |
| (2,944) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:47:PRO:HB2 | 13 | 1.21 |
| (2,360) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:20:GLN:H | 5 | 1.21 |
| (2,360) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:20:GLN:H | 5 | 1.21 |
| (2,360) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:20:GLN:H | 5 | 1.21 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG21 | 1 | 1.21 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG22 | 1 | 1.21 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG23 | 1 | 1.21 |
| (2,216) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:12:ARG:HB2 | 5 | 1.21 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:87:PRO:HA | 4 | 1.21 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:87:PRO:HA | 4 | 1.21 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:87:PRO:HA | 4 | 1.21 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:87:PRO:HA | 13 | 1.21 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:87:PRO:HA | 13 | 1.21 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:87:PRO:HA | 13 | 1.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:87:PRO:HA | 14 | 1.21 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:87:PRO:HA | 14 | 1.21 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:87:PRO:HA | 14 | 1.21 |
| (2,1558) | 1:A:82:PHE:HA | 1:A:85:PRO:HB2 | 4 | 1.21 |
| (2,1321) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HB2 | 16 | 1.21 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD11 | 2 | 1.21 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD12 | 2 | 1.21 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD13 | 2 | 1.21 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD11 | 6 | 1.21 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD12 | 6 | 1.21 |
| (2,1285) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:62:LEU:HD13 | 6 | 1.21 |
| (2,1269) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HG | 3 | 1.21 |
| (2,1229) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:65:ARG:H | 8 | 1.21 |
| (2,1163) | 1:A:60:THR:HA | 1:A:64:LEU:HB3 | 15 | 1.21 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:3:ALA:HA | 12 | 1.21 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:3:ALA:HA | 12 | 1.21 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:3:ALA:HA | 12 | 1.21 |
| (1,605) | 1:A:43:GLU:H | 1:A:42:PRO:HD2 | 11 | 1.21 |
| (1,384) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:71:ASN:H | 6 | 1.21 |
| (1,259) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:56:ILE:HG13 | 1 | 1.21 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD21 | 1 | 1.21 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD22 | 1 | 1.21 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD23 | 1 | 1.21 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD21 | 2 | 1.21 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD22 | 2 | 1.21 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD23 | 2 | 1.21 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD21 | 5 | 1.21 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD22 | 5 | 1.21 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD23 | 5 | 1.21 |
| (2,944) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:47:PRO:HB2 | 5 | 1.2 |
| (2,944) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:47:PRO:HB2 | 12 | 1.2 |
| (2,944) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:47:PRO:HB2 | 15 | 1.2 |
| (2,900) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:43:GLU:HB3 | 11 | 1.2 |
| (2,900) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:43:GLU:HB3 | 11 | 1.2 |
| (2,900) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:43:GLU:HB3 | 11 | 1.2 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG21 | 8 | 1.2 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG22 | 8 | 1.2 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG23 | 8 | 1.2 |
| (2,493) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:23:GLN:H | 14 | 1.2 |
| (2,360) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:20:GLN:H | 4 | 1.2 |
| (2,360) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:20:GLN:H | 4 | 1.2 |
| (2,360) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:20:GLN:H | 4 | 1.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,285) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:21:GLN:HG2 | 9 | 1.2 |
| (2,216) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:12:ARG:HB2 | 9 | 1.2 |
| (2,1672) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:90:LEU:HB2 | 9 | 1.2 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:87:PRO:HA | 15 | 1.2 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:87:PRO:HA | 15 | 1.2 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:87:PRO:HA | 15 | 1.2 |
| (2,1558) | 1:A:82:PHE:HA | 1:A:85:PRO:HB2 | 12 | 1.2 |
| (2,1498) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HB2 | 5 | 1.2 |
| (2,1321) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HB2 | 13 | 1.2 |
| (2,1163) | 1:A:60:THR:HA | 1:A:64:LEU:HB3 | 3 | 1.2 |
| (2,1156) | 1:A:60:THR:HB | 1:A:59:LEU:HB3 | 1 | 1.2 |
| (1,605) | 1:A:43:GLU:H | 1:A:42:PRO:HD2 | 10 | 1.2 |
| (1,384) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:71:ASN:H | 1 | 1.2 |
| (2,944) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:47:PRO:HB2 | 9 | 1.19 |
| (2,82) | 1:A:3:ALA:HA | 1:A:4:SER:H | 4 | 1.19 |
| (2,360) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:20:GLN:H | 14 | 1.19 |
| (2,360) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:20:GLN:H | 14 | 1.19 |
| (2,360) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:20:GLN:H | 14 | 1.19 |
| (2,360) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:20:GLN:H | 16 | 1.19 |
| (2,360) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:20:GLN:H | 16 | 1.19 |
| (2,360) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:20:GLN:H | 16 | 1.19 |
| (2,285) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:21:GLN:HG2 | 2 | 1.19 |
| (2,1841) | 1:A:98:LEU:HD21 | 1:A:95:HIS:HD2 | 1 | 1.19 |
| (2,1841) | 1:A:98:LEU:HD22 | 1:A:95:HIS:HD2 | 1 | 1.19 |
| (2,1841) | 1:A:98:LEU:HD23 | 1:A:95:HIS:HD2 | 1 | 1.19 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD11 | 1:A:95:HIS:HB2 | 3 | 1.19 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD12 | 1:A:95:HIS:HB2 | 3 | 1.19 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD13 | 1:A:95:HIS:HB2 | 3 | 1.19 |
| (2,171) | 1:A:53:ASP:HB2 | 1:A:51:PHE:HA | 3 | 1.19 |
| (2,171) | 1:A:53:ASP:HB2 | 1:A:51:PHE:HA | 13 | 1.19 |
| (2,1558) | 1:A:82:PHE:HA | 1:A:85:PRO:HB2 | 16 | 1.19 |
| (2,15) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:22:GLN:HA | 7 | 1.19 |
| (2,1486) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:H | 12 | 1.19 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD21 | 9 | 1.19 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD22 | 9 | 1.19 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD23 | 9 | 1.19 |
| (2,1322) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HG | 12 | 1.19 |
| (1,605) | 1:A:43:GLU:H | 1:A:42:PRO:HD2 | 9 | 1.19 |
| (1,605) | 1:A:43:GLU:H | 1:A:42:PRO:HD2 | 15 | 1.19 |
| (1,384) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:71:ASN:H | 10 | 1.19 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD21 | 4 | 1.19 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD22 | 4 | 1.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD23 | 4 | 1.19 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD21 | 9 | 1.19 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD22 | 9 | 1.19 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD23 | 9 | 1.19 |
| (2,944) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:47:PRO:HB2 | 8 | 1.18 |
| (2,944) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:47:PRO:HB2 | 16 | 1.18 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 4 | 1.18 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 4 | 1.18 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 4 | 1.18 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 16 | 1.18 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 16 | 1.18 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 16 | 1.18 |
| (2,493) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:23:GLN:H | 3 | 1.18 |
| (2,360) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:20:GLN:H | 15 | 1.18 |
| (2,360) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:20:GLN:H | 15 | 1.18 |
| (2,360) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:20:GLN:H | 15 | 1.18 |
| (2,285) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:21:GLN:HG2 | 3 | 1.18 |
| (2,285) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:21:GLN:HG2 | 11 | 1.18 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG21 | 15 | 1.18 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG22 | 15 | 1.18 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG23 | 15 | 1.18 |
| (2,1784) | 1:A:98:LEU:HD11 | 1:A:94:LEU:HA | 7 | 1.18 |
| (2,1784) | 1:A:98:LEU:HD12 | 1:A:94:LEU:HA | 7 | 1.18 |
| (2,1784) | 1:A:98:LEU:HD13 | 1:A:94:LEU:HA | 7 | 1.18 |
| (2,171) | 1:A:53:ASP:HB2 | 1:A:51:PHE:HA | 7 | 1.18 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD11 | 5 | 1.18 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD12 | 5 | 1.18 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD13 | 5 | 1.18 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD11 | 5 | 1.18 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD12 | 5 | 1.18 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD13 | 5 | 1.18 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD11 | 5 | 1.18 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD12 | 5 | 1.18 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD13 | 5 | 1.18 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD11 | 15 | 1.18 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD12 | 15 | 1.18 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD13 | 15 | 1.18 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD11 | 15 | 1.18 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD12 | 15 | 1.18 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD13 | 15 | 1.18 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD11 | 15 | 1.18 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD12 | 15 | 1.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD13 | 15 | 1.18 |
| (2,15) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:22:GLN:HA | 13 | 1.18 |
| (2,1498) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HB2 | 13 | 1.18 |
| (2,1478) | 1:A:75:ASP:HB2 | 1:A:74:LEU:HB2 | 11 | 1.18 |
| (2,1321) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HB2 | 15 | 1.18 |
| (1,605) | 1:A:43:GLU:H | 1:A:42:PRO:HD2 | 3 | 1.18 |
| (1,259) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:56:ILE:HG13 | 8 | 1.18 |
| (2,944) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:47:PRO:HB2 | 1 | 1.17 |
| (2,944) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:47:PRO:HB2 | 14 | 1.17 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:40:HIS:HD2 | 8 | 1.17 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:40:HIS:HD2 | 8 | 1.17 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:40:HIS:HD2 | 8 | 1.17 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG21 | 1 | 1.17 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG22 | 1 | 1.17 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG23 | 1 | 1.17 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG21 | 6 | 1.17 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG22 | 6 | 1.17 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG23 | 6 | 1.17 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:51:PHE:HE1 | 3 | 1.17 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:51:PHE:HE2 | 3 | 1.17 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:51:PHE:HE1 | 3 | 1.17 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:51:PHE:HE2 | 3 | 1.17 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:51:PHE:HE1 | 3 | 1.17 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:51:PHE:HE2 | 3 | 1.17 |
| (2,493) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:23:GLN:H | 4 | 1.17 |
| (2,360) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:20:GLN:H | 13 | 1.17 |
| (2,360) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:20:GLN:H | 13 | 1.17 |
| (2,360) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:20:GLN:H | 13 | 1.17 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG21 | 10 | 1.17 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG22 | 10 | 1.17 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG23 | 10 | 1.17 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD11 | 12 | 1.17 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD12 | 12 | 1.17 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD13 | 12 | 1.17 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:12:ARG:HB3 | 12 | 1.17 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:12:ARG:HB3 | 12 | 1.17 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:12:ARG:HB3 | 12 | 1.17 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG21 | 11 | 1.17 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG22 | 11 | 1.17 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG23 | 11 | 1.17 |
| (2,1768) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:96:THR:HB | 14 | 1.17 |
| (2,171) | 1:A:53:ASP:HB2 | 1:A:51:PHE:HA | 9 | 1.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1558) | 1:A:82:PHE:HA | 1:A:85:PRO:HB2 | 8 | 1.17 |
| (2,15) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:22:GLN:HA | 1 | 1.17 |
| (2,15) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:22:GLN:HA | 2 | 1.17 |
| (2,15) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:22:GLN:HA | 16 | 1.17 |
| (2,1498) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HB2 | 10 | 1.17 |
| (2,1327) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:68:LEU:H | 13 | 1.17 |
| (2,1321) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HB2 | 4 | 1.17 |
| (1,384) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:71:ASN:H | 4 | 1.17 |
| (1,259) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:56:ILE:HG13 | 16 | 1.17 |
| (2,944) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:47:PRO:HB2 | 2 | 1.16 |
| (2,944) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:47:PRO:HB2 | 11 | 1.16 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:51:PHE:HE1 | 14 | 1.16 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:51:PHE:HE2 | 14 | 1.16 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:51:PHE:HE1 | 14 | 1.16 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:51:PHE:HE2 | 14 | 1.16 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:51:PHE:HE1 | 14 | 1.16 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:51:PHE:HE2 | 14 | 1.16 |
| (2,285) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:21:GLN:HG2 | 7 | 1.16 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD11 | 10 | 1.16 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD12 | 10 | 1.16 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD13 | 10 | 1.16 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:12:ARG:HB3 | 8 | 1.16 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:12:ARG:HB3 | 8 | 1.16 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:12:ARG:HB3 | 8 | 1.16 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:12:ARG:HB3 | 10 | 1.16 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:12:ARG:HB3 | 10 | 1.16 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:12:ARG:HB3 | 10 | 1.16 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:12:ARG:HB3 | 13 | 1.16 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:12:ARG:HB3 | 13 | 1.16 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:12:ARG:HB3 | 13 | 1.16 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG21 | 3 | 1.16 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG22 | 3 | 1.16 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG23 | 3 | 1.16 |
| (2,218) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:13:LEU:HB2 | 16 | 1.16 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD11 | 8 | 1.16 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD12 | 8 | 1.16 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD13 | 8 | 1.16 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD11 | 8 | 1.16 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD12 | 8 | 1.16 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD13 | 8 | 1.16 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD11 | 8 | 1.16 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD12 | 8 | 1.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD13 | 8 | 1.16 |
| (2,15) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:22:GLN:HA | 10 | 1.16 |
| (2,1498) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HB2 | 16 | 1.16 |
| (2,1478) | 1:A:75:ASP:HB2 | 1:A:74:LEU:HB2 | 4 | 1.16 |
| (1,384) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:71:ASN:H | 3 | 1.16 |
| (1,259) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:56:ILE:HG13 | 5 | 1.16 |
| (1,259) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:56:ILE:HG13 | 7 | 1.16 |
| (1,259) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:56:ILE:HG13 | 14 | 1.16 |
| (1,234) | 1:A:102:HIS:H | 1:A:101:SER:HB2 | 16 | 1.16 |
| (1,146) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:53:ASP:HB3 | 14 | 1.16 |
| (2,944) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:47:PRO:HB2 | 3 | 1.15 |
| (2,944) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:47:PRO:HB2 | 7 | 1.15 |
| (2,82) | 1:A:3:ALA:HA | 1:A:4:SER:H | 10 | 1.15 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 3 | 1.15 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 3 | 1.15 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 3 | 1.15 |
| (2,360) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:20:GLN:H | 12 | 1.15 |
| (2,360) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:20:GLN:H | 12 | 1.15 |
| (2,360) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:20:GLN:H | 12 | 1.15 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD21 | 12 | 1.15 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD22 | 12 | 1.15 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD23 | 12 | 1.15 |
| (2,285) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:21:GLN:HG2 | 12 | 1.15 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG21 | 2 | 1.15 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG22 | 2 | 1.15 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG23 | 2 | 1.15 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG21 | 8 | 1.15 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG22 | 8 | 1.15 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG23 | 8 | 1.15 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG21 | 13 | 1.15 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG22 | 13 | 1.15 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG23 | 13 | 1.15 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD21 | 10 | 1.15 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD22 | 10 | 1.15 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD23 | 10 | 1.15 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD21 | 10 | 1.15 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD22 | 10 | 1.15 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD23 | 10 | 1.15 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD21 | 10 | 1.15 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD22 | 10 | 1.15 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD23 | 10 | 1.15 |
| (2,171) | 1:A:53:ASP:HB2 | 1:A:51:PHE:HA | 6 | 1.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:87:PRO:HA | 8 | 1.15 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:87:PRO:HA | 8 | 1.15 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:87:PRO:HA | 8 | 1.15 |
| (2,15) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:22:GLN:HA | 8 | 1.15 |
| (2,1269) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HG | 11 | 1.15 |
| (1,234) | 1:A:102:HIS:H | 1:A:101:SER:HB2 | 11 | 1.15 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD21 | 7 | 1.15 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD22 | 7 | 1.15 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD23 | 7 | 1.15 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD21 | 16 | 1.15 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD22 | 16 | 1.15 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD23 | 16 | 1.15 |
| (2,944) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:47:PRO:HB2 | 6 | 1.14 |
| (2,944) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:47:PRO:HB2 | 10 | 1.14 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG21 | 5 | 1.14 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG22 | 5 | 1.14 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG23 | 5 | 1.14 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HG | 2 | 1.14 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HG | 2 | 1.14 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HG | 2 | 1.14 |
| (2,469) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HA | 1 | 1.14 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD11 | 8 | 1.14 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD12 | 8 | 1.14 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD13 | 8 | 1.14 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD11 | 13 | 1.14 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD12 | 13 | 1.14 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD13 | 13 | 1.14 |
| (2,218) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:13:LEU:HB2 | 6 | 1.14 |
| (2,218) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:13:LEU:HB2 | 7 | 1.14 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD11 | 10 | 1.14 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD12 | 10 | 1.14 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD13 | 10 | 1.14 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD11 | 10 | 1.14 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD12 | 10 | 1.14 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD13 | 10 | 1.14 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD11 | 10 | 1.14 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD12 | 10 | 1.14 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD13 | 10 | 1.14 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD11 | 14 | 1.14 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD12 | 14 | 1.14 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD13 | 14 | 1.14 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD11 | 14 | 1.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD12 | 14 | 1.14 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD13 | 14 | 1.14 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD11 | 14 | 1.14 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD12 | 14 | 1.14 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD13 | 14 | 1.14 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:87:PRO:HA | 12 | 1.14 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:87:PRO:HA | 12 | 1.14 |
| (2,1622) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:87:PRO:HA | 12 | 1.14 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD21 | 14 | 1.14 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD22 | 14 | 1.14 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD23 | 14 | 1.14 |
| (2,1327) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:68:LEU:H | 15 | 1.14 |
| (2,1321) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HB2 | 5 | 1.14 |
| (2,1321) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HB2 | 6 | 1.14 |
| (1,384) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:71:ASN:H | 7 | 1.14 |
| (1,259) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:56:ILE:HG13 | 15 | 1.14 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD21 | 10 | 1.14 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD22 | 10 | 1.14 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD23 | 10 | 1.14 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:51:PHE:HE1 | 12 | 1.13 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:51:PHE:HE2 | 12 | 1.13 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:51:PHE:HE1 | 12 | 1.13 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:51:PHE:HE2 | 12 | 1.13 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:51:PHE:HE1 | 12 | 1.13 |
| (2,800) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:51:PHE:HE2 | 12 | 1.13 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:25:LEU:HA | 2 | 1.13 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:25:LEU:HA | 2 | 1.13 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:25:LEU:HA | 2 | 1.13 |
| (2,285) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:21:GLN:HG2 | 6 | 1.13 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD11 | 4 | 1.13 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD12 | 4 | 1.13 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD13 | 4 | 1.13 |
| (2,171) | 1:A:53:ASP:HB2 | 1:A:51:PHE:HA | 2 | 1.13 |
| (2,15) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:22:GLN:HA | 6 | 1.13 |
| (2,15) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:22:GLN:HA | 9 | 1.13 |
| (2,15) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:22:GLN:HA | 11 | 1.13 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD21 | 1 | 1.13 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD22 | 1 | 1.13 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD23 | 1 | 1.13 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD21 | 4 | 1.13 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD22 | 4 | 1.13 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD23 | 4 | 1.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1163) | 1:A:60:THR:HA | 1:A:64:LEU:HB3 | 11 | 1.13 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:3:ALA:HA | 13 | 1.13 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:3:ALA:HA | 13 | 1.13 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:3:ALA:HA | 13 | 1.13 |
| (1,605) | 1:A:43:GLU:H | 1:A:42:PRO:HD2 | 7 | 1.13 |
| (1,384) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:71:ASN:H | 5 | 1.13 |
| (1,259) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:56:ILE:HG13 | 12 | 1.13 |
| (1,259) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:56:ILE:HG13 | 13 | 1.13 |
| (1,234) | 1:A:102:HIS:H | 1:A:101:SER:HB2 | 13 | 1.13 |
| (2,900) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:43:GLU:HB3 | 7 | 1.12 |
| (2,900) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:43:GLU:HB3 | 7 | 1.12 |
| (2,900) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:43:GLU:HB3 | 7 | 1.12 |
| (2,900) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:43:GLU:HB3 | 15 | 1.12 |
| (2,900) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:43:GLU:HB3 | 15 | 1.12 |
| (2,900) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:43:GLU:HB3 | 15 | 1.12 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 11 | 1.12 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 11 | 1.12 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 11 | 1.12 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:25:LEU:HA | 1 | 1.12 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:25:LEU:HA | 1 | 1.12 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:25:LEU:HA | 1 | 1.12 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:25:LEU:HA | 14 | 1.12 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:25:LEU:HA | 14 | 1.12 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:25:LEU:HA | 14 | 1.12 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HG | 9 | 1.12 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HG | 9 | 1.12 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HG | 9 | 1.12 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HG | 10 | 1.12 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HG | 10 | 1.12 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HG | 10 | 1.12 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD11 | 16 | 1.12 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD12 | 16 | 1.12 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD13 | 16 | 1.12 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG21 | 10 | 1.12 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG22 | 10 | 1.12 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG23 | 10 | 1.12 |
| (2,218) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:13:LEU:HB2 | 3 | 1.12 |
| (2,218) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:13:LEU:HB2 | 4 | 1.12 |
| (2,218) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:13:LEU:HB2 | 11 | 1.12 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD21 | 11 | 1.12 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD22 | 11 | 1.12 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD23 | 11 | 1.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD21 | 11 | 1.12 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD22 | 11 | 1.12 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD23 | 11 | 1.12 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD21 | 11 | 1.12 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD22 | 11 | 1.12 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD23 | 11 | 1.12 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD21 | 15 | 1.12 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD22 | 15 | 1.12 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD23 | 15 | 1.12 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD21 | 15 | 1.12 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD22 | 15 | 1.12 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD23 | 15 | 1.12 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD21 | 15 | 1.12 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD22 | 15 | 1.12 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD23 | 15 | 1.12 |
| (2,1784) | 1:A:98:LEU:HD11 | 1:A:94:LEU:HA | 1 | 1.12 |
| (2,1784) | 1:A:98:LEU:HD12 | 1:A:94:LEU:HA | 1 | 1.12 |
| (2,1784) | 1:A:98:LEU:HD13 | 1:A:94:LEU:HA | 1 | 1.12 |
| (2,171) | 1:A:53:ASP:HB2 | 1:A:51:PHE:HA | 14 | 1.12 |
| (2,171) | 1:A:53:ASP:HB2 | 1:A:51:PHE:HA | 15 | 1.12 |
| (2,171) | 1:A:53:ASP:HB2 | 1:A:51:PHE:HA | 16 | 1.12 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD11 | 1 | 1.12 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD12 | 1 | 1.12 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD13 | 1 | 1.12 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD11 | 1 | 1.12 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD12 | 1 | 1.12 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD13 | 1 | 1.12 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD11 | 1 | 1.12 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD12 | 1 | 1.12 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD13 | 1 | 1.12 |
| (2,15) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:22:GLN:HA | 4 | 1.12 |
| (2,1486) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:H | 9 | 1.12 |
| (2,1327) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:68:LEU:H | 1 | 1.12 |
| (1,92) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:71:ASN:HA | 12 | 1.12 |
| (1,551) | 1:A:12:ARG:H | 1:A:12:ARG:HD3 | 1 | 1.12 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:33:THR:H | 1 | 1.11 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:33:THR:H | 1 | 1.11 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:33:THR:H | 1 | 1.11 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HG | 1 | 1.11 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HG | 1 | 1.11 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HG | 1 | 1.11 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HG | 8 | 1.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HG | 8 | 1.11 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HG | 8 | 1.11 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HG | 14 | 1.11 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HG | 14 | 1.11 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HG | 14 | 1.11 |
| (2,493) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:23:GLN:H | 7 | 1.11 |
| (2,444) | 1:A:21:GLN:HG3 | 1:A:21:GLN:H | 14 | 1.11 |
| (2,381) | 1:A:18:PRO:HB2 | 1:A:19:GLN:H | 11 | 1.11 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD11 | 2 | 1.11 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD12 | 2 | 1.11 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD13 | 2 | 1.11 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD11 | 9 | 1.11 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD12 | 9 | 1.11 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD13 | 9 | 1.11 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD11 | 11 | 1.11 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD12 | 11 | 1.11 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD13 | 11 | 1.11 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:12:ARG:HB3 | 11 | 1.11 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:12:ARG:HB3 | 11 | 1.11 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:12:ARG:HB3 | 11 | 1.11 |
| (2,218) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:13:LEU:HB2 | 10 | 1.11 |
| (2,218) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:13:LEU:HB2 | 13 | 1.11 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:H | 11 | 1.11 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:H | 11 | 1.11 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 11 | 1.11 |
| (2,1834) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HD11 | 8 | 1.11 |
| (2,1834) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HD12 | 8 | 1.11 |
| (2,1834) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HD13 | 8 | 1.11 |
| (2,1834) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HD11 | 8 | 1.11 |
| (2,1834) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HD12 | 8 | 1.11 |
| (2,1834) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HD13 | 8 | 1.11 |
| (2,1834) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HD11 | 8 | 1.11 |
| (2,1834) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HD12 | 8 | 1.11 |
| (2,1834) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HD13 | 8 | 1.11 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD11 | 1:A:95:HIS:HB2 | 6 | 1.11 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD12 | 1:A:95:HIS:HB2 | 6 | 1.11 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD13 | 1:A:95:HIS:HB2 | 6 | 1.11 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD11 | 1:A:95:HIS:HB2 | 16 | 1.11 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD12 | 1:A:95:HIS:HB2 | 16 | 1.11 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD13 | 1:A:95:HIS:HB2 | 16 | 1.11 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD11 | 13 | 1.11 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD12 | 13 | 1.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD13 | 13 | 1.11 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD11 | 13 | 1.11 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD12 | 13 | 1.11 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD13 | 13 | 1.11 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD11 | 13 | 1.11 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD12 | 13 | 1.11 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD13 | 13 | 1.11 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD11 | 16 | 1.11 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD12 | 16 | 1.11 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD13 | 16 | 1.11 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD11 | 16 | 1.11 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD12 | 16 | 1.11 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD13 | 16 | 1.11 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD11 | 16 | 1.11 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD12 | 16 | 1.11 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD13 | 16 | 1.11 |
| (2,15) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:22:GLN:HA | 15 | 1.11 |
| (2,1478) | 1:A:75:ASP:HB2 | 1:A:74:LEU:HB2 | 15 | 1.11 |
| (2,1327) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:68:LEU:H | 2 | 1.11 |
| (2,1327) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:68:LEU:H | 4 | 1.11 |
| (2,1327) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:68:LEU:H | 6 | 1.11 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD11 | 3 | 1.11 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD12 | 3 | 1.11 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD13 | 3 | 1.11 |
| (2,1321) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HB2 | 1 | 1.11 |
| (1,259) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:56:ILE:HG13 | 6 | 1.11 |
| (1,259) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:56:ILE:HG13 | 11 | 1.11 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD21 | 13 | 1.11 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD22 | 13 | 1.11 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD23 | 13 | 1.11 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD21 | 14 | 1.11 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD22 | 14 | 1.11 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD23 | 14 | 1.11 |
| (2,913) | 1:A:43:GLU:HG2 | 1:A:42:PRO:HA | 4 | 1.1 |
| (2,900) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:43:GLU:HB3 | 8 | 1.1 |
| (2,900) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:43:GLU:HB3 | 8 | 1.1 |
| (2,900) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:43:GLU:HB3 | 8 | 1.1 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG21 | 10 | 1.1 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG22 | 10 | 1.1 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG23 | 10 | 1.1 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG21 | 15 | 1.1 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG22 | 15 | 1.1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG23 | 15 | 1.1 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:25:LEU:HA | 9 | 1.1 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:25:LEU:HA | 9 | 1.1 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:25:LEU:HA | 9 | 1.1 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:25:LEU:HA | 10 | 1.1 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:25:LEU:HA | 10 | 1.1 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:25:LEU:HA | 10 | 1.1 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HG | 6 | 1.1 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HG | 6 | 1.1 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HG | 6 | 1.1 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HG | 7 | 1.1 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HG | 7 | 1.1 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HG | 7 | 1.1 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HG | 12 | 1.1 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HG | 12 | 1.1 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HG | 12 | 1.1 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HG | 15 | 1.1 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HG | 15 | 1.1 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HG | 15 | 1.1 |
| (2,285) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:21:GLN:HG2 | 16 | 1.1 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD11 | 7 | 1.1 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD12 | 7 | 1.1 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD13 | 7 | 1.1 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:H | 3 | 1.1 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:H | 3 | 1.1 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 3 | 1.1 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:H | 12 | 1.1 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:H | 12 | 1.1 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 12 | 1.1 |
| (2,171) | 1:A:53:ASP:HB2 | 1:A:51:PHE:HA | 12 | 1.1 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD11 | 2 | 1.1 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD12 | 2 | 1.1 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD13 | 2 | 1.1 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD11 | 2 | 1.1 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD12 | 2 | 1.1 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD13 | 2 | 1.1 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD11 | 2 | 1.1 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD12 | 2 | 1.1 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD13 | 2 | 1.1 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD11 | 7 | 1.1 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD12 | 7 | 1.1 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD13 | 7 | 1.1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD11 | 7 | 1.1 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD12 | 7 | 1.1 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD13 | 7 | 1.1 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD11 | 7 | 1.1 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD12 | 7 | 1.1 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD13 | 7 | 1.1 |
| (2,1624) | 1:A:87:PRO:HB2 | 1:A:26:ALA:HA | 9 | 1.1 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD21 | 6 | 1.1 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD22 | 6 | 1.1 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD23 | 6 | 1.1 |
| (2,1327) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:68:LEU:H | 5 | 1.1 |
| (2,1156) | 1:A:60:THR:HB | 1:A:59:LEU:HB3 | 11 | 1.1 |
| (1,605) | 1:A:43:GLU:H | 1:A:42:PRO:HD2 | 2 | 1.1 |
| (1,551) | 1:A:12:ARG:H | 1:A:12:ARG:HD3 | 8 | 1.1 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB1 | 1:A:49:THR:HB | 9 | 1.09 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB2 | 1:A:49:THR:HB | 9 | 1.09 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB3 | 1:A:49:THR:HB | 9 | 1.09 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG21 | 4 | 1.09 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG22 | 4 | 1.09 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG23 | 4 | 1.09 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:33:THR:H | 5 | 1.09 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:33:THR:H | 5 | 1.09 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:33:THR:H | 5 | 1.09 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:33:THR:H | 9 | 1.09 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:33:THR:H | 9 | 1.09 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:33:THR:H | 9 | 1.09 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 1 | 1.09 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 1 | 1.09 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 1 | 1.09 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 2 | 1.09 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 2 | 1.09 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 2 | 1.09 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 14 | 1.09 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 14 | 1.09 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 14 | 1.09 |
| (2,620) | 1:A:28:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HB | 6 | 1.09 |
| (2,620) | 1:A:28:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HB | 11 | 1.09 |
| (2,620) | 1:A:28:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HB | 13 | 1.09 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:25:LEU:HA | 5 | 1.09 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:25:LEU:HA | 5 | 1.09 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:25:LEU:HA | 5 | 1.09 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:25:LEU:HA | 6 | 1.09 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:25:LEU:HA | 6 | 1.09 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:25:LEU:HA | 6 | 1.09 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HG | 4 | 1.09 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HG | 4 | 1.09 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HG | 4 | 1.09 |
| (2,285) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:21:GLN:HG2 | 10 | 1.09 |
| (2,280) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:H | 14 | 1.09 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 12 | 1.09 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 12 | 1.09 |
| (2,278) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 12 | 1.09 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD11 | 14 | 1.09 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD12 | 14 | 1.09 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD13 | 14 | 1.09 |
| (2,218) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:13:LEU:HB2 | 12 | 1.09 |
| (2,218) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:13:LEU:HB2 | 15 | 1.09 |
| (2,216) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:12:ARG:HB2 | 7 | 1.09 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:H | 1 | 1.09 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:H | 1 | 1.09 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 1 | 1.09 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD21 | 9 | 1.09 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD22 | 9 | 1.09 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD23 | 9 | 1.09 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD21 | 9 | 1.09 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD22 | 9 | 1.09 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD23 | 9 | 1.09 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD21 | 9 | 1.09 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD22 | 9 | 1.09 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD23 | 9 | 1.09 |
| (2,1799) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:100:GLN:H | 6 | 1.09 |
| (2,1799) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:100:GLN:H | 6 | 1.09 |
| (2,1799) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:100:GLN:H | 6 | 1.09 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD21 | 6 | 1.09 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD22 | 6 | 1.09 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD23 | 6 | 1.09 |
| (2,171) | 1:A:53:ASP:HB2 | 1:A:51:PHE:HA | 5 | 1.09 |
| (2,171) | 1:A:53:ASP:HB2 | 1:A:51:PHE:HA | 10 | 1.09 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD11 | 4 | 1.09 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD12 | 4 | 1.09 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD13 | 4 | 1.09 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD11 | 4 | 1.09 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD12 | 4 | 1.09 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD13 | 4 | 1.09 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD11 | 4 | 1.09 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD12 | 4 | 1.09 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD13 | 4 | 1.09 |
| (2,1624) | 1:A:87:PRO:HB2 | 1:A:26:ALA:HA | 7 | 1.09 |
| (2,15) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:22:GLN:HA | 5 | 1.09 |
| (2,1498) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HB2 | 11 | 1.09 |
| (2,1498) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HB2 | 12 | 1.09 |
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:39:HIS:HB2 | 7 | 1.09 |
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:39:HIS:HB2 | 7 | 1.09 |
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:39:HIS:HB2 | 7 | 1.09 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD21 | 10 | 1.09 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD22 | 10 | 1.09 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD23 | 10 | 1.09 |
| (2,1327) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:68:LEU:H | 16 | 1.09 |
| (2,1321) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HB2 | 14 | 1.09 |
| (2,1134) | 1:A:58:SER:HB3 | 1:A:59:LEU:H | 12 | 1.09 |
| (1,91) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:71:ASN:HB2 | 5 | 1.09 |
| (1,392) | 1:A:38:GLY:H | 1:A:37:LEU:HB2 | 16 | 1.09 |
| (1,326) | 1:A:61:ALA:H | 1:A:64:LEU:HB3 | 6 | 1.09 |
| (1,326) | 1:A:61:ALA:H | 1:A:64:LEU:HB3 | 13 | 1.09 |
| (1,234) | 1:A:102:HIS:H | 1:A:101:SER:HB2 | 7 | 1.09 |
| (2,892) | 1:A:43:GLU:HG2 | 1:A:41:THR:HB | 5 | 1.08 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG21 | 16 | 1.08 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG22 | 16 | 1.08 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG23 | 16 | 1.08 |
| (2,620) | 1:A:28:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HB | 3 | 1.08 |
| (2,620) | 1:A:28:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HB | 7 | 1.08 |
| (2,620) | 1:A:28:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HB | 10 | 1.08 |
| (2,620) | 1:A:28:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HB | 12 | 1.08 |
| (2,620) | 1:A:28:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HB | 16 | 1.08 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:25:LEU:HA | 4 | 1.08 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:25:LEU:HA | 4 | 1.08 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:25:LEU:HA | 4 | 1.08 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:25:LEU:HA | 7 | 1.08 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:25:LEU:HA | 7 | 1.08 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:25:LEU:HA | 7 | 1.08 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:25:LEU:HA | 8 | 1.08 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:25:LEU:HA | 8 | 1.08 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:25:LEU:HA | 8 | 1.08 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HG | 3 | 1.08 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HG | 3 | 1.08 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HG | 3 | 1.08 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,469) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HA | 5 | 1.08 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG21 | 7 | 1.08 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG22 | 7 | 1.08 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG23 | 7 | 1.08 |
| (2,280) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:H | 5 | 1.08 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG21 | 4 | 1.08 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG22 | 4 | 1.08 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG23 | 4 | 1.08 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG21 | 7 | 1.08 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG22 | 7 | 1.08 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG23 | 7 | 1.08 |
| (2,218) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:13:LEU:HB2 | 5 | 1.08 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:H | 7 | 1.08 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:H | 7 | 1.08 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 7 | 1.08 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:H | 8 | 1.08 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:H | 8 | 1.08 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 8 | 1.08 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:H | 13 | 1.08 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:H | 13 | 1.08 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 13 | 1.08 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:H | 15 | 1.08 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:H | 15 | 1.08 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 15 | 1.08 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:H | 16 | 1.08 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:H | 16 | 1.08 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 16 | 1.08 |
| (2,171) | 1:A:53:ASP:HB2 | 1:A:51:PHE:HA | 4 | 1.08 |
| (2,1558) | 1:A:82:PHE:HA | 1:A:85:PRO:HB2 | 11 | 1.08 |
| (2,1478) | 1:A:75:ASP:HB2 | 1:A:74:LEU:HB2 | 1 | 1.08 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD21 | 2 | 1.08 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD22 | 2 | 1.08 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD23 | 2 | 1.08 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD21 | 10 | 1.08 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD22 | 10 | 1.08 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD23 | 10 | 1.08 |
| (1,91) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:71:ASN:HB2 | 1 | 1.08 |
| (1,91) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:71:ASN:HB2 | 3 | 1.08 |
| (1,91) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:71:ASN:HB2 | 4 | 1.08 |
| (1,91) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:71:ASN:HB2 | 9 | 1.08 |
| (1,91) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:71:ASN:HB2 | 14 | 1.08 |
| (1,551) | 1:A:12:ARG:H | 1:A:12:ARG:HD3 | 11 | 1.08 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,326) | 1:A:61:ALA:H | 1:A:64:LEU:HB3 | 12 | 1.08 |
| (2,900) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:43:GLU:HB3 | 2 | 1.07 |
| (2,900) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:43:GLU:HB3 | 2 | 1.07 |
| (2,900) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:43:GLU:HB3 | 2 | 1.07 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG21 | 11 | 1.07 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG22 | 11 | 1.07 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG23 | 11 | 1.07 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:33:THR:H | 4 | 1.07 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:33:THR:H | 4 | 1.07 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:33:THR:H | 4 | 1.07 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:33:THR:H | 6 | 1.07 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:33:THR:H | 6 | 1.07 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:33:THR:H | 6 | 1.07 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 5 | 1.07 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 5 | 1.07 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 5 | 1.07 |
| (2,620) | 1:A:28:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HB | 1 | 1.07 |
| (2,620) | 1:A:28:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HB | 5 | 1.07 |
| (2,620) | 1:A:28:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HB | 9 | 1.07 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:25:LEU:HA | 11 | 1.07 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:25:LEU:HA | 11 | 1.07 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:25:LEU:HA | 11 | 1.07 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HG | 5 | 1.07 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HG | 5 | 1.07 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HG | 5 | 1.07 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HG | 13 | 1.07 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HG | 13 | 1.07 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HG | 13 | 1.07 |
| (2,469) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HA | 8 | 1.07 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD11 | 1 | 1.07 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD12 | 1 | 1.07 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD13 | 1 | 1.07 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD11 | 5 | 1.07 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD12 | 5 | 1.07 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD13 | 5 | 1.07 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD11 | 6 | 1.07 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD12 | 6 | 1.07 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD13 | 6 | 1.07 |
| (2,218) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:13:LEU:HB2 | 1 | 1.07 |
| (2,218) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:13:LEU:HB2 | 8 | 1.07 |
| (2,218) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:13:LEU:HB2 | 14 | 1.07 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:H | 4 | 1.07 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:H | 4 | 1.07 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 4 | 1.07 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD11 | 4 | 1.07 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD12 | 4 | 1.07 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD13 | 4 | 1.07 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD11 | 4 | 1.07 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD12 | 4 | 1.07 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD13 | 4 | 1.07 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD11 | 4 | 1.07 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD12 | 4 | 1.07 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD13 | 4 | 1.07 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:74:LEU:HB3 | 14 | 1.07 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:74:LEU:HB3 | 14 | 1.07 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:74:LEU:HB3 | 14 | 1.07 |
| (2,1478) | 1:A:75:ASP:HB2 | 1:A:74:LEU:HB2 | 6 | 1.07 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD21 | 16 | 1.07 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD22 | 16 | 1.07 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD23 | 16 | 1.07 |
| (2,1327) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:68:LEU:H | 14 | 1.07 |
| (2,1156) | 1:A:60:THR:HB | 1:A:59:LEU:HB3 | 5 | 1.07 |
| (2,1044) | 1:A:52:LYS:HB2 | 1:A:52:LYS:HE2 | 14 | 1.07 |
| (1,92) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:71:ASN:HA | 11 | 1.07 |
| (1,91) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:71:ASN:HB2 | 2 | 1.07 |
| (1,91) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:71:ASN:HB2 | 8 | 1.07 |
| (1,91) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:71:ASN:HB2 | 10 | 1.07 |
| (1,91) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:71:ASN:HB2 | 15 | 1.07 |
| (1,551) | 1:A:12:ARG:H | 1:A:12:ARG:HD3 | 9 | 1.07 |
| (1,551) | 1:A:12:ARG:H | 1:A:12:ARG:HD3 | 13 | 1.07 |
| (1,259) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:56:ILE:HG13 | 2 | 1.07 |
| (1,259) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:56:ILE:HG13 | 10 | 1.07 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD21 | 12 | 1.07 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD22 | 12 | 1.07 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD23 | 12 | 1.07 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:33:THR:H | 3 | 1.06 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:33:THR:H | 3 | 1.06 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:33:THR:H | 3 | 1.06 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:33:THR:H | 7 | 1.06 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:33:THR:H | 7 | 1.06 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:33:THR:H | 7 | 1.06 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:33:THR:H | 8 | 1.06 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:33:THR:H | 8 | 1.06 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:33:THR:H | 8 | 1.06 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:33:THR:H | 15 | 1.06 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:33:THR:H | 15 | 1.06 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:33:THR:H | 15 | 1.06 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:33:THR:H | 16 | 1.06 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:33:THR:H | 16 | 1.06 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:33:THR:H | 16 | 1.06 |
| (2,682) | 1:A:62:LEU:HD11 | 1:A:78:PRO:HB2 | 11 | 1.06 |
| (2,682) | 1:A:62:LEU:HD12 | 1:A:78:PRO:HB2 | 11 | 1.06 |
| (2,682) | 1:A:62:LEU:HD13 | 1:A:78:PRO:HB2 | 11 | 1.06 |
| (2,620) | 1:A:28:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HB | 8 | 1.06 |
| (2,620) | 1:A:28:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HB | 14 | 1.06 |
| (2,620) | 1:A:28:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HB | 15 | 1.06 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:25:LEU:HA | 12 | 1.06 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:25:LEU:HA | 12 | 1.06 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:25:LEU:HA | 12 | 1.06 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:25:LEU:HA | 15 | 1.06 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:25:LEU:HA | 15 | 1.06 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:25:LEU:HA | 15 | 1.06 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HG | 16 | 1.06 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HG | 16 | 1.06 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HG | 16 | 1.06 |
| (2,444) | 1:A:21:GLN:HG3 | 1:A:21:GLN:H | 16 | 1.06 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD11 | 15 | 1.06 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD12 | 15 | 1.06 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD13 | 15 | 1.06 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:12:ARG:HB3 | 16 | 1.06 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:12:ARG:HB3 | 16 | 1.06 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:12:ARG:HB3 | 16 | 1.06 |
| (2,218) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:13:LEU:HB2 | 2 | 1.06 |
| (2,218) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:13:LEU:HB2 | 9 | 1.06 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD21 | 16 | 1.06 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD22 | 16 | 1.06 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD23 | 16 | 1.06 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD21 | 16 | 1.06 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD22 | 16 | 1.06 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD23 | 16 | 1.06 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD21 | 16 | 1.06 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD22 | 16 | 1.06 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD23 | 16 | 1.06 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD11 | 7 | 1.06 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD12 | 7 | 1.06 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD13 | 7 | 1.06 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD11 | 7 | 1.06 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD12 | 7 | 1.06 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD13 | 7 | 1.06 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD11 | 7 | 1.06 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD12 | 7 | 1.06 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD13 | 7 | 1.06 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD11 | 10 | 1.06 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD12 | 10 | 1.06 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD13 | 10 | 1.06 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD11 | 10 | 1.06 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD12 | 10 | 1.06 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD13 | 10 | 1.06 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD11 | 10 | 1.06 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD12 | 10 | 1.06 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD13 | 10 | 1.06 |
| (2,1498) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HB2 | 2 | 1.06 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD21 | 7 | 1.06 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD22 | 7 | 1.06 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD23 | 7 | 1.06 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD21 | 1 | 1.06 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD22 | 1 | 1.06 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD23 | 1 | 1.06 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD21 | 4 | 1.06 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD22 | 4 | 1.06 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD23 | 4 | 1.06 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD21 | 5 | 1.06 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD22 | 5 | 1.06 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD23 | 5 | 1.06 |
| (2,1321) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HB2 | 9 | 1.06 |
| (2,117) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:4:SER:HA | 2 | 1.06 |
| (1,91) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:71:ASN:HB2 | 6 | 1.06 |
| (1,91) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:71:ASN:HB2 | 7 | 1.06 |
| (1,91) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:71:ASN:HB2 | 16 | 1.06 |
| (1,326) | 1:A:61:ALA:H | 1:A:64:LEU:HB3 | 5 | 1.06 |
| (1,259) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:56:ILE:HG13 | 3 | 1.06 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:70:HIS:H | 5 | 1.05 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:70:HIS:H | 5 | 1.05 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:70:HIS:H | 5 | 1.05 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB1 | 1:A:49:THR:HB | 1 | 1.05 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB2 | 1:A:49:THR:HB | 1 | 1.05 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB3 | 1:A:49:THR:HB | 1 | 1.05 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG21 | 2 | 1.05 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG22 | 2 | 1.05 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG23 | 2 | 1.05 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:33:THR:H | 2 | 1.05 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:33:THR:H | 2 | 1.05 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:33:THR:H | 2 | 1.05 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:33:THR:H | 11 | 1.05 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:33:THR:H | 11 | 1.05 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:33:THR:H | 11 | 1.05 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:33:THR:H | 14 | 1.05 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:33:THR:H | 14 | 1.05 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:33:THR:H | 14 | 1.05 |
| (2,620) | 1:A:28:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HB | 2 | 1.05 |
| (2,620) | 1:A:28:LEU:HB2 | 1:A:29:VAL:HB | 4 | 1.05 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:25:LEU:HA | 3 | 1.05 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:25:LEU:HA | 3 | 1.05 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:25:LEU:HA | 3 | 1.05 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HG | 11 | 1.05 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HG | 11 | 1.05 |
| (2,539) | 1:A:24:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HG | 11 | 1.05 |
| (2,444) | 1:A:21:GLN:HG3 | 1:A:21:GLN:H | 12 | 1.05 |
| (2,444) | 1:A:21:GLN:HG3 | 1:A:21:GLN:H | 15 | 1.05 |
| (2,285) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:21:GLN:HG2 | 15 | 1.05 |
| (2,280) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:H | 2 | 1.05 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD11 | 3 | 1.05 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD12 | 3 | 1.05 |
| (2,266) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:9:LEU:HD13 | 3 | 1.05 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:12:ARG:HB3 | 4 | 1.05 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:12:ARG:HB3 | 4 | 1.05 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:12:ARG:HB3 | 4 | 1.05 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:12:ARG:HB3 | 14 | 1.05 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:12:ARG:HB3 | 14 | 1.05 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:12:ARG:HB3 | 14 | 1.05 |
| (2,216) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:12:ARG:HB2 | 1 | 1.05 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:H | 5 | 1.05 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:H | 5 | 1.05 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 5 | 1.05 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:H | 6 | 1.05 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:H | 6 | 1.05 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 6 | 1.05 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:H | 10 | 1.05 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:H | 10 | 1.05 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 10 | 1.05 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:92:GLN:H | 16 | 1.05 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:92:GLN:H | 16 | 1.05 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:92:GLN:H | 16 | 1.05 |
| (2,1768) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:96:THR:HB | 13 | 1.05 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD11 | 11 | 1.05 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD12 | 11 | 1.05 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD13 | 11 | 1.05 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD11 | 11 | 1.05 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD12 | 11 | 1.05 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD13 | 11 | 1.05 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD11 | 11 | 1.05 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD12 | 11 | 1.05 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD13 | 11 | 1.05 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:74:LEU:HB3 | 9 | 1.05 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:74:LEU:HB3 | 9 | 1.05 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:74:LEU:HB3 | 9 | 1.05 |
| (2,1498) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HB2 | 4 | 1.05 |
| (2,1327) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:68:LEU:H | 8 | 1.05 |
| (2,1321) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HB2 | 2 | 1.05 |
| (2,1156) | 1:A:60:THR:HB | 1:A:59:LEU:HB3 | 15 | 1.05 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:56:ILE:H | 10 | 1.05 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:56:ILE:H | 10 | 1.05 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:56:ILE:H | 10 | 1.05 |
| (1,326) | 1:A:61:ALA:H | 1:A:64:LEU:HB3 | 4 | 1.05 |
| (1,326) | 1:A:61:ALA:H | 1:A:64:LEU:HB3 | 14 | 1.05 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:70:HIS:H | 2 | 1.04 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:70:HIS:H | 2 | 1.04 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:70:HIS:H | 2 | 1.04 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:70:HIS:H | 4 | 1.04 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:70:HIS:H | 4 | 1.04 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:70:HIS:H | 4 | 1.04 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:70:HIS:H | 6 | 1.04 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:70:HIS:H | 6 | 1.04 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:70:HIS:H | 6 | 1.04 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:70:HIS:H | 12 | 1.04 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:70:HIS:H | 12 | 1.04 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:70:HIS:H | 12 | 1.04 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB1 | 1:A:49:THR:HB | 6 | 1.04 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB2 | 1:A:49:THR:HB | 6 | 1.04 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB3 | 1:A:49:THR:HB | 6 | 1.04 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB1 | 1:A:49:THR:HB | 15 | 1.04 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB2 | 1:A:49:THR:HB | 15 | 1.04 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB3 | 1:A:49:THR:HB | 15 | 1.04 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG21 | 13 | 1.04 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG22 | 13 | 1.04 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG23 | 13 | 1.04 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:33:THR:H | 10 | 1.04 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:33:THR:H | 10 | 1.04 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:33:THR:H | 10 | 1.04 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:25:LEU:HA | 13 | 1.04 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:25:LEU:HA | 13 | 1.04 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:25:LEU:HA | 13 | 1.04 |
| (2,493) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:23:GLN:H | 8 | 1.04 |
| (2,444) | 1:A:21:GLN:HG3 | 1:A:21:GLN:H | 4 | 1.04 |
| (2,285) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:21:GLN:HG2 | 4 | 1.04 |
| (2,280) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:H | 3 | 1.04 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG21 | 6 | 1.04 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG22 | 6 | 1.04 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG23 | 6 | 1.04 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:H | 9 | 1.04 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:H | 9 | 1.04 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 9 | 1.04 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:H | 14 | 1.04 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:H | 14 | 1.04 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 14 | 1.04 |
| (2,1768) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:96:THR:HB | 10 | 1.04 |
| (2,1718) | 1:A:100:GLN:HG2 | 1:A:99:THR:HB | 6 | 1.04 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD11 | 5 | 1.04 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD12 | 5 | 1.04 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD13 | 5 | 1.04 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD11 | 5 | 1.04 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD12 | 5 | 1.04 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD13 | 5 | 1.04 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD11 | 5 | 1.04 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD12 | 5 | 1.04 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD13 | 5 | 1.04 |
| (2,1498) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HB2 | 6 | 1.04 |
| (2,1193) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:65:ARG:HB2 | 11 | 1.04 |
| (2,1156) | 1:A:60:THR:HB | 1:A:59:LEU:HB3 | 2 | 1.04 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:56:ILE:H | 7 | 1.04 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:56:ILE:H | 7 | 1.04 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:56:ILE:H | 7 | 1.04 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:56:ILE:H | 13 | 1.04 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:56:ILE:H | 13 | 1.04 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:56:ILE:H | 13 | 1.04 |
| (2,1011) | 1:A:75:ASP:HA | 1:A:74:LEU:HG | 3 | 1.04 |
| (2,1011) | 1:A:75:ASP:HA | 1:A:74:LEU:HG | 5 | 1.04 |
| (1,92) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:71:ASN:HA | 13 | 1.04 |
| (1,551) | 1:A:12:ARG:H | 1:A:12:ARG:HD3 | 10 | 1.04 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:70:HIS:H | 11 | 1.03 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:70:HIS:H | 11 | 1.03 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:70:HIS:H | 11 | 1.03 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:33:THR:H | 12 | 1.03 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:33:THR:H | 12 | 1.03 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:33:THR:H | 12 | 1.03 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:25:LEU:HA | 16 | 1.03 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:25:LEU:HA | 16 | 1.03 |
| (2,562) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:25:LEU:HA | 16 | 1.03 |
| (2,493) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:23:GLN:H | 15 | 1.03 |
| (2,469) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HA | 7 | 1.03 |
| (2,444) | 1:A:21:GLN:HG3 | 1:A:21:GLN:H | 2 | 1.03 |
| (2,280) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:H | 6 | 1.03 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG21 | 16 | 1.03 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG22 | 16 | 1.03 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG23 | 16 | 1.03 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:H | 2 | 1.03 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:H | 2 | 1.03 |
| (2,1897) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 2 | 1.03 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD21 | 12 | 1.03 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD22 | 12 | 1.03 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD23 | 12 | 1.03 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD21 | 12 | 1.03 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD22 | 12 | 1.03 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD23 | 12 | 1.03 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD21 | 12 | 1.03 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD22 | 12 | 1.03 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD23 | 12 | 1.03 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD21 | 13 | 1.03 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD22 | 13 | 1.03 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD23 | 13 | 1.03 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD21 | 13 | 1.03 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD22 | 13 | 1.03 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD23 | 13 | 1.03 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD21 | 13 | 1.03 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD22 | 13 | 1.03 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD23 | 13 | 1.03 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1809) | 1:A:101:SER:HB2 | 1:A:100:GLN:H | 11 | 1.03 |
| (2,171) | 1:A:53:ASP:HB2 | 1:A:51:PHE:HA | 8 | 1.03 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD11 | 3 | 1.03 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD12 | 3 | 1.03 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD13 | 3 | 1.03 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD11 | 3 | 1.03 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD12 | 3 | 1.03 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD13 | 3 | 1.03 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD11 | 3 | 1.03 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD12 | 3 | 1.03 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD13 | 3 | 1.03 |
| (2,1538) | 1:A:98:LEU:HB3 | 1:A:99:THR:H | 9 | 1.03 |
| (2,15) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:22:GLN:HA | 3 | 1.03 |
| (2,15) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:22:GLN:HA | 12 | 1.03 |
| (2,1478) | 1:A:75:ASP:HB2 | 1:A:74:LEU:HB2 | 14 | 1.03 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD21 | 13 | 1.03 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD22 | 13 | 1.03 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD23 | 13 | 1.03 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD21 | 6 | 1.03 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD22 | 6 | 1.03 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD23 | 6 | 1.03 |
| (2,1268) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HB2 | 11 | 1.03 |
| (2,117) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:4:SER:HA | 11 | 1.03 |
| (2,1156) | 1:A:60:THR:HB | 1:A:59:LEU:HB3 | 13 | 1.03 |
| (2,1156) | 1:A:60:THR:HB | 1:A:59:LEU:HB3 | 14 | 1.03 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HB3 | 7 | 1.03 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HB3 | 7 | 1.03 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HB3 | 7 | 1.03 |
| (2,1055) | 1:A:52:LYS:HG3 | 1:A:52:LYS:H | 2 | 1.03 |
| (2,1055) | 1:A:52:LYS:HG3 | 1:A:52:LYS:H | 16 | 1.03 |
| (2,1020) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HB2 | 8 | 1.03 |
| (1,326) | 1:A:61:ALA:H | 1:A:64:LEU:HB3 | 10 | 1.03 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:70:HIS:H | 8 | 1.02 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:70:HIS:H | 8 | 1.02 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:70:HIS:H | 8 | 1.02 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB1 | 1:A:49:THR:HB | 3 | 1.02 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB2 | 1:A:49:THR:HB | 3 | 1.02 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB3 | 1:A:49:THR:HB | 3 | 1.02 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB1 | 1:A:49:THR:HB | 10 | 1.02 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB2 | 1:A:49:THR:HB | 10 | 1.02 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB3 | 1:A:49:THR:HB | 10 | 1.02 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB1 | 1:A:49:THR:HB | 16 | 1.02 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB2 | 1:A:49:THR:HB | 16 | 1.02 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB3 | 1:A:49:THR:HB | 16 | 1.02 |
| (2,900) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:43:GLU:HB3 | 14 | 1.02 |
| (2,900) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:43:GLU:HB3 | 14 | 1.02 |
| (2,900) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:43:GLU:HB3 | 14 | 1.02 |
| (2,893) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:42:PRO:HG3 | 3 | 1.02 |
| (2,893) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:42:PRO:HG3 | 9 | 1.02 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD21 | 6 | 1.02 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD22 | 6 | 1.02 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD23 | 6 | 1.02 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 6 | 1.02 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 6 | 1.02 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 6 | 1.02 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD21 | 7 | 1.02 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD22 | 7 | 1.02 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD23 | 7 | 1.02 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 7 | 1.02 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 7 | 1.02 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 7 | 1.02 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD21 | 10 | 1.02 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD22 | 10 | 1.02 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD23 | 10 | 1.02 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 10 | 1.02 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 10 | 1.02 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 10 | 1.02 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD21 | 13 | 1.02 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD22 | 13 | 1.02 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD23 | 13 | 1.02 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 13 | 1.02 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 13 | 1.02 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 13 | 1.02 |
| (2,444) | 1:A:21:GLN:HG3 | 1:A:21:GLN:H | 6 | 1.02 |
| (2,444) | 1:A:21:GLN:HG3 | 1:A:21:GLN:H | 13 | 1.02 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:12:ARG:HB3 | 2 | 1.02 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:12:ARG:HB3 | 2 | 1.02 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:12:ARG:HB3 | 2 | 1.02 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:12:ARG:HB3 | 15 | 1.02 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:12:ARG:HB3 | 15 | 1.02 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:12:ARG:HB3 | 15 | 1.02 |
| (2,216) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:12:ARG:HB2 | 2 | 1.02 |
| (2,216) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:12:ARG:HB2 | 4 | 1.02 |
| (2,216) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:12:ARG:HB2 | 8 | 1.02 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,216) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:12:ARG:HB2 | 11 | 1.02 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:92:GLN:H | 1 | 1.02 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:92:GLN:H | 1 | 1.02 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:92:GLN:H | 1 | 1.02 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD21 | 7 | 1.02 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD22 | 7 | 1.02 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD23 | 7 | 1.02 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD21 | 7 | 1.02 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD22 | 7 | 1.02 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD23 | 7 | 1.02 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD21 | 7 | 1.02 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD22 | 7 | 1.02 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD23 | 7 | 1.02 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD21 | 8 | 1.02 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD22 | 8 | 1.02 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD23 | 8 | 1.02 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD21 | 8 | 1.02 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD22 | 8 | 1.02 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD23 | 8 | 1.02 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD21 | 8 | 1.02 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD22 | 8 | 1.02 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD23 | 8 | 1.02 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD11 | 6 | 1.02 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD12 | 6 | 1.02 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD13 | 6 | 1.02 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD11 | 6 | 1.02 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD12 | 6 | 1.02 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD13 | 6 | 1.02 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD11 | 6 | 1.02 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD12 | 6 | 1.02 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD13 | 6 | 1.02 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD11 | 12 | 1.02 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD12 | 12 | 1.02 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG21 | 1:A:94:LEU:HD13 | 12 | 1.02 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD11 | 12 | 1.02 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD12 | 12 | 1.02 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG22 | 1:A:94:LEU:HD13 | 12 | 1.02 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD11 | 12 | 1.02 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD12 | 12 | 1.02 |
| (2,1702) | 1:A:91:THR:HG23 | 1:A:94:LEU:HD13 | 12 | 1.02 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD11 | 8 | 1.02 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD12 | 8 | 1.02 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD13 | 8 | 1.02 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD11 | 8 | 1.02 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD12 | 8 | 1.02 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD13 | 8 | 1.02 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD11 | 8 | 1.02 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD12 | 8 | 1.02 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD13 | 8 | 1.02 |
| (2,1624) | 1:A:87:PRO:HB2 | 1:A:26:ALA:HA | 5 | 1.02 |
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:39:HIS:HB2 | 10 | 1.02 |
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:39:HIS:HB2 | 10 | 1.02 |
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:39:HIS:HB2 | 10 | 1.02 |
| (2,1325) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:65:ARG:HA | 11 | 1.02 |
| (2,1156) | 1:A:60:THR:HB | 1:A:59:LEU:HB3 | 3 | 1.02 |
| (2,1156) | 1:A:60:THR:HB | 1:A:59:LEU:HB3 | 4 | 1.02 |
| (2,1156) | 1:A:60:THR:HB | 1:A:59:LEU:HB3 | 6 | 1.02 |
| (2,1156) | 1:A:60:THR:HB | 1:A:59:LEU:HB3 | 8 | 1.02 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HB3 | 1 | 1.02 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HB3 | 1 | 1.02 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HB3 | 1 | 1.02 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HB3 | 9 | 1.02 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HB3 | 9 | 1.02 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HB3 | 9 | 1.02 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HB3 | 16 | 1.02 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HB3 | 16 | 1.02 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HB3 | 16 | 1.02 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:56:ILE:H | 3 | 1.02 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:56:ILE:H | 3 | 1.02 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:56:ILE:H | 3 | 1.02 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:56:ILE:H | 9 | 1.02 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:56:ILE:H | 9 | 1.02 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:56:ILE:H | 9 | 1.02 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:56:ILE:H | 12 | 1.02 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:56:ILE:H | 12 | 1.02 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:56:ILE:H | 12 | 1.02 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:56:ILE:H | 14 | 1.02 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:56:ILE:H | 14 | 1.02 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:56:ILE:H | 14 | 1.02 |
| (2,1020) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HB2 | 1 | 1.02 |
| (1,551) | 1:A:12:ARG:H | 1:A:12:ARG:HD3 | 12 | 1.02 |
| (1,551) | 1:A:12:ARG:H | 1:A:12:ARG:HD3 | 15 | 1.02 |
| (1,234) | 1:A:102:HIS:H | 1:A:101:SER:HB2 | 9 | 1.02 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB1 | 1:A:49:THR:HB | 5 | 1.01 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB2 | 1:A:49:THR:HB | 5 | 1.01 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB3 | 1:A:49:THR:HB | 5 | 1.01 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:33:THR:H | 13 | 1.01 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:33:THR:H | 13 | 1.01 |
| (2,797) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:33:THR:H | 13 | 1.01 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 6 | 1.01 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 6 | 1.01 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 6 | 1.01 |
| (2,469) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HA | 15 | 1.01 |
| (2,285) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:21:GLN:HG2 | 13 | 1.01 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:12:ARG:HB3 | 1 | 1.01 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:12:ARG:HB3 | 1 | 1.01 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:12:ARG:HB3 | 1 | 1.01 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:12:ARG:HB3 | 9 | 1.01 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:12:ARG:HB3 | 9 | 1.01 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:12:ARG:HB3 | 9 | 1.01 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:92:GLN:H | 3 | 1.01 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:92:GLN:H | 3 | 1.01 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:92:GLN:H | 3 | 1.01 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:92:GLN:H | 11 | 1.01 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:92:GLN:H | 11 | 1.01 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:92:GLN:H | 11 | 1.01 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:92:GLN:H | 12 | 1.01 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:92:GLN:H | 12 | 1.01 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:92:GLN:H | 12 | 1.01 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:92:GLN:H | 15 | 1.01 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:92:GLN:H | 15 | 1.01 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:92:GLN:H | 15 | 1.01 |
| (2,1864) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:ASN:HA | 10 | 1.01 |
| (2,1863) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:65:ARG:HE | 11 | 1.01 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD21 | 3 | 1.01 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD22 | 3 | 1.01 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD23 | 3 | 1.01 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD21 | 3 | 1.01 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD22 | 3 | 1.01 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD23 | 3 | 1.01 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD21 | 3 | 1.01 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD22 | 3 | 1.01 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD23 | 3 | 1.01 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD11 | 1 | 1.01 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD12 | 1 | 1.01 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD13 | 1 | 1.01 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD11 | 1 | 1.01 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD12 | 1 | 1.01 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD13 | 1 | 1.01 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD11 | 1 | 1.01 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD12 | 1 | 1.01 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD13 | 1 | 1.01 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:74:LEU:HB3 | 2 | 1.01 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:74:LEU:HB3 | 2 | 1.01 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:74:LEU:HB3 | 2 | 1.01 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:74:LEU:HB3 | 6 | 1.01 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:74:LEU:HB3 | 6 | 1.01 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:74:LEU:HB3 | 6 | 1.01 |
| (2,1478) | 1:A:75:ASP:HB2 | 1:A:74:LEU:HB2 | 12 | 1.01 |
| (2,1327) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:68:LEU:H | 9 | 1.01 |
| (2,1156) | 1:A:60:THR:HB | 1:A:59:LEU:HB3 | 10 | 1.01 |
| (2,1156) | 1:A:60:THR:HB | 1:A:59:LEU:HB3 | 12 | 1.01 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:56:ILE:H | 2 | 1.01 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:56:ILE:H | 2 | 1.01 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:56:ILE:H | 2 | 1.01 |
| (1,326) | 1:A:61:ALA:H | 1:A:64:LEU:HB3 | 2 | 1.01 |
| (1,326) | 1:A:61:ALA:H | 1:A:64:LEU:HB3 | 7 | 1.01 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD21 | 15 | 1.01 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD22 | 15 | 1.01 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD23 | 15 | 1.01 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:70:HIS:H | 9 | 1.0 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:70:HIS:H | 9 | 1.0 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:70:HIS:H | 9 | 1.0 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB1 | 1:A:49:THR:HB | 4 | 1.0 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB2 | 1:A:49:THR:HB | 4 | 1.0 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB3 | 1:A:49:THR:HB | 4 | 1.0 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB1 | 1:A:49:THR:HB | 7 | 1.0 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB2 | 1:A:49:THR:HB | 7 | 1.0 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB3 | 1:A:49:THR:HB | 7 | 1.0 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB1 | 1:A:49:THR:HB | 11 | 1.0 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB2 | 1:A:49:THR:HB | 11 | 1.0 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB3 | 1:A:49:THR:HB | 11 | 1.0 |
| (2,913) | 1:A:43:GLU:HG2 | 1:A:42:PRO:HA | 1 | 1.0 |
| (2,891) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:43:GLU:H | 10 | 1.0 |
| (2,639) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG21 | 15 | 1.0 |
| (2,639) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG22 | 15 | 1.0 |
| (2,639) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG23 | 15 | 1.0 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD21 | 2 | 1.0 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD22 | 2 | 1.0 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD23 | 2 | 1.0 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 2 | 1.0 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 2 | 1.0 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 2 | 1.0 |
| (2,493) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:23:GLN:H | 5 | 1.0 |
| (2,203) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HB2 | 3 | 1.0 |
| (2,1864) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:ASN:HA | 5 | 1.0 |
| (2,1864) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:ASN:HA | 6 | 1.0 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:84:HIS:HB3 | 9 | 1.0 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:84:HIS:HB3 | 9 | 1.0 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:84:HIS:HB3 | 9 | 1.0 |
| (2,1518) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:21:GLN:HG3 | 1 | 1.0 |
| (2,1498) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HB2 | 14 | 1.0 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD21 | 12 | 1.0 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD22 | 12 | 1.0 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD23 | 12 | 1.0 |
| (2,1156) | 1:A:60:THR:HB | 1:A:59:LEU:HB3 | 16 | 1.0 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HB3 | 4 | 1.0 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HB3 | 4 | 1.0 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HB3 | 4 | 1.0 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HB3 | 10 | 1.0 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HB3 | 10 | 1.0 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HB3 | 10 | 1.0 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HB3 | 11 | 1.0 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HB3 | 11 | 1.0 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HB3 | 11 | 1.0 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HB3 | 13 | 1.0 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HB3 | 13 | 1.0 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HB3 | 13 | 1.0 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:56:ILE:H | 4 | 1.0 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:56:ILE:H | 4 | 1.0 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:56:ILE:H | 4 | 1.0 |
| (2,1055) | 1:A:52:LYS:HG3 | 1:A:52:LYS:H | 7 | 1.0 |
| (1,326) | 1:A:61:ALA:H | 1:A:64:LEU:HB3 | 9 | 1.0 |
| (1,326) | 1:A:61:ALA:H | 1:A:64:LEU:HB3 | 16 | 1.0 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:70:HIS:H | 1 | 0.99 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:70:HIS:H | 1 | 0.99 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:70:HIS:H | 1 | 0.99 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:70:HIS:H | 7 | 0.99 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:70:HIS:H | 7 | 0.99 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:70:HIS:H | 7 | 0.99 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB1 | 1:A:49:THR:HB | 2 | 0.99 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB2 | 1:A:49:THR:HB | 2 | 0.99 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB3 | 1:A:49:THR:HB | 2 | 0.99 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB1 | 1:A:49:THR:HB | 12 | 0.99 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB2 | 1:A:49:THR:HB | 12 | 0.99 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB3 | 1:A:49:THR:HB | 12 | 0.99 |
| (2,893) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:42:PRO:HG3 | 2 | 0.99 |
| (2,893) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:42:PRO:HG3 | 8 | 0.99 |
| (2,893) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:42:PRO:HG3 | 14 | 0.99 |
| (2,893) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:42:PRO:HG3 | 15 | 0.99 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD11 | 7 | 0.99 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD12 | 7 | 0.99 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD13 | 7 | 0.99 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD11 | 7 | 0.99 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD12 | 7 | 0.99 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD13 | 7 | 0.99 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD11 | 7 | 0.99 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD12 | 7 | 0.99 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD13 | 7 | 0.99 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD21 | 9 | 0.99 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD22 | 9 | 0.99 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD23 | 9 | 0.99 |
| (2,459) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HB3 | 13 | 0.99 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG21 | 11 | 0.99 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG22 | 11 | 0.99 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG23 | 11 | 0.99 |
| (2,282) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:21:GLN:HA | 14 | 0.99 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:12:ARG:HB3 | 7 | 0.99 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:12:ARG:HB3 | 7 | 0.99 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:12:ARG:HB3 | 7 | 0.99 |
| (2,216) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:12:ARG:HB2 | 10 | 0.99 |
| (2,216) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:12:ARG:HB2 | 12 | 0.99 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:92:GLN:H | 5 | 0.99 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:92:GLN:H | 5 | 0.99 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:92:GLN:H | 5 | 0.99 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:92:GLN:H | 14 | 0.99 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:92:GLN:H | 14 | 0.99 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:92:GLN:H | 14 | 0.99 |
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HA | 15 | 0.99 |
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HA | 15 | 0.99 |
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HA | 15 | 0.99 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD21 | 1 | 0.99 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD22 | 1 | 0.99 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD23 | 1 | 0.99 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD21 | 1 | 0.99 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD22 | 1 | 0.99 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD23 | 1 | 0.99 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD21 | 1 | 0.99 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD22 | 1 | 0.99 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD23 | 1 | 0.99 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD21 | 4 | 0.99 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD22 | 4 | 0.99 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD23 | 4 | 0.99 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD21 | 13 | 0.99 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD22 | 13 | 0.99 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD23 | 13 | 0.99 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD21 | 12 | 0.99 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD22 | 12 | 0.99 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD23 | 12 | 0.99 |
| (2,1268) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HB2 | 3 | 0.99 |
| (2,1156) | 1:A:60:THR:HB | 1:A:59:LEU:HB3 | 7 | 0.99 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HB3 | 5 | 0.99 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HB3 | 5 | 0.99 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HB3 | 5 | 0.99 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HB3 | 12 | 0.99 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HB3 | 12 | 0.99 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HB3 | 12 | 0.99 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:56:ILE:H | 1 | 0.99 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:56:ILE:H | 1 | 0.99 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:56:ILE:H | 1 | 0.99 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:56:ILE:H | 11 | 0.99 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:56:ILE:H | 11 | 0.99 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:56:ILE:H | 11 | 0.99 |
| (2,1020) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HB2 | 5 | 0.99 |
| (1,551) | 1:A:12:ARG:H | 1:A:12:ARG:HD3 | 4 | 0.99 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:70:HIS:H | 13 | 0.98 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:70:HIS:H | 13 | 0.98 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:70:HIS:H | 13 | 0.98 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:70:HIS:H | 14 | 0.98 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:70:HIS:H | 14 | 0.98 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:70:HIS:H | 14 | 0.98 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB1 | 1:A:49:THR:HB | 14 | 0.98 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB2 | 1:A:49:THR:HB | 14 | 0.98 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB3 | 1:A:49:THR:HB | 14 | 0.98 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,893) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:42:PRO:HG3 | 7 | 0.98 |
| (2,893) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:42:PRO:HG3 | 11 | 0.98 |
| (2,892) | 1:A:43:GLU:HG2 | 1:A:41:THR:HB | 12 | 0.98 |
| (2,891) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:43:GLU:H | 2 | 0.98 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG21 | 14 | 0.98 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG22 | 14 | 0.98 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG23 | 14 | 0.98 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD21 | 3 | 0.98 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD22 | 3 | 0.98 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD23 | 3 | 0.98 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 3 | 0.98 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 3 | 0.98 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 3 | 0.98 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD21 | 12 | 0.98 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD22 | 12 | 0.98 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD23 | 12 | 0.98 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 12 | 0.98 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 12 | 0.98 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 12 | 0.98 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD21 | 16 | 0.98 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD22 | 16 | 0.98 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD23 | 16 | 0.98 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 16 | 0.98 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 16 | 0.98 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 16 | 0.98 |
| (2,469) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HA | 2 | 0.98 |
| (2,469) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HA | 4 | 0.98 |
| (2,469) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HA | 10 | 0.98 |
| (2,469) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HA | 14 | 0.98 |
| (2,459) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HB3 | 14 | 0.98 |
| (2,448) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:36:VAL:HA | 4 | 0.98 |
| (2,444) | 1:A:21:GLN:HG3 | 1:A:21:GLN:H | 10 | 0.98 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG21 | 15 | 0.98 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG22 | 15 | 0.98 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG23 | 15 | 0.98 |
| (2,282) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:21:GLN:HA | 15 | 0.98 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:12:ARG:HB3 | 3 | 0.98 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:12:ARG:HB3 | 3 | 0.98 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:12:ARG:HB3 | 3 | 0.98 |
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HA | 2 | 0.98 |
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HA | 2 | 0.98 |
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HA | 2 | 0.98 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HA | 6 | 0.98 |
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HA | 6 | 0.98 |
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HA | 6 | 0.98 |
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HA | 13 | 0.98 |
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HA | 13 | 0.98 |
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HA | 13 | 0.98 |
| (2,1864) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:ASN:HA | 2 | 0.98 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD21 | 5 | 0.98 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD22 | 5 | 0.98 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD23 | 5 | 0.98 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD21 | 5 | 0.98 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD22 | 5 | 0.98 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD23 | 5 | 0.98 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD21 | 5 | 0.98 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD22 | 5 | 0.98 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD23 | 5 | 0.98 |
| (2,1624) | 1:A:87:PRO:HB2 | 1:A:26:ALA:HA | 6 | 0.98 |
| (2,1478) | 1:A:75:ASP:HB2 | 1:A:74:LEU:HB2 | 8 | 0.98 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD21 | 3 | 0.98 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD22 | 3 | 0.98 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD23 | 3 | 0.98 |
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:39:HIS:HB2 | 11 | 0.98 |
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:39:HIS:HB2 | 11 | 0.98 |
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:39:HIS:HB2 | 11 | 0.98 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD21 | 7 | 0.98 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD22 | 7 | 0.98 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD23 | 7 | 0.98 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD21 | 14 | 0.98 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD22 | 14 | 0.98 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD23 | 14 | 0.98 |
| (2,1192) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:65:ARG:HB2 | 11 | 0.98 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HB3 | 2 | 0.98 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HB3 | 2 | 0.98 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HB3 | 2 | 0.98 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:56:ILE:H | 8 | 0.98 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:56:ILE:H | 8 | 0.98 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:56:ILE:H | 8 | 0.98 |
| (2,1020) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HB2 | 4 | 0.98 |
| (2,1020) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HB2 | 15 | 0.98 |
| (1,234) | 1:A:102:HIS:H | 1:A:101:SER:HB2 | 14 | 0.98 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:70:HIS:H | 3 | 0.97 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:70:HIS:H | 3 | 0.97 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:70:HIS:H | 3 | 0.97 |
| (2,913) | 1:A:43:GLU:HG2 | 1:A:42:PRO:HA | 5 | 0.97 |
| (2,913) | 1:A:43:GLU:HG2 | 1:A:42:PRO:HA | 12 | 0.97 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG21 | 9 | 0.97 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG22 | 9 | 0.97 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG23 | 9 | 0.97 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG21 | 9 | 0.97 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG22 | 9 | 0.97 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG23 | 9 | 0.97 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG21 | 9 | 0.97 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG22 | 9 | 0.97 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG23 | 9 | 0.97 |
| (2,639) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG21 | 7 | 0.97 |
| (2,639) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG22 | 7 | 0.97 |
| (2,639) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG23 | 7 | 0.97 |
| (2,493) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:23:GLN:H | 1 | 0.97 |
| (2,461) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HD21 | 7 | 0.97 |
| (2,461) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HD22 | 7 | 0.97 |
| (2,461) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HD23 | 7 | 0.97 |
| (2,459) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HB3 | 5 | 0.97 |
| (2,459) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HB3 | 6 | 0.97 |
| (2,444) | 1:A:21:GLN:HG3 | 1:A:21:GLN:H | 9 | 0.97 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:52:LYS:HB3 | 5 | 0.97 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:52:LYS:HB3 | 5 | 0.97 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:52:LYS:HB3 | 5 | 0.97 |
| (2,216) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:12:ARG:HB2 | 15 | 0.97 |
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HA | 14 | 0.97 |
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HA | 14 | 0.97 |
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HA | 14 | 0.97 |
| (2,1864) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:ASN:HA | 12 | 0.97 |
| (2,1864) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:ASN:HA | 14 | 0.97 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD21 | 4 | 0.97 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD22 | 4 | 0.97 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD23 | 4 | 0.97 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD21 | 4 | 0.97 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD22 | 4 | 0.97 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD23 | 4 | 0.97 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD21 | 4 | 0.97 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD22 | 4 | 0.97 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD23 | 4 | 0.97 |
| (2,1799) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:100:GLN:H | 9 | 0.97 |
| (2,1799) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:100:GLN:H | 9 | 0.97 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1799) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:100:GLN:H | 9 | 0.97 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD21 | 15 | 0.97 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD22 | 15 | 0.97 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD23 | 15 | 0.97 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:74:LEU:HB3 | 4 | 0.97 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:74:LEU:HB3 | 4 | 0.97 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:74:LEU:HB3 | 4 | 0.97 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:74:LEU:HB3 | 7 | 0.97 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:74:LEU:HB3 | 7 | 0.97 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:74:LEU:HB3 | 7 | 0.97 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD21 | 8 | 0.97 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD22 | 8 | 0.97 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD23 | 8 | 0.97 |
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:39:HIS:HB2 | 16 | 0.97 |
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:39:HIS:HB2 | 16 | 0.97 |
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:39:HIS:HB2 | 16 | 0.97 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD21 | 15 | 0.97 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD22 | 15 | 0.97 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD23 | 15 | 0.97 |
| (2,130) | 1:A:7:THR:HB | 1:A:8:ASP:H | 3 | 0.97 |
| (2,130) | 1:A:7:THR:HB | 1:A:8:ASP:H | 16 | 0.97 |
| (2,1193) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:65:ARG:HB2 | 12 | 0.97 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HB3 | 3 | 0.97 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HB3 | 3 | 0.97 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HB3 | 3 | 0.97 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HB3 | 8 | 0.97 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HB3 | 8 | 0.97 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HB3 | 8 | 0.97 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HB3 | 15 | 0.97 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HB3 | 15 | 0.97 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HB3 | 15 | 0.97 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:56:ILE:H | 16 | 0.97 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:56:ILE:H | 16 | 0.97 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:56:ILE:H | 16 | 0.97 |
| (2,1055) | 1:A:52:LYS:HG3 | 1:A:52:LYS:H | 9 | 0.97 |
| (2,1055) | 1:A:52:LYS:HG3 | 1:A:52:LYS:H | 11 | 0.97 |
| (2,1044) | 1:A:52:LYS:HB2 | 1:A:52:LYS:HE2 | 15 | 0.97 |
| (2,1020) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HB2 | 7 | 0.97 |
| (2,1020) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HB2 | 9 | 0.97 |
| (2,1011) | 1:A:75:ASP:HA | 1:A:74:LEU:HG | 10 | 0.97 |
| (1,326) | 1:A:61:ALA:H | 1:A:64:LEU:HB3 | 1 | 0.97 |
| (1,326) | 1:A:61:ALA:H | 1:A:64:LEU:HB3 | 8 | 0.97 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD21 | 10 | 0.97 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD22 | 10 | 0.97 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD23 | 10 | 0.97 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD11 | 10 | 0.97 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD12 | 10 | 0.97 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD13 | 10 | 0.97 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB1 | 1:A:49:THR:HB | 13 | 0.96 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB2 | 1:A:49:THR:HB | 13 | 0.96 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB3 | 1:A:49:THR:HB | 13 | 0.96 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG21 | 3 | 0.96 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG22 | 3 | 0.96 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG23 | 3 | 0.96 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG21 | 11 | 0.96 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG22 | 11 | 0.96 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG23 | 11 | 0.96 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG21 | 11 | 0.96 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG22 | 11 | 0.96 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG23 | 11 | 0.96 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG21 | 11 | 0.96 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG22 | 11 | 0.96 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG23 | 11 | 0.96 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG21 | 13 | 0.96 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG22 | 13 | 0.96 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG23 | 13 | 0.96 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG21 | 13 | 0.96 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG22 | 13 | 0.96 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG23 | 13 | 0.96 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG21 | 13 | 0.96 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG22 | 13 | 0.96 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG23 | 13 | 0.96 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD21 | 14 | 0.96 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD22 | 14 | 0.96 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD23 | 14 | 0.96 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 14 | 0.96 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 14 | 0.96 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 14 | 0.96 |
| (2,493) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:23:GLN:H | 10 | 0.96 |
| (2,469) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HA | 3 | 0.96 |
| (2,461) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HD21 | 1 | 0.96 |
| (2,461) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HD22 | 1 | 0.96 |
| (2,461) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HD23 | 1 | 0.96 |
| (2,461) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HD21 | 15 | 0.96 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,461) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HD22 | 15 | 0.96 |
| (2,461) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HD23 | 15 | 0.96 |
| (2,459) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HB3 | 8 | 0.96 |
| (2,459) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HB3 | 9 | 0.96 |
| (2,459) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HB3 | 10 | 0.96 |
| (2,282) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:21:GLN:HA | 10 | 0.96 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG21 | 12 | 0.96 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG22 | 12 | 0.96 |
| (2,246) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:24:THR:HG23 | 12 | 0.96 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:52:LYS:HB3 | 15 | 0.96 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:52:LYS:HB3 | 15 | 0.96 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:52:LYS:HB3 | 15 | 0.96 |
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HA | 16 | 0.96 |
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HA | 16 | 0.96 |
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HA | 16 | 0.96 |
| (2,1864) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:ASN:HA | 3 | 0.96 |
| (2,1841) | 1:A:98:LEU:HD21 | 1:A:95:HIS:HD2 | 7 | 0.96 |
| (2,1841) | 1:A:98:LEU:HD22 | 1:A:95:HIS:HD2 | 7 | 0.96 |
| (2,1841) | 1:A:98:LEU:HD23 | 1:A:95:HIS:HD2 | 7 | 0.96 |
| (2,1834) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HD11 | 9 | 0.96 |
| (2,1834) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HD12 | 9 | 0.96 |
| (2,1834) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HD13 | 9 | 0.96 |
| (2,1834) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HD11 | 9 | 0.96 |
| (2,1834) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HD12 | 9 | 0.96 |
| (2,1834) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HD13 | 9 | 0.96 |
| (2,1834) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HD11 | 9 | 0.96 |
| (2,1834) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HD12 | 9 | 0.96 |
| (2,1834) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HD13 | 9 | 0.96 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD21 | 10 | 0.96 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD22 | 10 | 0.96 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD23 | 10 | 0.96 |
| (2,1765) | 1:A:97:ARG:HD3 | 1:A:97:ARG:HA | 8 | 0.96 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD11 | 6 | 0.96 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD12 | 6 | 0.96 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD13 | 6 | 0.96 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD11 | 6 | 0.96 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD12 | 6 | 0.96 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD13 | 6 | 0.96 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD11 | 6 | 0.96 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD12 | 6 | 0.96 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD13 | 6 | 0.96 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD11 | 9 | 0.96 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD12 | 9 | 0.96 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD13 | 9 | 0.96 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD11 | 9 | 0.96 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD12 | 9 | 0.96 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD13 | 9 | 0.96 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD11 | 9 | 0.96 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD12 | 9 | 0.96 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD13 | 9 | 0.96 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD11 | 12 | 0.96 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD12 | 12 | 0.96 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD13 | 12 | 0.96 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD11 | 12 | 0.96 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD12 | 12 | 0.96 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD13 | 12 | 0.96 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD11 | 12 | 0.96 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD12 | 12 | 0.96 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD13 | 12 | 0.96 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:91:THR:HA | 8 | 0.96 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:91:THR:HA | 8 | 0.96 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:91:THR:HA | 8 | 0.96 |
| (2,15) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:22:GLN:HA | 14 | 0.96 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD21 | 13 | 0.96 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD22 | 13 | 0.96 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD23 | 13 | 0.96 |
| (2,1284) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:66:ASN:H | 1 | 0.96 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:56:ILE:H | 5 | 0.96 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:56:ILE:H | 5 | 0.96 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:56:ILE:H | 5 | 0.96 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:56:ILE:H | 6 | 0.96 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:56:ILE:H | 6 | 0.96 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:56:ILE:H | 6 | 0.96 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:56:ILE:H | 15 | 0.96 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:56:ILE:H | 15 | 0.96 |
| (2,1076) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:56:ILE:H | 15 | 0.96 |
| (2,1020) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HB2 | 11 | 0.96 |
| (2,1020) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HB2 | 14 | 0.96 |
| (1,605) | 1:A:43:GLU:H | 1:A:42:PRO:HD2 | 13 | 0.96 |
| (1,605) | 1:A:43:GLU:H | 1:A:42:PRO:HD2 | 16 | 0.96 |
| (1,551) | 1:A:12:ARG:H | 1:A:12:ARG:HD3 | 16 | 0.96 |
| (1,326) | 1:A:61:ALA:H | 1:A:64:LEU:HB3 | 15 | 0.96 |
| (1,205) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:47:PRO:HD2 | 6 | 0.96 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:70:HIS:H | 10 | 0.95 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:70:HIS:H | 10 | 0.95 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:70:HIS:H | 10 | 0.95 |
| (2,893) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:42:PRO:HG3 | 10 | 0.95 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB1 | 4 | 0.95 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB2 | 4 | 0.95 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB3 | 4 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG21 | 2 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG22 | 2 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG23 | 2 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG21 | 2 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG22 | 2 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG23 | 2 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG21 | 2 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG22 | 2 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG23 | 2 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG21 | 3 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG22 | 3 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG23 | 3 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG21 | 3 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG22 | 3 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG23 | 3 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG21 | 3 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG22 | 3 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG23 | 3 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG21 | 4 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG22 | 4 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG23 | 4 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG21 | 4 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG22 | 4 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG23 | 4 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG21 | 4 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG22 | 4 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG23 | 4 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG21 | 7 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG22 | 7 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG23 | 7 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG21 | 7 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG22 | 7 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG23 | 7 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG21 | 7 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG22 | 7 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG23 | 7 | 0.95 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG21 | 8 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG22 | 8 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG23 | 8 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG21 | 8 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG22 | 8 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG23 | 8 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG21 | 8 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG22 | 8 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG23 | 8 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG21 | 14 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG22 | 14 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG23 | 14 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG21 | 14 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG22 | 14 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG23 | 14 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG21 | 14 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG22 | 14 | 0.95 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG23 | 14 | 0.95 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD11 | 6 | 0.95 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD12 | 6 | 0.95 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD13 | 6 | 0.95 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD11 | 6 | 0.95 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD12 | 6 | 0.95 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD13 | 6 | 0.95 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD11 | 6 | 0.95 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD12 | 6 | 0.95 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD13 | 6 | 0.95 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:22:GLN:HB2 | 11 | 0.95 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 11 | 0.95 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:22:GLN:HB2 | 11 | 0.95 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD21 | 4 | 0.95 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD22 | 4 | 0.95 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD23 | 4 | 0.95 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 4 | 0.95 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 4 | 0.95 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 4 | 0.95 |
| (2,461) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HD21 | 8 | 0.95 |
| (2,461) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HD22 | 8 | 0.95 |
| (2,461) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HD23 | 8 | 0.95 |
| (2,461) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HD21 | 9 | 0.95 |
| (2,461) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HD22 | 9 | 0.95 |
| (2,461) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HD23 | 9 | 0.95 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,459) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HB3 | 1 | 0.95 |
| (2,459) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HB3 | 2 | 0.95 |
| (2,459) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HB3 | 3 | 0.95 |
| (2,459) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HB3 | 7 | 0.95 |
| (2,444) | 1:A:21:GLN:HG3 | 1:A:21:GLN:H | 3 | 0.95 |
| (2,444) | 1:A:21:GLN:HG3 | 1:A:21:GLN:H | 8 | 0.95 |
| (2,381) | 1:A:18:PRO:HB2 | 1:A:19:GLN:H | 6 | 0.95 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 10 | 0.95 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 10 | 0.95 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 10 | 0.95 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 11 | 0.95 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 11 | 0.95 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 11 | 0.95 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:52:LYS:HB3 | 12 | 0.95 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:52:LYS:HB3 | 12 | 0.95 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:52:LYS:HB3 | 12 | 0.95 |
| (2,1892) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:90:LEU:H | 8 | 0.95 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:92:GLN:H | 4 | 0.95 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:92:GLN:H | 4 | 0.95 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:92:GLN:H | 4 | 0.95 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:92:GLN:H | 7 | 0.95 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:92:GLN:H | 7 | 0.95 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:92:GLN:H | 7 | 0.95 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:92:GLN:H | 10 | 0.95 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:92:GLN:H | 10 | 0.95 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:92:GLN:H | 10 | 0.95 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:92:GLN:H | 13 | 0.95 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:92:GLN:H | 13 | 0.95 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:92:GLN:H | 13 | 0.95 |
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HA | 3 | 0.95 |
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HA | 3 | 0.95 |
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HA | 3 | 0.95 |
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HA | 7 | 0.95 |
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HA | 7 | 0.95 |
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HA | 7 | 0.95 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD21 | 14 | 0.95 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD22 | 14 | 0.95 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD23 | 14 | 0.95 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD21 | 14 | 0.95 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD22 | 14 | 0.95 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD23 | 14 | 0.95 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD21 | 14 | 0.95 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD22 | 14 | 0.95 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD23 | 14 | 0.95 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD21 | 2 | 0.95 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD22 | 2 | 0.95 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD23 | 2 | 0.95 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD11 | 16 | 0.95 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD12 | 16 | 0.95 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD13 | 16 | 0.95 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD11 | 16 | 0.95 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD12 | 16 | 0.95 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD13 | 16 | 0.95 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD11 | 16 | 0.95 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD12 | 16 | 0.95 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD13 | 16 | 0.95 |
| (2,1558) | 1:A:82:PHE:HA | 1:A:85:PRO:HB2 | 3 | 0.95 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:74:LEU:HB3 | 16 | 0.95 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:74:LEU:HB3 | 16 | 0.95 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:74:LEU:HB3 | 16 | 0.95 |
| (2,130) | 1:A:7:THR:HB | 1:A:8:ASP:H | 8 | 0.95 |
| (2,1284) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:66:ASN:H | 2 | 0.95 |
| (2,1284) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:66:ASN:H | 5 | 0.95 |
| (2,1284) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:66:ASN:H | 7 | 0.95 |
| (2,1268) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HB2 | 8 | 0.95 |
| (2,1156) | 1:A:60:THR:HB | 1:A:59:LEU:HB3 | 9 | 0.95 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HB3 | 6 | 0.95 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HB3 | 6 | 0.95 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HB3 | 6 | 0.95 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HB3 | 14 | 0.95 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HB3 | 14 | 0.95 |
| (2,1120) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HB3 | 14 | 0.95 |
| (2,1020) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HB2 | 2 | 0.95 |
| (2,1020) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HB2 | 6 | 0.95 |
| (2,1020) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HB2 | 12 | 0.95 |
| (1,551) | 1:A:12:ARG:H | 1:A:12:ARG:HD3 | 7 | 0.95 |
| (1,392) | 1:A:38:GLY:H | 1:A:37:LEU:HB2 | 15 | 0.95 |
| (1,205) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:47:PRO:HD2 | 2 | 0.95 |
| (2,913) | 1:A:43:GLU:HG2 | 1:A:42:PRO:HA | 15 | 0.94 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD11 | 13 | 0.94 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD12 | 13 | 0.94 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD13 | 13 | 0.94 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD11 | 16 | 0.94 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD12 | 16 | 0.94 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD13 | 16 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG21 | 1 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG22 | 1 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG23 | 1 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG21 | 1 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG22 | 1 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG23 | 1 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG21 | 1 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG22 | 1 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG23 | 1 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG21 | 6 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG22 | 6 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG23 | 6 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG21 | 6 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG22 | 6 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG23 | 6 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG21 | 6 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG22 | 6 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG23 | 6 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG21 | 10 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG22 | 10 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG23 | 10 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG21 | 10 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG22 | 10 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG23 | 10 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG21 | 10 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG22 | 10 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG23 | 10 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG21 | 15 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG22 | 15 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG23 | 15 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG21 | 15 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG22 | 15 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG23 | 15 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG21 | 15 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG22 | 15 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG23 | 15 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG21 | 16 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG22 | 16 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG23 | 16 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG21 | 16 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG22 | 16 | 0.94 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG23 | 16 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG21 | 16 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG22 | 16 | 0.94 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG23 | 16 | 0.94 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD11 | 5 | 0.94 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD12 | 5 | 0.94 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD13 | 5 | 0.94 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD11 | 5 | 0.94 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD12 | 5 | 0.94 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD13 | 5 | 0.94 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD11 | 5 | 0.94 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD12 | 5 | 0.94 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD13 | 5 | 0.94 |
| (2,469) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HA | 6 | 0.94 |
| (2,469) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HA | 16 | 0.94 |
| (2,461) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HD21 | 4 | 0.94 |
| (2,461) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HD22 | 4 | 0.94 |
| (2,461) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HD23 | 4 | 0.94 |
| (2,461) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HD21 | 10 | 0.94 |
| (2,461) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HD22 | 10 | 0.94 |
| (2,461) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HD23 | 10 | 0.94 |
| (2,444) | 1:A:21:GLN:HG3 | 1:A:21:GLN:H | 5 | 0.94 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:12:ARG:HB3 | 6 | 0.94 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:12:ARG:HB3 | 6 | 0.94 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:12:ARG:HB3 | 6 | 0.94 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:52:LYS:HB3 | 6 | 0.94 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:52:LYS:HB3 | 6 | 0.94 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:52:LYS:HB3 | 6 | 0.94 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:52:LYS:HB3 | 10 | 0.94 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:52:LYS:HB3 | 10 | 0.94 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:52:LYS:HB3 | 10 | 0.94 |
| (2,216) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:12:ARG:HB2 | 16 | 0.94 |
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HA | 4 | 0.94 |
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HA | 4 | 0.94 |
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HA | 4 | 0.94 |
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HA | 5 | 0.94 |
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HA | 5 | 0.94 |
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HA | 5 | 0.94 |
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HA | 11 | 0.94 |
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HA | 11 | 0.94 |
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HA | 11 | 0.94 |
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HA | 12 | 0.94 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HA | 12 | 0.94 |
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HA | 12 | 0.94 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD21 | 12 | 0.94 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD22 | 12 | 0.94 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD23 | 12 | 0.94 |
| (2,1773) | 1:A:97:ARG:HD2 | 1:A:100:GLN:H | 10 | 0.94 |
| (2,1518) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:21:GLN:HG3 | 7 | 0.94 |
| (2,1478) | 1:A:75:ASP:HB2 | 1:A:74:LEU:HB2 | 2 | 0.94 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD21 | 5 | 0.94 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD22 | 5 | 0.94 |
| (2,1455) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:74:LEU:HD23 | 5 | 0.94 |
| (2,130) | 1:A:7:THR:HB | 1:A:8:ASP:H | 13 | 0.94 |
| (2,1284) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:66:ASN:H | 8 | 0.94 |
| (2,1284) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:66:ASN:H | 9 | 0.94 |
| (2,1268) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HB2 | 9 | 0.94 |
| (2,1268) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HB2 | 10 | 0.94 |
| (2,1268) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HB2 | 16 | 0.94 |
| (1,609) | 1:A:67:THR:H | 1:A:68:LEU:HB3 | 13 | 0.94 |
| (1,605) | 1:A:43:GLU:H | 1:A:42:PRO:HD2 | 12 | 0.94 |
| (1,282) | 1:A:14:ASN:HD21 | 1:A:11:ALA:HA | 15 | 0.94 |
| (1,205) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:47:PRO:HD2 | 1 | 0.94 |
| (1,205) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:47:PRO:HD2 | 7 | 0.94 |
| (1,205) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:47:PRO:HD2 | 10 | 0.94 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB1 | 1:A:49:THR:HB | 8 | 0.93 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB2 | 1:A:49:THR:HB | 8 | 0.93 |
| (2,973) | 1:A:48:ALA:HB3 | 1:A:49:THR:HB | 8 | 0.93 |
| (2,90) | 1:A:4:SER:HA | 1:A:5:ALA:H | 9 | 0.93 |
| (2,90) | 1:A:4:SER:HA | 1:A:5:ALA:H | 10 | 0.93 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD11 | 8 | 0.93 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD12 | 8 | 0.93 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD13 | 8 | 0.93 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB1 | 9 | 0.93 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB2 | 9 | 0.93 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB3 | 9 | 0.93 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB1 | 15 | 0.93 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB2 | 15 | 0.93 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB3 | 15 | 0.93 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG21 | 5 | 0.93 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG22 | 5 | 0.93 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG23 | 5 | 0.93 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG21 | 5 | 0.93 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG22 | 5 | 0.93 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG23 | 5 | 0.93 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG21 | 5 | 0.93 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG22 | 5 | 0.93 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG23 | 5 | 0.93 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG21 | 12 | 0.93 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG22 | 12 | 0.93 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG23 | 12 | 0.93 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG21 | 12 | 0.93 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG22 | 12 | 0.93 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG23 | 12 | 0.93 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG21 | 12 | 0.93 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG22 | 12 | 0.93 |
| (2,709) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG23 | 12 | 0.93 |
| (2,469) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HA | 13 | 0.93 |
| (2,461) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HD21 | 2 | 0.93 |
| (2,461) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HD22 | 2 | 0.93 |
| (2,461) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HD23 | 2 | 0.93 |
| (2,461) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HD21 | 5 | 0.93 |
| (2,461) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HD22 | 5 | 0.93 |
| (2,461) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HD23 | 5 | 0.93 |
| (2,461) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HD21 | 16 | 0.93 |
| (2,461) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HD22 | 16 | 0.93 |
| (2,461) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HD23 | 16 | 0.93 |
| (2,459) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HB3 | 4 | 0.93 |
| (2,459) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HB3 | 12 | 0.93 |
| (2,459) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HB3 | 16 | 0.93 |
| (2,448) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:36:VAL:HA | 5 | 0.93 |
| (2,448) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:36:VAL:HA | 11 | 0.93 |
| (2,381) | 1:A:18:PRO:HB2 | 1:A:19:GLN:H | 13 | 0.93 |
| (2,282) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:21:GLN:HA | 9 | 0.93 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 9 | 0.93 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 9 | 0.93 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 9 | 0.93 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:52:LYS:HB3 | 1 | 0.93 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:52:LYS:HB3 | 1 | 0.93 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:52:LYS:HB3 | 1 | 0.93 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:52:LYS:HB3 | 8 | 0.93 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:52:LYS:HB3 | 8 | 0.93 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:52:LYS:HB3 | 8 | 0.93 |
| (2,216) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:12:ARG:HB2 | 14 | 0.93 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD21 | 7 | 0.93 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD22 | 7 | 0.93 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD23 | 7 | 0.93 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD21 | 7 | 0.93 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD22 | 7 | 0.93 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD23 | 7 | 0.93 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD21 | 7 | 0.93 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD22 | 7 | 0.93 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD23 | 7 | 0.93 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD11 | 10 | 0.93 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD12 | 10 | 0.93 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD13 | 10 | 0.93 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD11 | 15 | 0.93 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD12 | 15 | 0.93 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD13 | 15 | 0.93 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD21 | 2 | 0.93 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD22 | 2 | 0.93 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD23 | 2 | 0.93 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD21 | 2 | 0.93 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD22 | 2 | 0.93 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD23 | 2 | 0.93 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD21 | 2 | 0.93 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD22 | 2 | 0.93 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD23 | 2 | 0.93 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD21 | 16 | 0.93 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD22 | 16 | 0.93 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD23 | 16 | 0.93 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:84:HIS:HB3 | 6 | 0.93 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:84:HIS:HB3 | 6 | 0.93 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:84:HIS:HB3 | 6 | 0.93 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:74:LEU:HB3 | 3 | 0.93 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:74:LEU:HB3 | 3 | 0.93 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:74:LEU:HB3 | 3 | 0.93 |
| (2,1498) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HB2 | 3 | 0.93 |
| (2,1498) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HB2 | 9 | 0.93 |
| (2,130) | 1:A:7:THR:HB | 1:A:8:ASP:H | 15 | 0.93 |
| (2,1011) | 1:A:75:ASP:HA | 1:A:74:LEU:HG | 13 | 0.93 |
| (1,609) | 1:A:67:THR:H | 1:A:68:LEU:HB3 | 12 | 0.93 |
| (1,234) | 1:A:102:HIS:H | 1:A:101:SER:HB2 | 12 | 0.93 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD11 | 1 | 0.93 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD12 | 1 | 0.93 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD13 | 1 | 0.93 |
| (2,90) | 1:A:4:SER:HA | 1:A:5:ALA:H | 14 | 0.92 |
| (2,846) | 1:A:39:HIS:HD2 | 1:A:37:LEU:HD11 | 16 | 0.92 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,846) | 1:A:39:HIS:HD2 | 1:A:37:LEU:HD12 | 16 | 0.92 |
| (2,846) | 1:A:39:HIS:HD2 | 1:A:37:LEU:HD13 | 16 | 0.92 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG21 | 12 | 0.92 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG22 | 12 | 0.92 |
| (2,801) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:29:VAL:HG23 | 12 | 0.92 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD11 | 10 | 0.92 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD12 | 10 | 0.92 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD13 | 10 | 0.92 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB1 | 11 | 0.92 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB2 | 11 | 0.92 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB3 | 11 | 0.92 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD11 | 4 | 0.92 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD12 | 4 | 0.92 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD13 | 4 | 0.92 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD11 | 4 | 0.92 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD12 | 4 | 0.92 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD13 | 4 | 0.92 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD11 | 4 | 0.92 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD12 | 4 | 0.92 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD13 | 4 | 0.92 |
| (2,444) | 1:A:21:GLN:HG3 | 1:A:21:GLN:H | 1 | 0.92 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 8 | 0.92 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 8 | 0.92 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 8 | 0.92 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:12:ARG:HB3 | 5 | 0.92 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:12:ARG:HB3 | 5 | 0.92 |
| (2,247) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:12:ARG:HB3 | 5 | 0.92 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:52:LYS:HB3 | 3 | 0.92 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:52:LYS:HB3 | 3 | 0.92 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:52:LYS:HB3 | 3 | 0.92 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:52:LYS:HB3 | 11 | 0.92 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:52:LYS:HB3 | 11 | 0.92 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:52:LYS:HB3 | 11 | 0.92 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:52:LYS:HB3 | 13 | 0.92 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:52:LYS:HB3 | 13 | 0.92 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:52:LYS:HB3 | 13 | 0.92 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:52:LYS:HB3 | 14 | 0.92 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:52:LYS:HB3 | 14 | 0.92 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:52:LYS:HB3 | 14 | 0.92 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:52:LYS:HB3 | 16 | 0.92 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:52:LYS:HB3 | 16 | 0.92 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:52:LYS:HB3 | 16 | 0.92 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,216) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:12:ARG:HB2 | 6 | 0.92 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD11 | 11 | 0.92 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD12 | 11 | 0.92 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD13 | 11 | 0.92 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:92:GLN:H | 2 | 0.92 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:92:GLN:H | 2 | 0.92 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:92:GLN:H | 2 | 0.92 |
| (2,1864) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:ASN:HA | 4 | 0.92 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD21 | 6 | 0.92 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD22 | 6 | 0.92 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD23 | 6 | 0.92 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD21 | 6 | 0.92 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD22 | 6 | 0.92 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD23 | 6 | 0.92 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD21 | 6 | 0.92 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD22 | 6 | 0.92 |
| (2,1833) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD23 | 6 | 0.92 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:4:SER:HB2 | 16 | 0.92 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:4:SER:HB2 | 16 | 0.92 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:4:SER:HB2 | 16 | 0.92 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD21 | 14 | 0.92 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD22 | 14 | 0.92 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD23 | 14 | 0.92 |
| (2,1768) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:96:THR:HB | 8 | 0.92 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD11 | 15 | 0.92 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD12 | 15 | 0.92 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD13 | 15 | 0.92 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD11 | 15 | 0.92 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD12 | 15 | 0.92 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD13 | 15 | 0.92 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD11 | 15 | 0.92 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD12 | 15 | 0.92 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD13 | 15 | 0.92 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:84:HIS:HB3 | 8 | 0.92 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:84:HIS:HB3 | 8 | 0.92 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:84:HIS:HB3 | 8 | 0.92 |
| (2,1538) | 1:A:98:LEU:HB3 | 1:A:99:THR:H | 3 | 0.92 |
| (2,1518) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:21:GLN:HG3 | 15 | 0.92 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:74:LEU:HB3 | 12 | 0.92 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:74:LEU:HB3 | 12 | 0.92 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:74:LEU:HB3 | 12 | 0.92 |
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:39:HIS:HB2 | 1 | 0.92 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:39:HIS:HB2 | 1 | 0.92 |
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:39:HIS:HB2 | 1 | 0.92 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD21 | 3 | 0.92 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD22 | 3 | 0.92 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD23 | 3 | 0.92 |
| (2,1343) | 1:A:70:HIS:HA | 1:A:73:GLY:HA3 | 8 | 0.92 |
| (2,130) | 1:A:7:THR:HB | 1:A:8:ASP:H | 11 | 0.92 |
| (2,130) | 1:A:7:THR:HB | 1:A:8:ASP:H | 12 | 0.92 |
| (2,1284) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:66:ASN:H | 6 | 0.92 |
| (2,1284) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:66:ASN:H | 14 | 0.92 |
| (2,128) | 1:A:7:THR:HB | 1:A:8:ASP:HA | 4 | 0.92 |
| (2,1268) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HB2 | 7 | 0.92 |
| (2,1268) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HB2 | 12 | 0.92 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HD21 | 8 | 0.92 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HD22 | 8 | 0.92 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HD23 | 8 | 0.92 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:HD21 | 8 | 0.92 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:HD22 | 8 | 0.92 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:HD23 | 8 | 0.92 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:HD21 | 8 | 0.92 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:HD22 | 8 | 0.92 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:HD23 | 8 | 0.92 |
| (2,1193) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:65:ARG:HB2 | 3 | 0.92 |
| (2,1055) | 1:A:52:LYS:HG3 | 1:A:52:LYS:H | 4 | 0.92 |
| (2,1055) | 1:A:52:LYS:HG3 | 1:A:52:LYS:H | 5 | 0.92 |
| (2,1020) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HB2 | 3 | 0.92 |
| (2,1020) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HB2 | 13 | 0.92 |
| (2,1011) | 1:A:75:ASP:HA | 1:A:74:LEU:HG | 16 | 0.92 |
| (1,605) | 1:A:43:GLU:H | 1:A:42:PRO:HD2 | 1 | 0.92 |
| (1,501) | 1:A:100:GLN:H | 1:A:100:GLN:HG3 | 6 | 0.92 |
| (1,205) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:47:PRO:HD2 | 14 | 0.92 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:70:HIS:H | 15 | 0.91 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:70:HIS:H | 15 | 0.91 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:70:HIS:H | 15 | 0.91 |
| (2,90) | 1:A:4:SER:HA | 1:A:5:ALA:H | 5 | 0.91 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD11 | 3 | 0.91 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD12 | 3 | 0.91 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD13 | 3 | 0.91 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB1 | 1 | 0.91 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB2 | 1 | 0.91 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB3 | 1 | 0.91 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD11 | 1 | 0.91 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD12 | 1 | 0.91 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD13 | 1 | 0.91 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD11 | 1 | 0.91 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD12 | 1 | 0.91 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD13 | 1 | 0.91 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD11 | 1 | 0.91 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD12 | 1 | 0.91 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD13 | 1 | 0.91 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD11 | 9 | 0.91 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD12 | 9 | 0.91 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD13 | 9 | 0.91 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD11 | 9 | 0.91 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD12 | 9 | 0.91 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD13 | 9 | 0.91 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD11 | 9 | 0.91 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD12 | 9 | 0.91 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD13 | 9 | 0.91 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD11 | 16 | 0.91 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD12 | 16 | 0.91 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD13 | 16 | 0.91 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD11 | 16 | 0.91 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD12 | 16 | 0.91 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD13 | 16 | 0.91 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD11 | 16 | 0.91 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD12 | 16 | 0.91 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD13 | 16 | 0.91 |
| (2,639) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG21 | 14 | 0.91 |
| (2,639) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG22 | 14 | 0.91 |
| (2,639) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG23 | 14 | 0.91 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:22:GLN:HB2 | 9 | 0.91 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 9 | 0.91 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:22:GLN:HB2 | 9 | 0.91 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD21 | 14 | 0.91 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD22 | 14 | 0.91 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD23 | 14 | 0.91 |
| (2,461) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HD21 | 14 | 0.91 |
| (2,461) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HD22 | 14 | 0.91 |
| (2,461) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HD23 | 14 | 0.91 |
| (2,459) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HB3 | 15 | 0.91 |
| (2,381) | 1:A:18:PRO:HB2 | 1:A:19:GLN:H | 9 | 0.91 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:52:LYS:HB3 | 2 | 0.91 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:52:LYS:HB3 | 2 | 0.91 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:52:LYS:HB3 | 2 | 0.91 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:52:LYS:HB3 | 4 | 0.91 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:52:LYS:HB3 | 4 | 0.91 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:52:LYS:HB3 | 4 | 0.91 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:52:LYS:HB3 | 9 | 0.91 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:52:LYS:HB3 | 9 | 0.91 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:52:LYS:HB3 | 9 | 0.91 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD21 | 13 | 0.91 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD22 | 13 | 0.91 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD23 | 13 | 0.91 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD21 | 13 | 0.91 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD22 | 13 | 0.91 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD23 | 13 | 0.91 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD21 | 13 | 0.91 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD22 | 13 | 0.91 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD23 | 13 | 0.91 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD11 | 13 | 0.91 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD12 | 13 | 0.91 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD13 | 13 | 0.91 |
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HA | 10 | 0.91 |
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HA | 10 | 0.91 |
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HA | 10 | 0.91 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:84:HIS:HB3 | 4 | 0.91 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:84:HIS:HB3 | 4 | 0.91 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:84:HIS:HB3 | 4 | 0.91 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:84:HIS:HB3 | 7 | 0.91 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:84:HIS:HB3 | 7 | 0.91 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:84:HIS:HB3 | 7 | 0.91 |
| (2,1518) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:21:GLN:HG3 | 16 | 0.91 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:74:LEU:HB3 | 5 | 0.91 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:74:LEU:HB3 | 5 | 0.91 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:74:LEU:HB3 | 5 | 0.91 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:74:LEU:HB3 | 13 | 0.91 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:74:LEU:HB3 | 13 | 0.91 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:74:LEU:HB3 | 13 | 0.91 |
| (2,1478) | 1:A:75:ASP:HB2 | 1:A:74:LEU:HB2 | 7 | 0.91 |
| (2,1343) | 1:A:70:HIS:HA | 1:A:73:GLY:HA3 | 3 | 0.91 |
| (2,1325) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:65:ARG:HA | 3 | 0.91 |
| (2,1284) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:66:ASN:H | 15 | 0.91 |
| (2,1284) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:66:ASN:H | 16 | 0.91 |
| (2,128) | 1:A:7:THR:HB | 1:A:8:ASP:HA | 11 | 0.91 |
| (2,128) | 1:A:7:THR:HB | 1:A:8:ASP:HA | 13 | 0.91 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1268) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HB2 | 15 | 0.91 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD21 | 11 | 0.91 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD22 | 11 | 0.91 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD23 | 11 | 0.91 |
| (2,1020) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HB2 | 10 | 0.91 |
| (1,605) | 1:A:43:GLU:H | 1:A:42:PRO:HD2 | 6 | 0.91 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD11 | 15 | 0.91 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD12 | 15 | 0.91 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD13 | 15 | 0.91 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:70:HIS:H | 16 | 0.9 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:70:HIS:H | 16 | 0.9 |
| (2,990) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:70:HIS:H | 16 | 0.9 |
| (2,90) | 1:A:4:SER:HA | 1:A:5:ALA:H | 6 | 0.9 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD11 | 4 | 0.9 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD12 | 4 | 0.9 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD13 | 4 | 0.9 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD11 | 6 | 0.9 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD12 | 6 | 0.9 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD13 | 6 | 0.9 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD11 | 11 | 0.9 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD12 | 11 | 0.9 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD13 | 11 | 0.9 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB1 | 7 | 0.9 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB2 | 7 | 0.9 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB3 | 7 | 0.9 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB1 | 14 | 0.9 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB2 | 14 | 0.9 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB3 | 14 | 0.9 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD11 | 11 | 0.9 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD12 | 11 | 0.9 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD13 | 11 | 0.9 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD11 | 11 | 0.9 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD12 | 11 | 0.9 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD13 | 11 | 0.9 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD11 | 11 | 0.9 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD12 | 11 | 0.9 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD13 | 11 | 0.9 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD21 | 11 | 0.9 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD22 | 11 | 0.9 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD23 | 11 | 0.9 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 11 | 0.9 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 11 | 0.9 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 11 | 0.9 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD21 | 5 | 0.9 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD22 | 5 | 0.9 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD23 | 5 | 0.9 |
| (2,469) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HA | 12 | 0.9 |
| (2,461) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HD21 | 13 | 0.9 |
| (2,461) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HD22 | 13 | 0.9 |
| (2,461) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HD23 | 13 | 0.9 |
| (2,459) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HB3 | 11 | 0.9 |
| (2,448) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:36:VAL:HA | 14 | 0.9 |
| (2,320) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:51:PHE:HA | 8 | 0.9 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 16 | 0.9 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 16 | 0.9 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 16 | 0.9 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD21 | 9 | 0.9 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD22 | 9 | 0.9 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD23 | 9 | 0.9 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD21 | 9 | 0.9 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD22 | 9 | 0.9 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD23 | 9 | 0.9 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD21 | 9 | 0.9 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD22 | 9 | 0.9 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD23 | 9 | 0.9 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:92:GLN:H | 6 | 0.9 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:92:GLN:H | 6 | 0.9 |
| (2,1880) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:92:GLN:H | 6 | 0.9 |
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HA | 1 | 0.9 |
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HA | 1 | 0.9 |
| (2,1878) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HA | 1 | 0.9 |
| (2,1864) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:ASN:HA | 8 | 0.9 |
| (2,1809) | 1:A:101:SER:HB2 | 1:A:100:GLN:H | 13 | 0.9 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD21 | 3 | 0.9 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD22 | 3 | 0.9 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD23 | 3 | 0.9 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD11 | 1:A:95:HIS:HB2 | 1 | 0.9 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD12 | 1:A:95:HIS:HB2 | 1 | 0.9 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD13 | 1:A:95:HIS:HB2 | 1 | 0.9 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD11 | 2 | 0.9 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD12 | 2 | 0.9 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD13 | 2 | 0.9 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD11 | 2 | 0.9 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD12 | 2 | 0.9 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD13 | 2 | 0.9 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD11 | 2 | 0.9 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD12 | 2 | 0.9 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD13 | 2 | 0.9 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD11 | 13 | 0.9 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD12 | 13 | 0.9 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD13 | 13 | 0.9 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD11 | 13 | 0.9 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD12 | 13 | 0.9 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD13 | 13 | 0.9 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD11 | 13 | 0.9 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD12 | 13 | 0.9 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD13 | 13 | 0.9 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:84:HIS:HB3 | 1 | 0.9 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:84:HIS:HB3 | 1 | 0.9 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:84:HIS:HB3 | 1 | 0.9 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:84:HIS:HB3 | 10 | 0.9 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:84:HIS:HB3 | 10 | 0.9 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:84:HIS:HB3 | 10 | 0.9 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:84:HIS:HB3 | 12 | 0.9 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:84:HIS:HB3 | 12 | 0.9 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:84:HIS:HB3 | 12 | 0.9 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:84:HIS:HB3 | 13 | 0.9 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:84:HIS:HB3 | 13 | 0.9 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:84:HIS:HB3 | 13 | 0.9 |
| (2,1522) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:13:LEU:HA | 12 | 0.9 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:74:LEU:HB3 | 1 | 0.9 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:74:LEU:HB3 | 1 | 0.9 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:74:LEU:HB3 | 1 | 0.9 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:74:LEU:HB3 | 8 | 0.9 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:74:LEU:HB3 | 8 | 0.9 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:74:LEU:HB3 | 8 | 0.9 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD21 | 2 | 0.9 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD22 | 2 | 0.9 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD23 | 2 | 0.9 |
| (2,130) | 1:A:7:THR:HB | 1:A:8:ASP:H | 10 | 0.9 |
| (2,1284) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:66:ASN:H | 4 | 0.9 |
| (2,1284) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:66:ASN:H | 10 | 0.9 |
| (2,1284) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:66:ASN:H | 11 | 0.9 |
| (2,128) | 1:A:7:THR:HB | 1:A:8:ASP:HA | 2 | 0.9 |
| (2,128) | 1:A:7:THR:HB | 1:A:8:ASP:HA | 10 | 0.9 |
| (2,128) | 1:A:7:THR:HB | 1:A:8:ASP:HA | 12 | 0.9 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,128) | 1:A:7:THR:HB | 1:A:8:ASP:HA | 14 | 0.9 |
| (2,1268) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HB2 | 4 | 0.9 |
| (2,1228) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:63:GLU:H | 8 | 0.9 |
| (2,1193) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:65:ARG:HB2 | 10 | 0.9 |
| (2,1055) | 1:A:52:LYS:HG3 | 1:A:52:LYS:H | 10 | 0.9 |
| (1,609) | 1:A:67:THR:H | 1:A:68:LEU:HB3 | 9 | 0.9 |
| (1,444) | 1:A:75:ASP:H | 1:A:74:LEU:HD21 | 3 | 0.9 |
| (1,444) | 1:A:75:ASP:H | 1:A:74:LEU:HD22 | 3 | 0.9 |
| (1,444) | 1:A:75:ASP:H | 1:A:74:LEU:HD23 | 3 | 0.9 |
| (1,326) | 1:A:61:ALA:H | 1:A:64:LEU:HB3 | 11 | 0.9 |
| (1,282) | 1:A:14:ASN:HD21 | 1:A:11:ALA:HA | 1 | 0.9 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD11 | 11 | 0.9 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD12 | 11 | 0.9 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD13 | 11 | 0.9 |
| (2,90) | 1:A:4:SER:HA | 1:A:5:ALA:H | 12 | 0.89 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD11 | 5 | 0.89 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD12 | 5 | 0.89 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD13 | 5 | 0.89 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB1 | 8 | 0.89 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB2 | 8 | 0.89 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB3 | 8 | 0.89 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB1 | 10 | 0.89 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB2 | 10 | 0.89 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB3 | 10 | 0.89 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB1 | 12 | 0.89 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB2 | 12 | 0.89 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB3 | 12 | 0.89 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB1 | 13 | 0.89 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB2 | 13 | 0.89 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB3 | 13 | 0.89 |
| (2,682) | 1:A:62:LEU:HD11 | 1:A:78:PRO:HB2 | 8 | 0.89 |
| (2,682) | 1:A:62:LEU:HD12 | 1:A:78:PRO:HB2 | 8 | 0.89 |
| (2,682) | 1:A:62:LEU:HD13 | 1:A:78:PRO:HB2 | 8 | 0.89 |
| (2,682) | 1:A:62:LEU:HD11 | 1:A:78:PRO:HB2 | 16 | 0.89 |
| (2,682) | 1:A:62:LEU:HD12 | 1:A:78:PRO:HB2 | 16 | 0.89 |
| (2,682) | 1:A:62:LEU:HD13 | 1:A:78:PRO:HB2 | 16 | 0.89 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:22:GLN:HB2 | 16 | 0.89 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 16 | 0.89 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:22:GLN:HB2 | 16 | 0.89 |
| (2,469) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HA | 11 | 0.89 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD21 | 5 | 0.89 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD22 | 5 | 0.89 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD23 | 5 | 0.89 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD21 | 16 | 0.89 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD22 | 16 | 0.89 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD23 | 16 | 0.89 |
| (2,448) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:36:VAL:HA | 7 | 0.89 |
| (2,338) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 4 | 0.89 |
| (2,320) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:51:PHE:HA | 9 | 0.89 |
| (2,282) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:21:GLN:HA | 2 | 0.89 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD21 | 1 | 0.89 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD22 | 1 | 0.89 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD23 | 1 | 0.89 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD21 | 1 | 0.89 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD22 | 1 | 0.89 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD23 | 1 | 0.89 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD21 | 1 | 0.89 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD22 | 1 | 0.89 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD23 | 1 | 0.89 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD21 | 14 | 0.89 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD22 | 14 | 0.89 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD23 | 14 | 0.89 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD21 | 14 | 0.89 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD22 | 14 | 0.89 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD23 | 14 | 0.89 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD21 | 14 | 0.89 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD22 | 14 | 0.89 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD23 | 14 | 0.89 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD21 | 6 | 0.89 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD22 | 6 | 0.89 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD23 | 6 | 0.89 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:4:SER:HB2 | 3 | 0.89 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:4:SER:HB2 | 3 | 0.89 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:4:SER:HB2 | 3 | 0.89 |
| (2,1809) | 1:A:101:SER:HB2 | 1:A:100:GLN:H | 16 | 0.89 |
| (2,1799) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:100:GLN:H | 10 | 0.89 |
| (2,1799) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:100:GLN:H | 10 | 0.89 |
| (2,1799) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:100:GLN:H | 10 | 0.89 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:84:HIS:HB3 | 11 | 0.89 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:84:HIS:HB3 | 11 | 0.89 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:84:HIS:HB3 | 11 | 0.89 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:84:HIS:HB3 | 15 | 0.89 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:84:HIS:HB3 | 15 | 0.89 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:84:HIS:HB3 | 15 | 0.89 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1518) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:21:GLN:HG3 | 6 | 0.89 |
| (2,1518) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:21:GLN:HG3 | 8 | 0.89 |
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:39:HIS:HB2 | 4 | 0.89 |
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:39:HIS:HB2 | 4 | 0.89 |
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:39:HIS:HB2 | 4 | 0.89 |
| (2,130) | 1:A:7:THR:HB | 1:A:8:ASP:H | 2 | 0.89 |
| (2,130) | 1:A:7:THR:HB | 1:A:8:ASP:H | 4 | 0.89 |
| (2,128) | 1:A:7:THR:HB | 1:A:8:ASP:HA | 1 | 0.89 |
| (2,1268) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HB2 | 5 | 0.89 |
| (2,1268) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HB2 | 6 | 0.89 |
| (2,1268) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HB2 | 14 | 0.89 |
| (2,1193) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:65:ARG:HB2 | 6 | 0.89 |
| (2,1055) | 1:A:52:LYS:HG3 | 1:A:52:LYS:H | 13 | 0.89 |
| (1,609) | 1:A:67:THR:H | 1:A:68:LEU:HB3 | 15 | 0.89 |
| (1,605) | 1:A:43:GLU:H | 1:A:42:PRO:HD2 | 4 | 0.89 |
| (1,444) | 1:A:75:ASP:H | 1:A:74:LEU:HD21 | 5 | 0.89 |
| (1,444) | 1:A:75:ASP:H | 1:A:74:LEU:HD22 | 5 | 0.89 |
| (1,444) | 1:A:75:ASP:H | 1:A:74:LEU:HD23 | 5 | 0.89 |
| (1,422) | 1:A:66:ASN:HD21 | 1:A:66:ASN:H | 16 | 0.89 |
| (1,392) | 1:A:38:GLY:H | 1:A:37:LEU:HB2 | 3 | 0.89 |
| (1,326) | 1:A:61:ALA:H | 1:A:64:LEU:HB3 | 3 | 0.89 |
| (1,282) | 1:A:14:ASN:HD21 | 1:A:11:ALA:HA | 6 | 0.89 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD11 | 5 | 0.89 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD12 | 5 | 0.89 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD13 | 5 | 0.89 |
| (2,913) | 1:A:43:GLU:HG2 | 1:A:42:PRO:HA | 14 | 0.88 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:40:HIS:HD2 | 16 | 0.88 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:40:HIS:HD2 | 16 | 0.88 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:40:HIS:HD2 | 16 | 0.88 |
| (2,90) | 1:A:4:SER:HA | 1:A:5:ALA:H | 7 | 0.88 |
| (2,891) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:43:GLU:H | 11 | 0.88 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD11 | 7 | 0.88 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD12 | 7 | 0.88 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD13 | 7 | 0.88 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD11 | 12 | 0.88 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD12 | 12 | 0.88 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD13 | 12 | 0.88 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB1 | 16 | 0.88 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB2 | 16 | 0.88 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB3 | 16 | 0.88 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD11 | 10 | 0.88 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD12 | 10 | 0.88 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD13 | 10 | 0.88 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD11 | 10 | 0.88 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD12 | 10 | 0.88 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD13 | 10 | 0.88 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD11 | 10 | 0.88 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD12 | 10 | 0.88 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD13 | 10 | 0.88 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD11 | 13 | 0.88 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD12 | 13 | 0.88 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD13 | 13 | 0.88 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD11 | 13 | 0.88 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD12 | 13 | 0.88 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD13 | 13 | 0.88 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD11 | 13 | 0.88 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD12 | 13 | 0.88 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD13 | 13 | 0.88 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 9 | 0.88 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 9 | 0.88 |
| (2,656) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 9 | 0.88 |
| (2,639) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG21 | 2 | 0.88 |
| (2,639) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG22 | 2 | 0.88 |
| (2,639) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG23 | 2 | 0.88 |
| (2,639) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG21 | 11 | 0.88 |
| (2,639) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG22 | 11 | 0.88 |
| (2,639) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG23 | 11 | 0.88 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD21 | 5 | 0.88 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD22 | 5 | 0.88 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD23 | 5 | 0.88 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 5 | 0.88 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 5 | 0.88 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 5 | 0.88 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD21 | 4 | 0.88 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD22 | 4 | 0.88 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD23 | 4 | 0.88 |
| (2,461) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HD21 | 12 | 0.88 |
| (2,461) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HD22 | 12 | 0.88 |
| (2,461) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:16:LEU:HD23 | 12 | 0.88 |
| (2,444) | 1:A:21:GLN:HG3 | 1:A:21:GLN:H | 7 | 0.88 |
| (2,444) | 1:A:21:GLN:HG3 | 1:A:21:GLN:H | 11 | 0.88 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 9 | 0.88 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 9 | 0.88 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 9 | 0.88 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,381) | 1:A:18:PRO:HB2 | 1:A:19:GLN:H | 7 | 0.88 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD21 | 6 | 0.88 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD22 | 6 | 0.88 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD23 | 6 | 0.88 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD21 | 6 | 0.88 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD22 | 6 | 0.88 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD23 | 6 | 0.88 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD21 | 6 | 0.88 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD22 | 6 | 0.88 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD23 | 6 | 0.88 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD21 | 1 | 0.88 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD22 | 1 | 0.88 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD23 | 1 | 0.88 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD21 | 2 | 0.88 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD22 | 2 | 0.88 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD23 | 2 | 0.88 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD21 | 3 | 0.88 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD22 | 3 | 0.88 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD23 | 3 | 0.88 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD21 | 4 | 0.88 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD22 | 4 | 0.88 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD23 | 4 | 0.88 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD21 | 5 | 0.88 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD22 | 5 | 0.88 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD23 | 5 | 0.88 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD21 | 7 | 0.88 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD22 | 7 | 0.88 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD23 | 7 | 0.88 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD21 | 8 | 0.88 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD22 | 8 | 0.88 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD23 | 8 | 0.88 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD21 | 10 | 0.88 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD22 | 10 | 0.88 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD23 | 10 | 0.88 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD21 | 11 | 0.88 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD22 | 11 | 0.88 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD23 | 11 | 0.88 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD21 | 12 | 0.88 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD22 | 12 | 0.88 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD23 | 12 | 0.88 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD21 | 13 | 0.88 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD22 | 13 | 0.88 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD23 | 13 | 0.88 |
| (2,1809) | 1:A:101:SER:HB2 | 1:A:100:GLN:H | 12 | 0.88 |
| (2,1799) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:100:GLN:H | 16 | 0.88 |
| (2,1799) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:100:GLN:H | 16 | 0.88 |
| (2,1799) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:100:GLN:H | 16 | 0.88 |
| (2,1765) | 1:A:97:ARG:HD3 | 1:A:97:ARG:HA | 4 | 0.88 |
| (2,1765) | 1:A:97:ARG:HD3 | 1:A:97:ARG:HA | 10 | 0.88 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:91:THR:HA | 9 | 0.88 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:91:THR:HA | 9 | 0.88 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:91:THR:HA | 9 | 0.88 |
| (2,1672) | 1:A:51:PHE:HZ | 1:A:90:LEU:HB2 | 8 | 0.88 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:84:HIS:HB3 | 3 | 0.88 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:84:HIS:HB3 | 3 | 0.88 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:84:HIS:HB3 | 3 | 0.88 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:84:HIS:HB3 | 5 | 0.88 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:84:HIS:HB3 | 5 | 0.88 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:84:HIS:HB3 | 5 | 0.88 |
| (2,1518) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:21:GLN:HG3 | 9 | 0.88 |
| (2,1518) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:21:GLN:HG3 | 13 | 0.88 |
| (2,1518) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:21:GLN:HG3 | 14 | 0.88 |
| (2,1429) | 1:A:102:HIS:HD2 | 1:A:101:SER:HB2 | 5 | 0.88 |
| (2,1343) | 1:A:70:HIS:HA | 1:A:73:GLY:HA3 | 4 | 0.88 |
| (2,1343) | 1:A:70:HIS:HA | 1:A:73:GLY:HA3 | 11 | 0.88 |
| (2,1284) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:66:ASN:H | 3 | 0.88 |
| (2,1284) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:66:ASN:H | 13 | 0.88 |
| (2,128) | 1:A:7:THR:HB | 1:A:8:ASP:HA | 8 | 0.88 |
| (2,128) | 1:A:7:THR:HB | 1:A:8:ASP:HA | 16 | 0.88 |
| (2,1268) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HB2 | 1 | 0.88 |
| (2,1268) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HB2 | 13 | 0.88 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:85:PRO:HA | 4 | 0.88 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:85:PRO:HA | 4 | 0.88 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:85:PRO:HA | 4 | 0.88 |
| (2,1055) | 1:A:52:LYS:HG3 | 1:A:52:LYS:H | 1 | 0.88 |
| (2,1055) | 1:A:52:LYS:HG3 | 1:A:52:LYS:H | 3 | 0.88 |
| (1,609) | 1:A:67:THR:H | 1:A:68:LEU:HB3 | 2 | 0.88 |
| (1,609) | 1:A:67:THR:H | 1:A:68:LEU:HB3 | 8 | 0.88 |
| (1,609) | 1:A:67:THR:H | 1:A:68:LEU:HB3 | 14 | 0.88 |
| (1,422) | 1:A:66:ASN:HD21 | 1:A:66:ASN:H | 4 | 0.88 |
| (1,205) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:47:PRO:HD2 | 3 | 0.88 |
| (1,205) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:47:PRO:HD2 | 11 | 0.88 |
| (1,191) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:65:ARG:HB2 | 12 | 0.88 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD11 | 13 | 0.88 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD12 | 13 | 0.88 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD13 | 13 | 0.88 |
| (2,90) | 1:A:4:SER:HA | 1:A:5:ALA:H | 1 | 0.87 |
| (2,892) | 1:A:43:GLU:HG2 | 1:A:41:THR:HB | 1 | 0.87 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD11 | 2 | 0.87 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD12 | 2 | 0.87 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD13 | 2 | 0.87 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD11 | 15 | 0.87 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD12 | 15 | 0.87 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD13 | 15 | 0.87 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB1 | 2 | 0.87 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB2 | 2 | 0.87 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB3 | 2 | 0.87 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:27:THR:HB | 9 | 0.87 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:27:THR:HB | 9 | 0.87 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:27:THR:HB | 9 | 0.87 |
| (2,686) | 1:A:62:LEU:HD11 | 1:A:66:ASN:HD21 | 16 | 0.87 |
| (2,686) | 1:A:62:LEU:HD12 | 1:A:66:ASN:HD21 | 16 | 0.87 |
| (2,686) | 1:A:62:LEU:HD13 | 1:A:66:ASN:HD21 | 16 | 0.87 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD11 | 2 | 0.87 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD12 | 2 | 0.87 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD13 | 2 | 0.87 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD11 | 2 | 0.87 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD12 | 2 | 0.87 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD13 | 2 | 0.87 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD11 | 2 | 0.87 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD12 | 2 | 0.87 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD13 | 2 | 0.87 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD11 | 15 | 0.87 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD12 | 15 | 0.87 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD13 | 15 | 0.87 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD11 | 15 | 0.87 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD12 | 15 | 0.87 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD13 | 15 | 0.87 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD11 | 15 | 0.87 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD12 | 15 | 0.87 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD13 | 15 | 0.87 |
| (2,639) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG21 | 10 | 0.87 |
| (2,639) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG22 | 10 | 0.87 |
| (2,639) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG23 | 10 | 0.87 |
| (2,381) | 1:A:18:PRO:HB2 | 1:A:19:GLN:H | 10 | 0.87 |
| (2,338) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 1 | 0.87 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,338) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 6 | 0.87 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 4 | 0.87 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 4 | 0.87 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 4 | 0.87 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 6 | 0.87 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 6 | 0.87 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 6 | 0.87 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 9 | 0.87 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 9 | 0.87 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 9 | 0.87 |
| (2,282) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:21:GLN:HA | 4 | 0.87 |
| (2,282) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:21:GLN:HA | 5 | 0.87 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 7 | 0.87 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 7 | 0.87 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 7 | 0.87 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 15 | 0.87 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 15 | 0.87 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 15 | 0.87 |
| (2,203) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HB2 | 13 | 0.87 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD21 | 2 | 0.87 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD22 | 2 | 0.87 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD23 | 2 | 0.87 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD21 | 2 | 0.87 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD22 | 2 | 0.87 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD23 | 2 | 0.87 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD21 | 2 | 0.87 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD22 | 2 | 0.87 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD23 | 2 | 0.87 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD21 | 5 | 0.87 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD22 | 5 | 0.87 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD23 | 5 | 0.87 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD21 | 5 | 0.87 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD22 | 5 | 0.87 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD23 | 5 | 0.87 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD21 | 5 | 0.87 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD22 | 5 | 0.87 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD23 | 5 | 0.87 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD21 | 10 | 0.87 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD22 | 10 | 0.87 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD23 | 10 | 0.87 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD21 | 10 | 0.87 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD22 | 10 | 0.87 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD23 | 10 | 0.87 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD21 | 10 | 0.87 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD22 | 10 | 0.87 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD23 | 10 | 0.87 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD21 | 12 | 0.87 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD22 | 12 | 0.87 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD23 | 12 | 0.87 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD21 | 12 | 0.87 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD22 | 12 | 0.87 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD23 | 12 | 0.87 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD21 | 12 | 0.87 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD22 | 12 | 0.87 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD23 | 12 | 0.87 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD11 | 14 | 0.87 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD12 | 14 | 0.87 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD13 | 14 | 0.87 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD21 | 9 | 0.87 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD22 | 9 | 0.87 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD23 | 9 | 0.87 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD21 | 14 | 0.87 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD22 | 14 | 0.87 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD23 | 14 | 0.87 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD21 | 15 | 0.87 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD22 | 15 | 0.87 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD23 | 15 | 0.87 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD21 | 16 | 0.87 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD22 | 16 | 0.87 |
| (2,1853) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HD23 | 16 | 0.87 |
| (2,1809) | 1:A:101:SER:HB2 | 1:A:100:GLN:H | 7 | 0.87 |
| (2,1799) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:100:GLN:H | 11 | 0.87 |
| (2,1799) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:100:GLN:H | 11 | 0.87 |
| (2,1799) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:100:GLN:H | 11 | 0.87 |
| (2,1768) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:96:THR:HB | 15 | 0.87 |
| (2,1696) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:25:LEU:HB3 | 8 | 0.87 |
| (2,1624) | 1:A:87:PRO:HB2 | 1:A:26:ALA:HA | 3 | 0.87 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:84:HIS:HB3 | 2 | 0.87 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:84:HIS:HB3 | 2 | 0.87 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:84:HIS:HB3 | 2 | 0.87 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:84:HIS:HB3 | 16 | 0.87 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:84:HIS:HB3 | 16 | 0.87 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:84:HIS:HB3 | 16 | 0.87 |
| (2,1518) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:21:GLN:HG3 | 12 | 0.87 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,141) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:43:GLU:HG2 | 7 | 0.87 |
| (2,141) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:43:GLU:HG2 | 7 | 0.87 |
| (2,141) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:43:GLU:HG2 | 7 | 0.87 |
| (2,1343) | 1:A:70:HIS:HA | 1:A:73:GLY:HA3 | 16 | 0.87 |
| (2,128) | 1:A:7:THR:HB | 1:A:8:ASP:HA | 3 | 0.87 |
| (2,128) | 1:A:7:THR:HB | 1:A:8:ASP:HA | 7 | 0.87 |
| (2,128) | 1:A:7:THR:HB | 1:A:8:ASP:HA | 9 | 0.87 |
| (2,1268) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HB2 | 2 | 0.87 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD21 | 16 | 0.87 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD22 | 16 | 0.87 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD23 | 16 | 0.87 |
| (2,1055) | 1:A:52:LYS:HG3 | 1:A:52:LYS:H | 8 | 0.87 |
| (2,1020) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HB2 | 16 | 0.87 |
| (1,609) | 1:A:67:THR:H | 1:A:68:LEU:HB3 | 10 | 0.87 |
| (1,471) | 1:A:8:ASP:H | 1:A:9:LEU:H | 13 | 0.87 |
| (1,366) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG2 | 12 | 0.87 |
| (1,205) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:47:PRO:HD2 | 16 | 0.87 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD11 | 8 | 0.87 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD12 | 8 | 0.87 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD13 | 8 | 0.87 |
| (2,90) | 1:A:4:SER:HA | 1:A:5:ALA:H | 13 | 0.86 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB1 | 5 | 0.86 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB2 | 5 | 0.86 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB3 | 5 | 0.86 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB1 | 6 | 0.86 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB2 | 6 | 0.86 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB3 | 6 | 0.86 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:27:THR:HB | 5 | 0.86 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:27:THR:HB | 5 | 0.86 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:27:THR:HB | 5 | 0.86 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:27:THR:HB | 7 | 0.86 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:27:THR:HB | 7 | 0.86 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:27:THR:HB | 7 | 0.86 |
| (2,686) | 1:A:62:LEU:HD11 | 1:A:66:ASN:HD21 | 4 | 0.86 |
| (2,686) | 1:A:62:LEU:HD12 | 1:A:66:ASN:HD21 | 4 | 0.86 |
| (2,686) | 1:A:62:LEU:HD13 | 1:A:66:ASN:HD21 | 4 | 0.86 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD11 | 3 | 0.86 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD12 | 3 | 0.86 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD13 | 3 | 0.86 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD11 | 3 | 0.86 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD12 | 3 | 0.86 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD13 | 3 | 0.86 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD11 | 3 | 0.86 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD12 | 3 | 0.86 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD13 | 3 | 0.86 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD11 | 8 | 0.86 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD12 | 8 | 0.86 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD13 | 8 | 0.86 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD11 | 8 | 0.86 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD12 | 8 | 0.86 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD13 | 8 | 0.86 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD11 | 8 | 0.86 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD12 | 8 | 0.86 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD13 | 8 | 0.86 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD21 | 8 | 0.86 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD22 | 8 | 0.86 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD23 | 8 | 0.86 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 8 | 0.86 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 8 | 0.86 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 8 | 0.86 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD21 | 9 | 0.86 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD22 | 9 | 0.86 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD23 | 9 | 0.86 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 9 | 0.86 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 9 | 0.86 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 9 | 0.86 |
| (2,469) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HA | 9 | 0.86 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD21 | 2 | 0.86 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD22 | 2 | 0.86 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD23 | 2 | 0.86 |
| (2,381) | 1:A:18:PRO:HB2 | 1:A:19:GLN:H | 1 | 0.86 |
| (2,345) | 1:A:15:GLY:HA2 | 1:A:15:GLY:H | 15 | 0.86 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 1 | 0.86 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 1 | 0.86 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 1 | 0.86 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 12 | 0.86 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 12 | 0.86 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 12 | 0.86 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 16 | 0.86 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 16 | 0.86 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 16 | 0.86 |
| (2,216) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:12:ARG:HB2 | 3 | 0.86 |
| (2,216) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:12:ARG:HB2 | 13 | 0.86 |
| (2,203) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HB2 | 6 | 0.86 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,203) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HB2 | 16 | 0.86 |
| (2,1920) | 1:A:76:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 12 | 0.86 |
| (2,1864) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:ASN:HA | 13 | 0.86 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:ASN:HA | 4 | 0.86 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:ASN:HA | 4 | 0.86 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:ASN:HA | 4 | 0.86 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG21 | 4 | 0.86 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG22 | 4 | 0.86 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG23 | 4 | 0.86 |
| (2,1799) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:100:GLN:H | 3 | 0.86 |
| (2,1799) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:100:GLN:H | 3 | 0.86 |
| (2,1799) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:100:GLN:H | 3 | 0.86 |
| (2,1799) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:100:GLN:H | 7 | 0.86 |
| (2,1799) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:100:GLN:H | 7 | 0.86 |
| (2,1799) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:100:GLN:H | 7 | 0.86 |
| (2,1765) | 1:A:97:ARG:HD3 | 1:A:97:ARG:HA | 15 | 0.86 |
| (2,1670) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:90:LEU:HB2 | 1 | 0.86 |
| (2,1670) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:90:LEU:HB2 | 2 | 0.86 |
| (2,1670) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:90:LEU:HB2 | 3 | 0.86 |
| (2,1670) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:90:LEU:HB2 | 4 | 0.86 |
| (2,1670) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:90:LEU:HB2 | 5 | 0.86 |
| (2,1670) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:90:LEU:HB2 | 6 | 0.86 |
| (2,1670) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:90:LEU:HB2 | 7 | 0.86 |
| (2,1670) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:90:LEU:HB2 | 10 | 0.86 |
| (2,1670) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:90:LEU:HB2 | 11 | 0.86 |
| (2,1670) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:90:LEU:HB2 | 12 | 0.86 |
| (2,1670) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:90:LEU:HB2 | 13 | 0.86 |
| (2,1670) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:90:LEU:HB2 | 14 | 0.86 |
| (2,1670) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:90:LEU:HB2 | 15 | 0.86 |
| (2,1670) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:90:LEU:HB2 | 16 | 0.86 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:84:HIS:HB3 | 14 | 0.86 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:84:HIS:HB3 | 14 | 0.86 |
| (2,1578) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:84:HIS:HB3 | 14 | 0.86 |
| (2,1518) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:21:GLN:HG3 | 4 | 0.86 |
| (2,1518) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:21:GLN:HG3 | 5 | 0.86 |
| (2,1515) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:16:LEU:HB2 | 1 | 0.86 |
| (2,1515) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:16:LEU:HB2 | 3 | 0.86 |
| (2,1515) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:16:LEU:HB2 | 9 | 0.86 |
| (2,1515) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:16:LEU:HB2 | 10 | 0.86 |
| (2,1515) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:16:LEU:HB2 | 11 | 0.86 |
| (2,1515) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:16:LEU:HB2 | 12 | 0.86 |
| (2,1515) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:16:LEU:HB2 | 13 | 0.86 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1515) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:16:LEU:HB2 | 14 | 0.86 |
| (2,1515) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:16:LEU:HB2 | 15 | 0.86 |
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:39:HIS:HB2 | 15 | 0.86 |
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:39:HIS:HB2 | 15 | 0.86 |
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:39:HIS:HB2 | 15 | 0.86 |
| (2,1343) | 1:A:70:HIS:HA | 1:A:73:GLY:HA3 | 6 | 0.86 |
| (2,130) | 1:A:7:THR:HB | 1:A:8:ASP:H | 1 | 0.86 |
| (2,130) | 1:A:7:THR:HB | 1:A:8:ASP:H | 7 | 0.86 |
| (2,1284) | 1:A:65:ARG:HB3 | 1:A:66:ASN:H | 12 | 0.86 |
| (2,128) | 1:A:7:THR:HB | 1:A:8:ASP:HA | 6 | 0.86 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG11 | 1 | 0.86 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG12 | 1 | 0.86 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG13 | 1 | 0.86 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG11 | 2 | 0.86 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG12 | 2 | 0.86 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG13 | 2 | 0.86 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG11 | 10 | 0.86 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG12 | 10 | 0.86 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG13 | 10 | 0.86 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG11 | 13 | 0.86 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG12 | 13 | 0.86 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG13 | 13 | 0.86 |
| (2,1212) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:ASN:HD21 | 1 | 0.86 |
| (2,1193) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:65:ARG:HB2 | 9 | 0.86 |
| (2,1055) | 1:A:52:LYS:HG3 | 1:A:52:LYS:H | 6 | 0.86 |
| (1,609) | 1:A:67:THR:H | 1:A:68:LEU:HB3 | 1 | 0.86 |
| (1,609) | 1:A:67:THR:H | 1:A:68:LEU:HB3 | 6 | 0.86 |
| (1,605) | 1:A:43:GLU:H | 1:A:42:PRO:HD2 | 5 | 0.86 |
| (1,282) | 1:A:14:ASN:HD21 | 1:A:11:ALA:HA | 4 | 0.86 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD11 | 4 | 0.86 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD12 | 4 | 0.86 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD13 | 4 | 0.86 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD11 | 14 | 0.86 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD12 | 14 | 0.86 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD13 | 14 | 0.86 |
| (2,923) | 1:A:101:SER:HB2 | 1:A:102:HIS:H | 8 | 0.85 |
| (2,90) | 1:A:4:SER:HA | 1:A:5:ALA:H | 4 | 0.85 |
| (2,891) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:43:GLU:H | 14 | 0.85 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB1 | 3 | 0.85 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB2 | 3 | 0.85 |
| (2,743) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HB3 | 3 | 0.85 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG21 | 3 | 0.85 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG22 | 3 | 0.85 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG23 | 3 | 0.85 |
| (2,682) | 1:A:62:LEU:HD11 | 1:A:78:PRO:HB2 | 4 | 0.85 |
| (2,682) | 1:A:62:LEU:HD12 | 1:A:78:PRO:HB2 | 4 | 0.85 |
| (2,682) | 1:A:62:LEU:HD13 | 1:A:78:PRO:HB2 | 4 | 0.85 |
| (2,682) | 1:A:62:LEU:HD11 | 1:A:78:PRO:HB2 | 5 | 0.85 |
| (2,682) | 1:A:62:LEU:HD12 | 1:A:78:PRO:HB2 | 5 | 0.85 |
| (2,682) | 1:A:62:LEU:HD13 | 1:A:78:PRO:HB2 | 5 | 0.85 |
| (2,682) | 1:A:62:LEU:HD11 | 1:A:78:PRO:HB2 | 10 | 0.85 |
| (2,682) | 1:A:62:LEU:HD12 | 1:A:78:PRO:HB2 | 10 | 0.85 |
| (2,682) | 1:A:62:LEU:HD13 | 1:A:78:PRO:HB2 | 10 | 0.85 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:22:GLN:HB2 | 3 | 0.85 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 3 | 0.85 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:22:GLN:HB2 | 3 | 0.85 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:22:GLN:HB2 | 6 | 0.85 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 6 | 0.85 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:22:GLN:HB2 | 6 | 0.85 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:22:GLN:HB2 | 14 | 0.85 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 14 | 0.85 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:22:GLN:HB2 | 14 | 0.85 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD21 | 8 | 0.85 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD22 | 8 | 0.85 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD23 | 8 | 0.85 |
| (2,424) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:HB3 | 2 | 0.85 |
| (2,424) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:HB3 | 4 | 0.85 |
| (2,424) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:HB3 | 5 | 0.85 |
| (2,424) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:HB3 | 6 | 0.85 |
| (2,424) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:HB3 | 10 | 0.85 |
| (2,424) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:HB3 | 11 | 0.85 |
| (2,424) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:HB3 | 12 | 0.85 |
| (2,424) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:HB3 | 13 | 0.85 |
| (2,424) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:HB3 | 14 | 0.85 |
| (2,424) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:HB3 | 15 | 0.85 |
| (2,424) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:HB3 | 16 | 0.85 |
| (2,381) | 1:A:18:PRO:HB2 | 1:A:19:GLN:H | 3 | 0.85 |
| (2,381) | 1:A:18:PRO:HB2 | 1:A:19:GLN:H | 8 | 0.85 |
| (2,381) | 1:A:18:PRO:HB2 | 1:A:19:GLN:H | 12 | 0.85 |
| (2,345) | 1:A:15:GLY:HA2 | 1:A:15:GLY:H | 1 | 0.85 |
| (2,345) | 1:A:15:GLY:HA2 | 1:A:15:GLY:H | 7 | 0.85 |
| (2,338) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 15 | 0.85 |
| (2,338) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 16 | 0.85 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 2 | 0.85 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 2 | 0.85 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 2 | 0.85 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 5 | 0.85 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 5 | 0.85 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 5 | 0.85 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 7 | 0.85 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 7 | 0.85 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 7 | 0.85 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 13 | 0.85 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 13 | 0.85 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 13 | 0.85 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 15 | 0.85 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 15 | 0.85 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 15 | 0.85 |
| (2,203) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HB2 | 8 | 0.85 |
| (2,1921) | 1:A:76:LEU:HB3 | 1:A:76:LEU:HB2 | 1 | 0.85 |
| (2,1921) | 1:A:76:LEU:HB3 | 1:A:76:LEU:HB2 | 2 | 0.85 |
| (2,1921) | 1:A:76:LEU:HB3 | 1:A:76:LEU:HB2 | 3 | 0.85 |
| (2,1921) | 1:A:76:LEU:HB3 | 1:A:76:LEU:HB2 | 4 | 0.85 |
| (2,1921) | 1:A:76:LEU:HB3 | 1:A:76:LEU:HB2 | 6 | 0.85 |
| (2,1921) | 1:A:76:LEU:HB3 | 1:A:76:LEU:HB2 | 7 | 0.85 |
| (2,1921) | 1:A:76:LEU:HB3 | 1:A:76:LEU:HB2 | 8 | 0.85 |
| (2,1921) | 1:A:76:LEU:HB3 | 1:A:76:LEU:HB2 | 9 | 0.85 |
| (2,1921) | 1:A:76:LEU:HB3 | 1:A:76:LEU:HB2 | 10 | 0.85 |
| (2,1921) | 1:A:76:LEU:HB3 | 1:A:76:LEU:HB2 | 11 | 0.85 |
| (2,1921) | 1:A:76:LEU:HB3 | 1:A:76:LEU:HB2 | 12 | 0.85 |
| (2,1921) | 1:A:76:LEU:HB3 | 1:A:76:LEU:HB2 | 13 | 0.85 |
| (2,1921) | 1:A:76:LEU:HB3 | 1:A:76:LEU:HB2 | 14 | 0.85 |
| (2,1921) | 1:A:76:LEU:HB3 | 1:A:76:LEU:HB2 | 15 | 0.85 |
| (2,1921) | 1:A:76:LEU:HB3 | 1:A:76:LEU:HB2 | 16 | 0.85 |
| (2,191) | 1:A:9:LEU:HA | 1:A:12:ARG:HD3 | 15 | 0.85 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD11 | 2 | 0.85 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD12 | 2 | 0.85 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD13 | 2 | 0.85 |
| (2,1871) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:15:GLY:HA2 | 6 | 0.85 |
| (2,1871) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:15:GLY:HA2 | 6 | 0.85 |
| (2,1871) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:15:GLY:HA2 | 6 | 0.85 |
| (2,183) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:11:ALA:H | 9 | 0.85 |
| (2,1799) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:100:GLN:H | 15 | 0.85 |
| (2,1799) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:100:GLN:H | 15 | 0.85 |
| (2,1799) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:100:GLN:H | 15 | 0.85 |
| (2,1768) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:96:THR:HB | 1 | 0.85 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD11 | 14 | 0.85 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD12 | 14 | 0.85 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD13 | 14 | 0.85 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD11 | 14 | 0.85 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD12 | 14 | 0.85 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD13 | 14 | 0.85 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD11 | 14 | 0.85 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD12 | 14 | 0.85 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD13 | 14 | 0.85 |
| (2,1670) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:90:LEU:HB2 | 8 | 0.85 |
| (2,1670) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:90:LEU:HB2 | 9 | 0.85 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:92:GLN:HB3 | 3 | 0.85 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:92:GLN:HB3 | 3 | 0.85 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:92:GLN:HB3 | 3 | 0.85 |
| (2,1515) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:16:LEU:HB2 | 2 | 0.85 |
| (2,1515) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:16:LEU:HB2 | 4 | 0.85 |
| (2,1515) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:16:LEU:HB2 | 5 | 0.85 |
| (2,1515) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:16:LEU:HB2 | 6 | 0.85 |
| (2,1515) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:16:LEU:HB2 | 7 | 0.85 |
| (2,1515) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:16:LEU:HB2 | 8 | 0.85 |
| (2,1515) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:16:LEU:HB2 | 16 | 0.85 |
| (2,141) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:43:GLU:HG2 | 9 | 0.85 |
| (2,141) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:43:GLU:HG2 | 9 | 0.85 |
| (2,141) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:43:GLU:HG2 | 9 | 0.85 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB1 | 7 | 0.85 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB2 | 7 | 0.85 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB3 | 7 | 0.85 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD21 | 11 | 0.85 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD22 | 11 | 0.85 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD23 | 11 | 0.85 |
| (2,1343) | 1:A:70:HIS:HA | 1:A:73:GLY:HA3 | 5 | 0.85 |
| (2,1343) | 1:A:70:HIS:HA | 1:A:73:GLY:HA3 | 13 | 0.85 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD11 | 13 | 0.85 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD12 | 13 | 0.85 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD13 | 13 | 0.85 |
| (2,130) | 1:A:7:THR:HB | 1:A:8:ASP:H | 6 | 0.85 |
| (2,130) | 1:A:7:THR:HB | 1:A:8:ASP:H | 14 | 0.85 |
| (2,128) | 1:A:7:THR:HB | 1:A:8:ASP:HA | 5 | 0.85 |
| (2,128) | 1:A:7:THR:HB | 1:A:8:ASP:HA | 15 | 0.85 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG11 | 6 | 0.85 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG12 | 6 | 0.85 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG13 | 6 | 0.85 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1193) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:65:ARG:HB2 | 5 | 0.85 |
| (2,104) | 1:A:5:ALA:HA | 1:A:5:ALA:H | 13 | 0.85 |
| (1,609) | 1:A:67:THR:H | 1:A:68:LEU:HB3 | 4 | 0.85 |
| (1,609) | 1:A:67:THR:H | 1:A:68:LEU:HB3 | 5 | 0.85 |
| (1,609) | 1:A:67:THR:H | 1:A:68:LEU:HB3 | 7 | 0.85 |
| (1,471) | 1:A:8:ASP:H | 1:A:9:LEU:H | 4 | 0.85 |
| (1,422) | 1:A:66:ASN:HD21 | 1:A:66:ASN:H | 7 | 0.85 |
| (1,410) | 1:A:4:SER:H | 1:A:2:ALA:HB1 | 1 | 0.85 |
| (1,410) | 1:A:4:SER:H | 1:A:2:ALA:HB2 | 1 | 0.85 |
| (1,410) | 1:A:4:SER:H | 1:A:2:ALA:HB3 | 1 | 0.85 |
| (1,366) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG2 | 3 | 0.85 |
| (1,234) | 1:A:102:HIS:H | 1:A:101:SER:HB2 | 6 | 0.85 |
| (1,205) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:47:PRO:HD2 | 4 | 0.85 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD11 | 3 | 0.85 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD12 | 3 | 0.85 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD13 | 3 | 0.85 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD11 | 7 | 0.85 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD12 | 7 | 0.85 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD13 | 7 | 0.85 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD11 | 12 | 0.85 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD12 | 12 | 0.85 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD13 | 12 | 0.85 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:27:THR:HB | 2 | 0.84 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:27:THR:HB | 2 | 0.84 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:27:THR:HB | 2 | 0.84 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG21 | 8 | 0.84 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG22 | 8 | 0.84 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG23 | 8 | 0.84 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG21 | 9 | 0.84 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG22 | 9 | 0.84 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG23 | 9 | 0.84 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG21 | 11 | 0.84 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG22 | 11 | 0.84 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG23 | 11 | 0.84 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG21 | 13 | 0.84 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG22 | 13 | 0.84 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG23 | 13 | 0.84 |
| (2,682) | 1:A:62:LEU:HD11 | 1:A:78:PRO:HB2 | 12 | 0.84 |
| (2,682) | 1:A:62:LEU:HD12 | 1:A:78:PRO:HB2 | 12 | 0.84 |
| (2,682) | 1:A:62:LEU:HD13 | 1:A:78:PRO:HB2 | 12 | 0.84 |
| (2,639) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG21 | 3 | 0.84 |
| (2,639) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG22 | 3 | 0.84 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,639) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG23 | 3 | 0.84 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:22:GLN:HB2 | 10 | 0.84 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 10 | 0.84 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:22:GLN:HB2 | 10 | 0.84 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:22:GLN:HB2 | 12 | 0.84 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 12 | 0.84 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:22:GLN:HB2 | 12 | 0.84 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:22:GLN:HB2 | 13 | 0.84 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 13 | 0.84 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:22:GLN:HB2 | 13 | 0.84 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD21 | 1 | 0.84 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD22 | 1 | 0.84 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD23 | 1 | 0.84 |
| (2,454) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:17:SER:H | 15 | 0.84 |
| (2,448) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:36:VAL:HA | 10 | 0.84 |
| (2,448) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:36:VAL:HA | 12 | 0.84 |
| (2,441) | 1:A:21:GLN:HG3 | 1:A:21:GLN:HG2 | 1 | 0.84 |
| (2,441) | 1:A:21:GLN:HG3 | 1:A:21:GLN:HG2 | 3 | 0.84 |
| (2,441) | 1:A:21:GLN:HG3 | 1:A:21:GLN:HG2 | 5 | 0.84 |
| (2,441) | 1:A:21:GLN:HG3 | 1:A:21:GLN:HG2 | 6 | 0.84 |
| (2,441) | 1:A:21:GLN:HG3 | 1:A:21:GLN:HG2 | 7 | 0.84 |
| (2,441) | 1:A:21:GLN:HG3 | 1:A:21:GLN:HG2 | 8 | 0.84 |
| (2,441) | 1:A:21:GLN:HG3 | 1:A:21:GLN:HG2 | 11 | 0.84 |
| (2,424) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:HB3 | 1 | 0.84 |
| (2,424) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:HB3 | 3 | 0.84 |
| (2,424) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:HB3 | 7 | 0.84 |
| (2,424) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:HB3 | 8 | 0.84 |
| (2,424) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:HB3 | 9 | 0.84 |
| (2,381) | 1:A:18:PRO:HB2 | 1:A:19:GLN:H | 14 | 0.84 |
| (2,345) | 1:A:15:GLY:HA2 | 1:A:15:GLY:H | 2 | 0.84 |
| (2,345) | 1:A:15:GLY:HA2 | 1:A:15:GLY:H | 5 | 0.84 |
| (2,31) | 1:A:39:HIS:HD2 | 1:A:37:LEU:HB3 | 4 | 0.84 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG21 | 16 | 0.84 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG22 | 16 | 0.84 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG23 | 16 | 0.84 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 3 | 0.84 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 3 | 0.84 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 3 | 0.84 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 10 | 0.84 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 10 | 0.84 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 10 | 0.84 |
| (2,282) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:21:GLN:HA | 13 | 0.84 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,282) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:21:GLN:HA | 16 | 0.84 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 5 | 0.84 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 5 | 0.84 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 5 | 0.84 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:52:LYS:HB3 | 7 | 0.84 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:52:LYS:HB3 | 7 | 0.84 |
| (2,238) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:52:LYS:HB3 | 7 | 0.84 |
| (2,203) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HB2 | 5 | 0.84 |
| (2,1921) | 1:A:76:LEU:HB3 | 1:A:76:LEU:HB2 | 5 | 0.84 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD21 | 15 | 0.84 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD22 | 15 | 0.84 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD23 | 15 | 0.84 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD21 | 15 | 0.84 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD22 | 15 | 0.84 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD23 | 15 | 0.84 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD21 | 15 | 0.84 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD22 | 15 | 0.84 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD23 | 15 | 0.84 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:ASN:HA | 1 | 0.84 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:ASN:HA | 1 | 0.84 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:ASN:HA | 1 | 0.84 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:ASN:HA | 7 | 0.84 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:ASN:HA | 7 | 0.84 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:ASN:HA | 7 | 0.84 |
| (2,183) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:11:ALA:H | 5 | 0.84 |
| (2,1809) | 1:A:101:SER:HB2 | 1:A:100:GLN:H | 9 | 0.84 |
| (2,1799) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:100:GLN:H | 12 | 0.84 |
| (2,1799) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:100:GLN:H | 12 | 0.84 |
| (2,1799) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:100:GLN:H | 12 | 0.84 |
| (2,1765) | 1:A:97:ARG:HD3 | 1:A:97:ARG:HA | 13 | 0.84 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 8 | 0.84 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 8 | 0.84 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 8 | 0.84 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:92:GLN:HB3 | 13 | 0.84 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:92:GLN:HB3 | 13 | 0.84 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:92:GLN:HB3 | 13 | 0.84 |
| (2,1624) | 1:A:87:PRO:HB2 | 1:A:26:ALA:HA | 16 | 0.84 |
| (2,1518) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:21:GLN:HG3 | 10 | 0.84 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:74:LEU:HB3 | 15 | 0.84 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:74:LEU:HB3 | 15 | 0.84 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:74:LEU:HB3 | 15 | 0.84 |
| (2,141) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:43:GLU:HG2 | 11 | 0.84 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,141) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:43:GLU:HG2 | 11 | 0.84 |
| (2,141) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:43:GLU:HG2 | 11 | 0.84 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD21 | 16 | 0.84 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD22 | 16 | 0.84 |
| (2,1361) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:90:LEU:HD23 | 16 | 0.84 |
| (2,1343) | 1:A:70:HIS:HA | 1:A:73:GLY:HA3 | 15 | 0.84 |
| (2,130) | 1:A:7:THR:HB | 1:A:8:ASP:H | 5 | 0.84 |
| (2,130) | 1:A:7:THR:HB | 1:A:8:ASP:H | 9 | 0.84 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HD21 | 9 | 0.84 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HD22 | 9 | 0.84 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HD23 | 9 | 0.84 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:HD21 | 9 | 0.84 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:HD22 | 9 | 0.84 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:HD23 | 9 | 0.84 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:HD21 | 9 | 0.84 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:HD22 | 9 | 0.84 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:HD23 | 9 | 0.84 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG11 | 3 | 0.84 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG12 | 3 | 0.84 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG13 | 3 | 0.84 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG11 | 5 | 0.84 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG12 | 5 | 0.84 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG13 | 5 | 0.84 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG11 | 7 | 0.84 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG12 | 7 | 0.84 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG13 | 7 | 0.84 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG11 | 16 | 0.84 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG12 | 16 | 0.84 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG13 | 16 | 0.84 |
| (2,1212) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:ASN:HD21 | 9 | 0.84 |
| (2,1200) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:62:LEU:H | 1 | 0.84 |
| (2,1200) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:62:LEU:H | 3 | 0.84 |
| (2,1200) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:62:LEU:H | 15 | 0.84 |
| (2,1193) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:65:ARG:HB2 | 2 | 0.84 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD21 | 10 | 0.84 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD22 | 10 | 0.84 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD23 | 10 | 0.84 |
| (2,104) | 1:A:5:ALA:HA | 1:A:5:ALA:H | 11 | 0.84 |
| (2,104) | 1:A:5:ALA:HA | 1:A:5:ALA:H | 16 | 0.84 |
| (1,445) | 1:A:3:ALA:H | 1:A:3:ALA:HA | 5 | 0.84 |
| (1,445) | 1:A:3:ALA:H | 1:A:3:ALA:HA | 6 | 0.84 |
| (1,445) | 1:A:3:ALA:H | 1:A:3:ALA:HA | 8 | 0.84 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,445) | 1:A:3:ALA:H | 1:A:3:ALA:HA | 15 | 0.84 |
| (1,127) | 1:A:69:THR:H | 1:A:68:LEU:HB2 | 5 | 0.84 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD11 | 2 | 0.84 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD12 | 2 | 0.84 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD13 | 2 | 0.84 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD11 | 6 | 0.84 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD12 | 6 | 0.84 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD13 | 6 | 0.84 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD11 | 1 | 0.83 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD12 | 1 | 0.83 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD13 | 1 | 0.83 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD11 | 9 | 0.83 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD12 | 9 | 0.83 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD13 | 9 | 0.83 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD11 | 14 | 0.83 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD12 | 14 | 0.83 |
| (2,8) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD13 | 14 | 0.83 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG21 | 1 | 0.83 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG22 | 1 | 0.83 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG23 | 1 | 0.83 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG21 | 2 | 0.83 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG22 | 2 | 0.83 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG23 | 2 | 0.83 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG21 | 4 | 0.83 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG22 | 4 | 0.83 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG23 | 4 | 0.83 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG21 | 5 | 0.83 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG22 | 5 | 0.83 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG23 | 5 | 0.83 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG21 | 6 | 0.83 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG22 | 6 | 0.83 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG23 | 6 | 0.83 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG21 | 7 | 0.83 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG22 | 7 | 0.83 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG23 | 7 | 0.83 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG21 | 14 | 0.83 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG22 | 14 | 0.83 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG23 | 14 | 0.83 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG21 | 15 | 0.83 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG22 | 15 | 0.83 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG23 | 15 | 0.83 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG21 | 16 | 0.83 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG22 | 16 | 0.83 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG23 | 16 | 0.83 |
| (2,639) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG21 | 9 | 0.83 |
| (2,639) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG22 | 9 | 0.83 |
| (2,639) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG23 | 9 | 0.83 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:22:GLN:HB2 | 4 | 0.83 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 4 | 0.83 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:22:GLN:HB2 | 4 | 0.83 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:22:GLN:HB2 | 8 | 0.83 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 8 | 0.83 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:22:GLN:HB2 | 8 | 0.83 |
| (2,441) | 1:A:21:GLN:HG3 | 1:A:21:GLN:HG2 | 2 | 0.83 |
| (2,441) | 1:A:21:GLN:HG3 | 1:A:21:GLN:HG2 | 4 | 0.83 |
| (2,441) | 1:A:21:GLN:HG3 | 1:A:21:GLN:HG2 | 9 | 0.83 |
| (2,441) | 1:A:21:GLN:HG3 | 1:A:21:GLN:HG2 | 10 | 0.83 |
| (2,441) | 1:A:21:GLN:HG3 | 1:A:21:GLN:HG2 | 12 | 0.83 |
| (2,441) | 1:A:21:GLN:HG3 | 1:A:21:GLN:HG2 | 13 | 0.83 |
| (2,441) | 1:A:21:GLN:HG3 | 1:A:21:GLN:HG2 | 14 | 0.83 |
| (2,441) | 1:A:21:GLN:HG3 | 1:A:21:GLN:HG2 | 15 | 0.83 |
| (2,441) | 1:A:21:GLN:HG3 | 1:A:21:GLN:HG2 | 16 | 0.83 |
| (2,381) | 1:A:18:PRO:HB2 | 1:A:19:GLN:H | 2 | 0.83 |
| (2,345) | 1:A:15:GLY:HA2 | 1:A:15:GLY:H | 4 | 0.83 |
| (2,345) | 1:A:15:GLY:HA2 | 1:A:15:GLY:H | 6 | 0.83 |
| (2,345) | 1:A:15:GLY:HA2 | 1:A:15:GLY:H | 14 | 0.83 |
| (2,345) | 1:A:15:GLY:HA2 | 1:A:15:GLY:H | 16 | 0.83 |
| (2,338) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 7 | 0.83 |
| (2,320) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:51:PHE:HA | 15 | 0.83 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 8 | 0.83 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 8 | 0.83 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 8 | 0.83 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 14 | 0.83 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 14 | 0.83 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 14 | 0.83 |
| (2,203) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HB2 | 7 | 0.83 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD11 | 1 | 0.83 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD12 | 1 | 0.83 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD13 | 1 | 0.83 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD11 | 9 | 0.83 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD12 | 9 | 0.83 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD13 | 9 | 0.83 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD11 | 12 | 0.83 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD12 | 12 | 0.83 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD13 | 12 | 0.83 |
| (2,1920) | 1:A:76:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 6 | 0.83 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD21 | 4 | 0.83 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD22 | 4 | 0.83 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD23 | 4 | 0.83 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD21 | 4 | 0.83 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD22 | 4 | 0.83 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD23 | 4 | 0.83 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD21 | 4 | 0.83 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD22 | 4 | 0.83 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD23 | 4 | 0.83 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:ASN:HA | 16 | 0.83 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:ASN:HA | 16 | 0.83 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:ASN:HA | 16 | 0.83 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:4:SER:HB2 | 8 | 0.83 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:4:SER:HB2 | 8 | 0.83 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:4:SER:HB2 | 8 | 0.83 |
| (2,1768) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:96:THR:HB | 4 | 0.83 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 3 | 0.83 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 3 | 0.83 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 3 | 0.83 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:92:GLN:HB3 | 5 | 0.83 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:92:GLN:HB3 | 5 | 0.83 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:92:GLN:HB3 | 5 | 0.83 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:92:GLN:HB3 | 6 | 0.83 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:92:GLN:HB3 | 6 | 0.83 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:92:GLN:HB3 | 6 | 0.83 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:92:GLN:HB3 | 8 | 0.83 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:92:GLN:HB3 | 8 | 0.83 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:92:GLN:HB3 | 8 | 0.83 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:92:GLN:HB3 | 12 | 0.83 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:92:GLN:HB3 | 12 | 0.83 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:92:GLN:HB3 | 12 | 0.83 |
| (2,1528) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:17:SER:H | 13 | 0.83 |
| (2,1343) | 1:A:70:HIS:HA | 1:A:73:GLY:HA3 | 2 | 0.83 |
| (2,1343) | 1:A:70:HIS:HA | 1:A:73:GLY:HA3 | 7 | 0.83 |
| (2,1343) | 1:A:70:HIS:HA | 1:A:73:GLY:HA3 | 9 | 0.83 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG11 | 4 | 0.83 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG12 | 4 | 0.83 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG13 | 4 | 0.83 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG11 | 9 | 0.83 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG12 | 9 | 0.83 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG13 | 9 | 0.83 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG11 | 12 | 0.83 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG12 | 12 | 0.83 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG13 | 12 | 0.83 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG11 | 14 | 0.83 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG12 | 14 | 0.83 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG13 | 14 | 0.83 |
| (2,1200) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:62:LEU:H | 2 | 0.83 |
| (2,1200) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:62:LEU:H | 6 | 0.83 |
| (2,1200) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:62:LEU:H | 13 | 0.83 |
| (2,1200) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:62:LEU:H | 14 | 0.83 |
| (2,1193) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:65:ARG:HB2 | 13 | 0.83 |
| (2,1193) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:65:ARG:HB2 | 14 | 0.83 |
| (2,117) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:4:SER:HA | 14 | 0.83 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:85:PRO:HA | 16 | 0.83 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:85:PRO:HA | 16 | 0.83 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:85:PRO:HA | 16 | 0.83 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HA | 2 | 0.83 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HA | 2 | 0.83 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HA | 2 | 0.83 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HA | 3 | 0.83 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HA | 3 | 0.83 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HA | 3 | 0.83 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HA | 9 | 0.83 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HA | 9 | 0.83 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HA | 9 | 0.83 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HA | 10 | 0.83 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HA | 10 | 0.83 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HA | 10 | 0.83 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HA | 12 | 0.83 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HA | 12 | 0.83 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HA | 12 | 0.83 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HA | 13 | 0.83 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HA | 13 | 0.83 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HA | 13 | 0.83 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HA | 14 | 0.83 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HA | 14 | 0.83 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HA | 14 | 0.83 |
| (2,1055) | 1:A:52:LYS:HG3 | 1:A:52:LYS:H | 15 | 0.83 |
| (2,104) | 1:A:5:ALA:HA | 1:A:5:ALA:H | 2 | 0.83 |
| (1,609) | 1:A:67:THR:H | 1:A:68:LEU:HB3 | 16 | 0.83 |
| (1,366) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG2 | 2 | 0.83 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,366) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG2 | 6 | 0.83 |
| (1,366) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG2 | 8 | 0.83 |
| (1,366) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG2 | 16 | 0.83 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG21 | 10 | 0.82 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG22 | 10 | 0.82 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG23 | 10 | 0.82 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG21 | 12 | 0.82 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG22 | 12 | 0.82 |
| (2,707) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:29:VAL:HG23 | 12 | 0.82 |
| (2,686) | 1:A:62:LEU:HD11 | 1:A:66:ASN:HD21 | 7 | 0.82 |
| (2,686) | 1:A:62:LEU:HD12 | 1:A:66:ASN:HD21 | 7 | 0.82 |
| (2,686) | 1:A:62:LEU:HD13 | 1:A:66:ASN:HD21 | 7 | 0.82 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:56:ILE:HG12 | 3 | 0.82 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:56:ILE:HG12 | 3 | 0.82 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:56:ILE:HG12 | 3 | 0.82 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:22:GLN:HB2 | 2 | 0.82 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 2 | 0.82 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:22:GLN:HB2 | 2 | 0.82 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD21 | 15 | 0.82 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD22 | 15 | 0.82 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD23 | 15 | 0.82 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 15 | 0.82 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 15 | 0.82 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 15 | 0.82 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD21 | 7 | 0.82 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD22 | 7 | 0.82 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD23 | 7 | 0.82 |
| (2,448) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:36:VAL:HA | 1 | 0.82 |
| (2,345) | 1:A:15:GLY:HA2 | 1:A:15:GLY:H | 8 | 0.82 |
| (2,345) | 1:A:15:GLY:HA2 | 1:A:15:GLY:H | 9 | 0.82 |
| (2,345) | 1:A:15:GLY:HA2 | 1:A:15:GLY:H | 10 | 0.82 |
| (2,345) | 1:A:15:GLY:HA2 | 1:A:15:GLY:H | 13 | 0.82 |
| (2,338) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 12 | 0.82 |
| (2,320) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:51:PHE:HA | 5 | 0.82 |
| (2,31) | 1:A:39:HIS:HD2 | 1:A:37:LEU:HB3 | 14 | 0.82 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 11 | 0.82 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 11 | 0.82 |
| (2,288) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 11 | 0.82 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 3 | 0.82 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 3 | 0.82 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 3 | 0.82 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 14 | 0.82 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 14 | 0.82 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 14 | 0.82 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD11 | 4 | 0.82 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD12 | 4 | 0.82 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD13 | 4 | 0.82 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD11 | 8 | 0.82 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD12 | 8 | 0.82 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD13 | 8 | 0.82 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD11 | 14 | 0.82 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD12 | 14 | 0.82 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD13 | 14 | 0.82 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD11 | 3 | 0.82 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD12 | 3 | 0.82 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD13 | 3 | 0.82 |
| (2,183) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:11:ALA:H | 1 | 0.82 |
| (2,183) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:11:ALA:H | 10 | 0.82 |
| (2,183) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:11:ALA:H | 14 | 0.82 |
| (2,1749) | 1:A:95:HIS:HA | 1:A:98:LEU:HB3 | 14 | 0.82 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 1 | 0.82 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 1 | 0.82 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 1 | 0.82 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 5 | 0.82 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 5 | 0.82 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 5 | 0.82 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 11 | 0.82 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 11 | 0.82 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 11 | 0.82 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 16 | 0.82 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 16 | 0.82 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 16 | 0.82 |
| (2,1696) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:25:LEU:HB3 | 9 | 0.82 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:92:GLN:HB3 | 4 | 0.82 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:92:GLN:HB3 | 4 | 0.82 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:92:GLN:HB3 | 4 | 0.82 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:92:GLN:HB3 | 9 | 0.82 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:92:GLN:HB3 | 9 | 0.82 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:92:GLN:HB3 | 9 | 0.82 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:92:GLN:HB3 | 15 | 0.82 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:92:GLN:HB3 | 15 | 0.82 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:92:GLN:HB3 | 15 | 0.82 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:92:GLN:HB3 | 16 | 0.82 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:92:GLN:HB3 | 16 | 0.82 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:92:GLN:HB3 | 16 | 0.82 |
| (2,1624) | 1:A:87:PRO:HB2 | 1:A:26:ALA:HA | 1 | 0.82 |
| (2,1624) | 1:A:87:PRO:HB2 | 1:A:26:ALA:HA | 10 | 0.82 |
| (2,1518) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:21:GLN:HG3 | 2 | 0.82 |
| (2,1471) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:74:LEU:H | 6 | 0.82 |
| (2,1471) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:74:LEU:H | 9 | 0.82 |
| (2,1343) | 1:A:70:HIS:HA | 1:A:73:GLY:HA3 | 1 | 0.82 |
| (2,1343) | 1:A:70:HIS:HA | 1:A:73:GLY:HA3 | 14 | 0.82 |
| (2,1298) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:HD21 | 4 | 0.82 |
| (2,1298) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:HD21 | 11 | 0.82 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG11 | 15 | 0.82 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG12 | 15 | 0.82 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG13 | 15 | 0.82 |
| (2,1200) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:62:LEU:H | 5 | 0.82 |
| (2,1200) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:62:LEU:H | 8 | 0.82 |
| (2,1200) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:62:LEU:H | 10 | 0.82 |
| (2,1200) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:62:LEU:H | 12 | 0.82 |
| (2,117) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:4:SER:HA | 9 | 0.82 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HA | 1 | 0.82 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HA | 1 | 0.82 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HA | 1 | 0.82 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HA | 4 | 0.82 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HA | 4 | 0.82 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HA | 4 | 0.82 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HA | 5 | 0.82 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HA | 5 | 0.82 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HA | 5 | 0.82 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HA | 6 | 0.82 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HA | 6 | 0.82 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HA | 6 | 0.82 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HA | 7 | 0.82 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HA | 7 | 0.82 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HA | 7 | 0.82 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HA | 8 | 0.82 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HA | 8 | 0.82 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HA | 8 | 0.82 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HA | 11 | 0.82 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HA | 11 | 0.82 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HA | 11 | 0.82 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HA | 15 | 0.82 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HA | 15 | 0.82 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HA | 15 | 0.82 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HA | 16 | 0.82 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HA | 16 | 0.82 |
| (2,1080) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HA | 16 | 0.82 |
| (2,1064) | 1:A:53:ASP:HB3 | 1:A:50:ALA:H | 13 | 0.82 |
| (2,1055) | 1:A:52:LYS:HG3 | 1:A:52:LYS:H | 12 | 0.82 |
| (2,1055) | 1:A:52:LYS:HG3 | 1:A:52:LYS:H | 14 | 0.82 |
| (2,104) | 1:A:5:ALA:HA | 1:A:5:ALA:H | 4 | 0.82 |
| (2,104) | 1:A:5:ALA:HA | 1:A:5:ALA:H | 6 | 0.82 |
| (2,104) | 1:A:5:ALA:HA | 1:A:5:ALA:H | 12 | 0.82 |
| (2,104) | 1:A:5:ALA:HA | 1:A:5:ALA:H | 15 | 0.82 |
| (1,471) | 1:A:8:ASP:H | 1:A:9:LEU:H | 11 | 0.82 |
| (1,410) | 1:A:4:SER:H | 1:A:2:ALA:HB1 | 14 | 0.82 |
| (1,410) | 1:A:4:SER:H | 1:A:2:ALA:HB2 | 14 | 0.82 |
| (1,410) | 1:A:4:SER:H | 1:A:2:ALA:HB3 | 14 | 0.82 |
| (1,366) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG2 | 1 | 0.82 |
| (1,366) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG2 | 9 | 0.82 |
| (1,366) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG2 | 11 | 0.82 |
| (1,234) | 1:A:102:HIS:H | 1:A:101:SER:HB2 | 5 | 0.82 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD21 | 11 | 0.82 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD22 | 11 | 0.82 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD23 | 11 | 0.82 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD11 | 9 | 0.82 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD12 | 9 | 0.82 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD13 | 9 | 0.82 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HG2 | 5 | 0.81 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HG2 | 5 | 0.81 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HG2 | 5 | 0.81 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:22:GLN:HB2 | 1 | 0.81 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 1 | 0.81 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:22:GLN:HB2 | 1 | 0.81 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:22:GLN:HB2 | 5 | 0.81 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 5 | 0.81 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:22:GLN:HB2 | 5 | 0.81 |
| (2,454) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:17:SER:H | 5 | 0.81 |
| (2,448) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:36:VAL:HA | 6 | 0.81 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 5 | 0.81 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 5 | 0.81 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 5 | 0.81 |
| (2,344) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:15:GLY:H | 12 | 0.81 |
| (2,338) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 14 | 0.81 |
| (2,282) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:21:GLN:HA | 3 | 0.81 |
| (2,282) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:21:GLN:HA | 6 | 0.81 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 4 | 0.81 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 4 | 0.81 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 4 | 0.81 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD11 | 2 | 0.81 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD12 | 2 | 0.81 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD13 | 2 | 0.81 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD11 | 5 | 0.81 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD12 | 5 | 0.81 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD13 | 5 | 0.81 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD11 | 6 | 0.81 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD12 | 6 | 0.81 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD13 | 6 | 0.81 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD11 | 7 | 0.81 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD12 | 7 | 0.81 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD13 | 7 | 0.81 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD11 | 10 | 0.81 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD12 | 10 | 0.81 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD13 | 10 | 0.81 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD11 | 11 | 0.81 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD12 | 11 | 0.81 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD13 | 11 | 0.81 |
| (2,191) | 1:A:9:LEU:HA | 1:A:12:ARG:HD3 | 7 | 0.81 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD21 | 11 | 0.81 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD22 | 11 | 0.81 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD23 | 11 | 0.81 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD21 | 11 | 0.81 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD22 | 11 | 0.81 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD23 | 11 | 0.81 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD21 | 11 | 0.81 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD22 | 11 | 0.81 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD23 | 11 | 0.81 |
| (2,1892) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:90:LEU:H | 9 | 0.81 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:ASN:HA | 6 | 0.81 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:ASN:HA | 6 | 0.81 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:ASN:HA | 6 | 0.81 |
| (2,183) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:11:ALA:H | 3 | 0.81 |
| (2,183) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:11:ALA:H | 11 | 0.81 |
| (2,183) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:11:ALA:H | 12 | 0.81 |
| (2,183) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:11:ALA:H | 13 | 0.81 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:4:SER:HB2 | 2 | 0.81 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:4:SER:HB2 | 2 | 0.81 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:4:SER:HB2 | 2 | 0.81 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG21 | 8 | 0.81 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG22 | 8 | 0.81 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG23 | 8 | 0.81 |
| (2,1799) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:100:GLN:H | 1 | 0.81 |
| (2,1799) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:100:GLN:H | 1 | 0.81 |
| (2,1799) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:100:GLN:H | 1 | 0.81 |
| (2,1799) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:100:GLN:H | 14 | 0.81 |
| (2,1799) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:100:GLN:H | 14 | 0.81 |
| (2,1799) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:100:GLN:H | 14 | 0.81 |
| (2,1793) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:99:THR:HG21 | 13 | 0.81 |
| (2,1793) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:99:THR:HG22 | 13 | 0.81 |
| (2,1793) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:99:THR:HG23 | 13 | 0.81 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 2 | 0.81 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 2 | 0.81 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 2 | 0.81 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 4 | 0.81 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 4 | 0.81 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 4 | 0.81 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 7 | 0.81 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 7 | 0.81 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 7 | 0.81 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 9 | 0.81 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 9 | 0.81 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 9 | 0.81 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 10 | 0.81 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 10 | 0.81 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 10 | 0.81 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 12 | 0.81 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 12 | 0.81 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 12 | 0.81 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 13 | 0.81 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 13 | 0.81 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 13 | 0.81 |
| (2,1696) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:25:LEU:HB3 | 1 | 0.81 |
| (2,1696) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:25:LEU:HB3 | 14 | 0.81 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:88:HIS:HB2 | 3 | 0.81 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:88:HIS:HB2 | 3 | 0.81 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:88:HIS:HB2 | 3 | 0.81 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:92:GLN:HB3 | 2 | 0.81 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:92:GLN:HB3 | 2 | 0.81 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:92:GLN:HB3 | 2 | 0.81 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:92:GLN:HB3 | 7 | 0.81 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:92:GLN:HB3 | 7 | 0.81 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:92:GLN:HB3 | 7 | 0.81 |
| (2,1549) | 1:A:81:ILE:HB | 1:A:82:PHE:H | 15 | 0.81 |
| (2,1498) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HB2 | 7 | 0.81 |
| (2,1471) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:74:LEU:H | 2 | 0.81 |
| (2,141) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:43:GLU:HG2 | 3 | 0.81 |
| (2,141) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:43:GLU:HG2 | 3 | 0.81 |
| (2,141) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:43:GLU:HG2 | 3 | 0.81 |
| (2,141) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:43:GLU:HG2 | 8 | 0.81 |
| (2,141) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:43:GLU:HG2 | 8 | 0.81 |
| (2,141) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:43:GLU:HG2 | 8 | 0.81 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB1 | 1 | 0.81 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB2 | 1 | 0.81 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB3 | 1 | 0.81 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB1 | 11 | 0.81 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB2 | 11 | 0.81 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB3 | 11 | 0.81 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG11 | 11 | 0.81 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG12 | 11 | 0.81 |
| (2,1221) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:36:VAL:HG13 | 11 | 0.81 |
| (2,1212) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:ASN:HD21 | 3 | 0.81 |
| (2,1200) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:62:LEU:H | 9 | 0.81 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:85:PRO:HA | 13 | 0.81 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:85:PRO:HA | 13 | 0.81 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:85:PRO:HA | 13 | 0.81 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD21 | 5 | 0.81 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD22 | 5 | 0.81 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD23 | 5 | 0.81 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD21 | 6 | 0.81 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD22 | 6 | 0.81 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD23 | 6 | 0.81 |
| (2,1064) | 1:A:53:ASP:HB3 | 1:A:50:ALA:H | 7 | 0.81 |
| (1,444) | 1:A:75:ASP:H | 1:A:74:LEU:HD21 | 10 | 0.81 |
| (1,444) | 1:A:75:ASP:H | 1:A:74:LEU:HD22 | 10 | 0.81 |
| (1,444) | 1:A:75:ASP:H | 1:A:74:LEU:HD23 | 10 | 0.81 |
| (1,390) | 1:A:65:ARG:HE | 1:A:65:ARG:HD3 | 11 | 0.81 |
| (1,366) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG2 | 13 | 0.81 |
| (1,205) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:47:PRO:HD2 | 12 | 0.81 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 15 | 0.81 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 15 | 0.81 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 15 | 0.81 |
| (1,127) | 1:A:69:THR:H | 1:A:68:LEU:HB2 | 1 | 0.81 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,127) | 1:A:69:THR:H | 1:A:68:LEU:HB2 | 4 | 0.81 |
| (2,90) | 1:A:4:SER:HA | 1:A:5:ALA:H | 11 | 0.8 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:27:THR:HB | 6 | 0.8 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:27:THR:HB | 6 | 0.8 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:27:THR:HB | 6 | 0.8 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD11 | 14 | 0.8 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD12 | 14 | 0.8 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD13 | 14 | 0.8 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD11 | 14 | 0.8 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD12 | 14 | 0.8 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD13 | 14 | 0.8 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD11 | 14 | 0.8 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD12 | 14 | 0.8 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD13 | 14 | 0.8 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD21 | 11 | 0.8 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD22 | 11 | 0.8 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD23 | 11 | 0.8 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD21 | 11 | 0.8 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD22 | 11 | 0.8 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD23 | 11 | 0.8 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD21 | 11 | 0.8 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD22 | 11 | 0.8 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD23 | 11 | 0.8 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:64:LEU:HG | 11 | 0.8 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:64:LEU:HG | 11 | 0.8 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:64:LEU:HG | 11 | 0.8 |
| (2,534) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:23:GLN:HB3 | 11 | 0.8 |
| (2,454) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:17:SER:H | 1 | 0.8 |
| (2,454) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:17:SER:H | 7 | 0.8 |
| (2,381) | 1:A:18:PRO:HB2 | 1:A:19:GLN:H | 4 | 0.8 |
| (2,345) | 1:A:15:GLY:HA2 | 1:A:15:GLY:H | 3 | 0.8 |
| (2,345) | 1:A:15:GLY:HA2 | 1:A:15:GLY:H | 11 | 0.8 |
| (2,338) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 2 | 0.8 |
| (2,320) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:51:PHE:HA | 1 | 0.8 |
| (2,320) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:51:PHE:HA | 4 | 0.8 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 13 | 0.8 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 13 | 0.8 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 13 | 0.8 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HB2 | 5 | 0.8 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HB2 | 5 | 0.8 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HB2 | 5 | 0.8 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:51:PHE:HB2 | 1 | 0.8 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:51:PHE:HB2 | 1 | 0.8 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:51:PHE:HB2 | 1 | 0.8 |
| (2,203) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HB2 | 4 | 0.8 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD11 | 13 | 0.8 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD12 | 13 | 0.8 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD13 | 13 | 0.8 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD11 | 15 | 0.8 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD12 | 15 | 0.8 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD13 | 15 | 0.8 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD11 | 16 | 0.8 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD12 | 16 | 0.8 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD13 | 16 | 0.8 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD11 | 4 | 0.8 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD12 | 4 | 0.8 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD13 | 4 | 0.8 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD11 | 8 | 0.8 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD12 | 8 | 0.8 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD13 | 8 | 0.8 |
| (2,1864) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:ASN:HA | 9 | 0.8 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:ASN:HA | 2 | 0.8 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:ASN:HA | 2 | 0.8 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:ASN:HA | 2 | 0.8 |
| (2,183) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:11:ALA:H | 2 | 0.8 |
| (2,183) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:11:ALA:H | 8 | 0.8 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:99:THR:H | 3 | 0.8 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:99:THR:H | 3 | 0.8 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:99:THR:H | 3 | 0.8 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD11 | 1:A:95:HIS:HB2 | 7 | 0.8 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD12 | 1:A:95:HIS:HB2 | 7 | 0.8 |
| (2,1785) | 1:A:98:LEU:HD13 | 1:A:95:HIS:HB2 | 7 | 0.8 |
| (2,1768) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:96:THR:HB | 6 | 0.8 |
| (2,1765) | 1:A:97:ARG:HD3 | 1:A:97:ARG:HA | 7 | 0.8 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 15 | 0.8 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 15 | 0.8 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 15 | 0.8 |
| (2,1740) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:97:ARG:HB2 | 14 | 0.8 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:88:HIS:HB2 | 11 | 0.8 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:88:HIS:HB2 | 11 | 0.8 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:88:HIS:HB2 | 11 | 0.8 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:88:HIS:HB2 | 12 | 0.8 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:88:HIS:HB2 | 12 | 0.8 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:88:HIS:HB2 | 12 | 0.8 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:88:HIS:HB2 | 15 | 0.8 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:88:HIS:HB2 | 15 | 0.8 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:88:HIS:HB2 | 15 | 0.8 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:92:GLN:HB3 | 1 | 0.8 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:92:GLN:HB3 | 1 | 0.8 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:92:GLN:HB3 | 1 | 0.8 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:92:GLN:HB3 | 10 | 0.8 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:92:GLN:HB3 | 10 | 0.8 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:92:GLN:HB3 | 10 | 0.8 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:90:LEU:HB3 | 9 | 0.8 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:90:LEU:HB3 | 9 | 0.8 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:90:LEU:HB3 | 9 | 0.8 |
| (2,1624) | 1:A:87:PRO:HB2 | 1:A:26:ALA:HA | 2 | 0.8 |
| (2,1528) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:17:SER:H | 11 | 0.8 |
| (2,1518) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:21:GLN:HG3 | 11 | 0.8 |
| (2,1471) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:74:LEU:H | 12 | 0.8 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 9 | 0.8 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 9 | 0.8 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 9 | 0.8 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 10 | 0.8 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 10 | 0.8 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 10 | 0.8 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB1 | 9 | 0.8 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB2 | 9 | 0.8 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB3 | 9 | 0.8 |
| (2,1298) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:HD21 | 7 | 0.8 |
| (2,1298) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:HD21 | 16 | 0.8 |
| (2,1200) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:62:LEU:H | 7 | 0.8 |
| (2,1200) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:62:LEU:H | 11 | 0.8 |
| (2,1200) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:62:LEU:H | 16 | 0.8 |
| (2,117) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:4:SER:HA | 13 | 0.8 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:85:PRO:HA | 5 | 0.8 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:85:PRO:HA | 5 | 0.8 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:85:PRO:HA | 5 | 0.8 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:85:PRO:HA | 8 | 0.8 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:85:PRO:HA | 8 | 0.8 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:85:PRO:HA | 8 | 0.8 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:85:PRO:HA | 12 | 0.8 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:85:PRO:HA | 12 | 0.8 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:85:PRO:HA | 12 | 0.8 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD11 | 3 | 0.8 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD12 | 3 | 0.8 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD13 | 3 | 0.8 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD11 | 6 | 0.8 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD12 | 6 | 0.8 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD13 | 6 | 0.8 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD11 | 8 | 0.8 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD12 | 8 | 0.8 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD13 | 8 | 0.8 |
| (2,104) | 1:A:5:ALA:HA | 1:A:5:ALA:H | 7 | 0.8 |
| (2,104) | 1:A:5:ALA:HA | 1:A:5:ALA:H | 10 | 0.8 |
| (1,471) | 1:A:8:ASP:H | 1:A:9:LEU:H | 2 | 0.8 |
| (1,471) | 1:A:8:ASP:H | 1:A:9:LEU:H | 10 | 0.8 |
| (1,471) | 1:A:8:ASP:H | 1:A:9:LEU:H | 12 | 0.8 |
| (1,366) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG2 | 14 | 0.8 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG21 | 3 | 0.8 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG22 | 3 | 0.8 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG23 | 3 | 0.8 |
| (1,205) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:47:PRO:HD2 | 5 | 0.8 |
| (1,205) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:47:PRO:HD2 | 15 | 0.8 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 1 | 0.8 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 1 | 0.8 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 1 | 0.8 |
| (1,127) | 1:A:69:THR:H | 1:A:68:LEU:HB2 | 2 | 0.8 |
| (1,127) | 1:A:69:THR:H | 1:A:68:LEU:HB2 | 6 | 0.8 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD11 | 16 | 0.8 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD12 | 16 | 0.8 |
| (1,104) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:94:LEU:HD13 | 16 | 0.8 |
| (2,914) | 1:A:43:GLU:HG2 | 1:A:43:GLU:H | 2 | 0.79 |
| (2,891) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:43:GLU:H | 9 | 0.79 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:27:THR:HB | 10 | 0.79 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:27:THR:HB | 10 | 0.79 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:27:THR:HB | 10 | 0.79 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:56:ILE:HG12 | 2 | 0.79 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:56:ILE:HG12 | 2 | 0.79 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:56:ILE:HG12 | 2 | 0.79 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:56:ILE:HG12 | 8 | 0.79 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:56:ILE:HG12 | 8 | 0.79 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:56:ILE:HG12 | 8 | 0.79 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 12 | 0.79 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 12 | 0.79 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 12 | 0.79 |
| (2,338) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 3 | 0.79 |
| (2,338) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 9 | 0.79 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,338) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 13 | 0.79 |
| (2,282) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:21:GLN:HA | 12 | 0.79 |
| (2,279) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:12:ARG:HA | 3 | 0.79 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 2 | 0.79 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 2 | 0.79 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 2 | 0.79 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:51:PHE:HB2 | 9 | 0.79 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:51:PHE:HB2 | 9 | 0.79 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:51:PHE:HB2 | 9 | 0.79 |
| (2,203) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HB2 | 2 | 0.79 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD21 | 16 | 0.79 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD22 | 16 | 0.79 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD23 | 16 | 0.79 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD21 | 16 | 0.79 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD22 | 16 | 0.79 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD23 | 16 | 0.79 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD21 | 16 | 0.79 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD22 | 16 | 0.79 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD23 | 16 | 0.79 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD11 | 1 | 0.79 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD12 | 1 | 0.79 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD13 | 1 | 0.79 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD11 | 16 | 0.79 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD12 | 16 | 0.79 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD13 | 16 | 0.79 |
| (2,1868) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:ASN:H | 4 | 0.79 |
| (2,183) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:11:ALA:H | 4 | 0.79 |
| (2,183) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:11:ALA:H | 6 | 0.79 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:4:SER:HB2 | 11 | 0.79 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:4:SER:HB2 | 11 | 0.79 |
| (2,1818) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:4:SER:HB2 | 11 | 0.79 |
| (2,1773) | 1:A:97:ARG:HD2 | 1:A:100:GLN:H | 7 | 0.79 |
| (2,1768) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:96:THR:HB | 11 | 0.79 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 6 | 0.79 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 6 | 0.79 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 6 | 0.79 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:88:HIS:HB2 | 1 | 0.79 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:88:HIS:HB2 | 1 | 0.79 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:88:HIS:HB2 | 1 | 0.79 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:88:HIS:HB2 | 2 | 0.79 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:88:HIS:HB2 | 2 | 0.79 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:88:HIS:HB2 | 2 | 0.79 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:88:HIS:HB2 | 5 | 0.79 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:88:HIS:HB2 | 5 | 0.79 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:88:HIS:HB2 | 5 | 0.79 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:92:GLN:HB3 | 11 | 0.79 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:92:GLN:HB3 | 11 | 0.79 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:92:GLN:HB3 | 11 | 0.79 |
| (2,1528) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:17:SER:H | 1 | 0.79 |
| (2,1528) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:17:SER:H | 15 | 0.79 |
| (2,1522) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:13:LEU:HA | 6 | 0.79 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:74:LEU:HB3 | 10 | 0.79 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:74:LEU:HB3 | 10 | 0.79 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:74:LEU:HB3 | 10 | 0.79 |
| (2,1498) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HB2 | 1 | 0.79 |
| (2,1498) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HB2 | 8 | 0.79 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG21 | 12 | 0.79 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG22 | 12 | 0.79 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG23 | 12 | 0.79 |
| (2,1471) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:74:LEU:H | 14 | 0.79 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 15 | 0.79 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 15 | 0.79 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 15 | 0.79 |
| (2,1200) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:62:LEU:H | 4 | 0.79 |
| (2,1193) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:65:ARG:HB2 | 4 | 0.79 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:85:PRO:HA | 2 | 0.79 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:85:PRO:HA | 2 | 0.79 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:85:PRO:HA | 2 | 0.79 |
| (2,104) | 1:A:5:ALA:HA | 1:A:5:ALA:H | 1 | 0.79 |
| (2,104) | 1:A:5:ALA:HA | 1:A:5:ALA:H | 3 | 0.79 |
| (2,104) | 1:A:5:ALA:HA | 1:A:5:ALA:H | 9 | 0.79 |
| (2,104) | 1:A:5:ALA:HA | 1:A:5:ALA:H | 14 | 0.79 |
| (2,1026) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:52:LYS:H | 2 | 0.79 |
| (1,471) | 1:A:8:ASP:H | 1:A:9:LEU:H | 1 | 0.79 |
| (1,384) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:71:ASN:H | 13 | 0.79 |
| (1,205) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:47:PRO:HD2 | 9 | 0.79 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD21 | 13 | 0.79 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD22 | 13 | 0.79 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD23 | 13 | 0.79 |
| (1,127) | 1:A:69:THR:H | 1:A:68:LEU:HB2 | 15 | 0.79 |
| (2,913) | 1:A:43:GLU:HG2 | 1:A:42:PRO:HA | 11 | 0.78 |
| (2,90) | 1:A:4:SER:HA | 1:A:5:ALA:H | 2 | 0.78 |
| (2,891) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:43:GLU:H | 8 | 0.78 |
| (2,891) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:43:GLU:H | 15 | 0.78 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HG2 | 2 | 0.78 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HG2 | 2 | 0.78 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HG2 | 2 | 0.78 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HG2 | 16 | 0.78 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HG2 | 16 | 0.78 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HG2 | 16 | 0.78 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:27:THR:HB | 14 | 0.78 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:27:THR:HB | 14 | 0.78 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:27:THR:HB | 14 | 0.78 |
| (2,682) | 1:A:62:LEU:HD11 | 1:A:78:PRO:HB2 | 7 | 0.78 |
| (2,682) | 1:A:62:LEU:HD12 | 1:A:78:PRO:HB2 | 7 | 0.78 |
| (2,682) | 1:A:62:LEU:HD13 | 1:A:78:PRO:HB2 | 7 | 0.78 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD11 | 12 | 0.78 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD12 | 12 | 0.78 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:64:LEU:HD13 | 12 | 0.78 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD11 | 12 | 0.78 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD12 | 12 | 0.78 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:64:LEU:HD13 | 12 | 0.78 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD11 | 12 | 0.78 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD12 | 12 | 0.78 |
| (2,674) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:64:LEU:HD13 | 12 | 0.78 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:22:GLN:HB2 | 7 | 0.78 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 7 | 0.78 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:22:GLN:HB2 | 7 | 0.78 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD21 | 4 | 0.78 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD22 | 4 | 0.78 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD23 | 4 | 0.78 |
| (2,534) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:23:GLN:HB3 | 4 | 0.78 |
| (2,381) | 1:A:18:PRO:HB2 | 1:A:19:GLN:H | 15 | 0.78 |
| (2,338) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 10 | 0.78 |
| (2,338) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 11 | 0.78 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:51:PHE:HB2 | 8 | 0.78 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:51:PHE:HB2 | 8 | 0.78 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:51:PHE:HB2 | 8 | 0.78 |
| (2,203) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HB2 | 11 | 0.78 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD11 | 3 | 0.78 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD12 | 3 | 0.78 |
| (2,195) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:25:LEU:HD13 | 3 | 0.78 |
| (2,1920) | 1:A:76:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 16 | 0.78 |
| (2,191) | 1:A:9:LEU:HA | 1:A:12:ARG:HD3 | 16 | 0.78 |
| (2,183) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:11:ALA:H | 15 | 0.78 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:99:THR:H | 12 | 0.78 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:99:THR:H | 12 | 0.78 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:99:THR:H | 12 | 0.78 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:99:THR:H | 14 | 0.78 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:99:THR:H | 14 | 0.78 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:99:THR:H | 14 | 0.78 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:99:THR:H | 16 | 0.78 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:99:THR:H | 16 | 0.78 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:99:THR:H | 16 | 0.78 |
| (2,1773) | 1:A:97:ARG:HD2 | 1:A:100:GLN:H | 8 | 0.78 |
| (2,1764) | 1:A:97:ARG:HD2 | 1:A:97:ARG:HA | 2 | 0.78 |
| (2,1749) | 1:A:95:HIS:HA | 1:A:98:LEU:HB3 | 6 | 0.78 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 14 | 0.78 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 14 | 0.78 |
| (2,1742) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 14 | 0.78 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:88:HIS:HB2 | 4 | 0.78 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:88:HIS:HB2 | 4 | 0.78 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:88:HIS:HB2 | 4 | 0.78 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:88:HIS:HB2 | 13 | 0.78 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:88:HIS:HB2 | 13 | 0.78 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:88:HIS:HB2 | 13 | 0.78 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:88:HIS:HB2 | 14 | 0.78 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:88:HIS:HB2 | 14 | 0.78 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:88:HIS:HB2 | 14 | 0.78 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:88:HIS:HB2 | 16 | 0.78 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:88:HIS:HB2 | 16 | 0.78 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:88:HIS:HB2 | 16 | 0.78 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:92:GLN:HB3 | 14 | 0.78 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:92:GLN:HB3 | 14 | 0.78 |
| (2,1647) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:92:GLN:HB3 | 14 | 0.78 |
| (2,1529) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:21:GLN:H | 15 | 0.78 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 11 | 0.78 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 11 | 0.78 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 11 | 0.78 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB1 | 8 | 0.78 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB2 | 8 | 0.78 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB3 | 8 | 0.78 |
| (2,1298) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:HD21 | 13 | 0.78 |
| (2,117) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:4:SER:HA | 6 | 0.78 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD21 | 13 | 0.78 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD22 | 13 | 0.78 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD23 | 13 | 0.78 |
| (2,1064) | 1:A:53:ASP:HB3 | 1:A:50:ALA:H | 2 | 0.78 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1064) | 1:A:53:ASP:HB3 | 1:A:50:ALA:H | 5 | 0.78 |
| (2,104) | 1:A:5:ALA:HA | 1:A:5:ALA:H | 5 | 0.78 |
| (2,104) | 1:A:5:ALA:HA | 1:A:5:ALA:H | 8 | 0.78 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 2 | 0.78 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 2 | 0.78 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 2 | 0.78 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 14 | 0.78 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 14 | 0.78 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 14 | 0.78 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD21 | 16 | 0.78 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD22 | 16 | 0.78 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD23 | 16 | 0.78 |
| (1,471) | 1:A:8:ASP:H | 1:A:9:LEU:H | 8 | 0.78 |
| (1,422) | 1:A:66:ASN:HD21 | 1:A:66:ASN:H | 11 | 0.78 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG21 | 12 | 0.78 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG22 | 12 | 0.78 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG23 | 12 | 0.78 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG21 | 14 | 0.78 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG22 | 14 | 0.78 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG23 | 14 | 0.78 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG21 | 16 | 0.78 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG22 | 16 | 0.78 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG23 | 16 | 0.78 |
| (1,205) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:47:PRO:HD2 | 13 | 0.78 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 5 | 0.78 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 5 | 0.78 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 5 | 0.78 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD21 | 16 | 0.78 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD22 | 16 | 0.78 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD23 | 16 | 0.78 |
| (2,92) | 1:A:4:SER:HA | 1:A:3:ALA:HB1 | 4 | 0.77 |
| (2,92) | 1:A:4:SER:HA | 1:A:3:ALA:HB2 | 4 | 0.77 |
| (2,92) | 1:A:4:SER:HA | 1:A:3:ALA:HB3 | 4 | 0.77 |
| (2,92) | 1:A:4:SER:HA | 1:A:3:ALA:HB1 | 10 | 0.77 |
| (2,92) | 1:A:4:SER:HA | 1:A:3:ALA:HB2 | 10 | 0.77 |
| (2,92) | 1:A:4:SER:HA | 1:A:3:ALA:HB3 | 10 | 0.77 |
| (2,90) | 1:A:4:SER:HA | 1:A:5:ALA:H | 15 | 0.77 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HG2 | 3 | 0.77 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HG2 | 3 | 0.77 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HG2 | 3 | 0.77 |
| (2,534) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:23:GLN:HB3 | 12 | 0.77 |
| (2,448) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:36:VAL:HA | 13 | 0.77 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,358) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:13:LEU:HA | 11 | 0.77 |
| (2,358) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:13:LEU:HA | 11 | 0.77 |
| (2,358) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:13:LEU:HA | 11 | 0.77 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB1 | 2 | 0.77 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB2 | 2 | 0.77 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB3 | 2 | 0.77 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:51:PHE:HB2 | 15 | 0.77 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:51:PHE:HB2 | 15 | 0.77 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:51:PHE:HB2 | 15 | 0.77 |
| (2,203) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HB2 | 14 | 0.77 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:ASN:HA | 14 | 0.77 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:ASN:HA | 14 | 0.77 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:ASN:HA | 14 | 0.77 |
| (2,183) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:11:ALA:H | 16 | 0.77 |
| (2,1782) | 1:A:98:LEU:HD21 | 1:A:98:LEU:HA | 9 | 0.77 |
| (2,1782) | 1:A:98:LEU:HD22 | 1:A:98:LEU:HA | 9 | 0.77 |
| (2,1782) | 1:A:98:LEU:HD23 | 1:A:98:LEU:HA | 9 | 0.77 |
| (2,1768) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:96:THR:HB | 9 | 0.77 |
| (2,1749) | 1:A:95:HIS:HA | 1:A:98:LEU:HB3 | 13 | 0.77 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:88:HIS:HB2 | 7 | 0.77 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:88:HIS:HB2 | 7 | 0.77 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:88:HIS:HB2 | 7 | 0.77 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:88:HIS:HB2 | 8 | 0.77 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:88:HIS:HB2 | 8 | 0.77 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:88:HIS:HB2 | 8 | 0.77 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:88:HIS:HB2 | 9 | 0.77 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:88:HIS:HB2 | 9 | 0.77 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:88:HIS:HB2 | 9 | 0.77 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:88:HIS:HB2 | 10 | 0.77 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:88:HIS:HB2 | 10 | 0.77 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:88:HIS:HB2 | 10 | 0.77 |
| (2,1549) | 1:A:81:ILE:HB | 1:A:82:PHE:H | 1 | 0.77 |
| (2,1549) | 1:A:81:ILE:HB | 1:A:82:PHE:H | 7 | 0.77 |
| (2,1518) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:21:GLN:HG3 | 3 | 0.77 |
| (2,1471) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:74:LEU:H | 7 | 0.77 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 1 | 0.77 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 1 | 0.77 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 1 | 0.77 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB1 | 15 | 0.77 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB2 | 15 | 0.77 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB3 | 15 | 0.77 |
| (2,1369) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:97:ARG:H | 7 | 0.77 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1298) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:HD21 | 6 | 0.77 |
| (2,1298) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:HD21 | 8 | 0.77 |
| (2,1298) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:HD21 | 12 | 0.77 |
| (2,1298) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:HD21 | 14 | 0.77 |
| (2,1212) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:ASN:HD21 | 6 | 0.77 |
| (2,1193) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:65:ARG:HB2 | 8 | 0.77 |
| (2,117) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:4:SER:HA | 10 | 0.77 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD11 | 5 | 0.77 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD12 | 5 | 0.77 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD13 | 5 | 0.77 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD21 | 8 | 0.77 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD22 | 8 | 0.77 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD23 | 8 | 0.77 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD21 | 9 | 0.77 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD22 | 9 | 0.77 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD23 | 9 | 0.77 |
| (2,1064) | 1:A:53:ASP:HB3 | 1:A:50:ALA:H | 12 | 0.77 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:3:ALA:HA | 11 | 0.77 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:3:ALA:HA | 11 | 0.77 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:3:ALA:HA | 11 | 0.77 |
| (2,1026) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:52:LYS:H | 11 | 0.77 |
| (2,1026) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:52:LYS:H | 16 | 0.77 |
| (1,471) | 1:A:8:ASP:H | 1:A:9:LEU:H | 7 | 0.77 |
| (1,471) | 1:A:8:ASP:H | 1:A:9:LEU:H | 14 | 0.77 |
| (1,471) | 1:A:8:ASP:H | 1:A:9:LEU:H | 16 | 0.77 |
| (1,469) | 1:A:8:ASP:H | 1:A:7:THR:HB | 3 | 0.77 |
| (1,469) | 1:A:8:ASP:H | 1:A:7:THR:HB | 16 | 0.77 |
| (1,389) | 1:A:65:ARG:HE | 1:A:65:ARG:HG2 | 4 | 0.77 |
| (1,389) | 1:A:65:ARG:HE | 1:A:65:ARG:HG2 | 14 | 0.77 |
| (1,384) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:71:ASN:H | 11 | 0.77 |
| (1,254) | 1:A:79:THR:H | 1:A:78:PRO:HB3 | 15 | 0.77 |
| (1,127) | 1:A:69:THR:H | 1:A:68:LEU:HB2 | 8 | 0.77 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB1 | 14 | 0.76 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB2 | 14 | 0.76 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB3 | 14 | 0.76 |
| (2,923) | 1:A:101:SER:HB2 | 1:A:102:HIS:H | 16 | 0.76 |
| (2,894) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:43:GLU:HB2 | 2 | 0.76 |
| (2,891) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:43:GLU:H | 3 | 0.76 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HG2 | 1 | 0.76 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HG2 | 1 | 0.76 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HG2 | 1 | 0.76 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HG2 | 6 | 0.76 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HG2 | 6 | 0.76 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HG2 | 6 | 0.76 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HG2 | 9 | 0.76 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HG2 | 9 | 0.76 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HG2 | 9 | 0.76 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:27:THR:HB | 1 | 0.76 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:27:THR:HB | 1 | 0.76 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:27:THR:HB | 1 | 0.76 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:27:THR:HB | 3 | 0.76 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:27:THR:HB | 3 | 0.76 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:27:THR:HB | 3 | 0.76 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:27:THR:HB | 4 | 0.76 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:27:THR:HB | 4 | 0.76 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:27:THR:HB | 4 | 0.76 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:27:THR:HB | 16 | 0.76 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:27:THR:HB | 16 | 0.76 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:27:THR:HB | 16 | 0.76 |
| (2,686) | 1:A:62:LEU:HD11 | 1:A:66:ASN:HD21 | 11 | 0.76 |
| (2,686) | 1:A:62:LEU:HD12 | 1:A:66:ASN:HD21 | 11 | 0.76 |
| (2,686) | 1:A:62:LEU:HD13 | 1:A:66:ASN:HD21 | 11 | 0.76 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:64:LEU:HG | 15 | 0.76 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:64:LEU:HG | 15 | 0.76 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:64:LEU:HG | 15 | 0.76 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD21 | 14 | 0.76 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD22 | 14 | 0.76 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD23 | 14 | 0.76 |
| (2,534) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:23:GLN:HB3 | 6 | 0.76 |
| (2,448) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:36:VAL:HA | 15 | 0.76 |
| (2,381) | 1:A:18:PRO:HB2 | 1:A:19:GLN:H | 5 | 0.76 |
| (2,358) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:13:LEU:HA | 6 | 0.76 |
| (2,358) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:13:LEU:HA | 6 | 0.76 |
| (2,358) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:13:LEU:HA | 6 | 0.76 |
| (2,338) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 8 | 0.76 |
| (2,279) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:12:ARG:HA | 5 | 0.76 |
| (2,279) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:12:ARG:HA | 14 | 0.76 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB1 | 6 | 0.76 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB2 | 6 | 0.76 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB3 | 6 | 0.76 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB1 | 7 | 0.76 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB2 | 7 | 0.76 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB3 | 7 | 0.76 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 1 | 0.76 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 1 | 0.76 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 1 | 0.76 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 12 | 0.76 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 12 | 0.76 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 12 | 0.76 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:51:PHE:HB2 | 5 | 0.76 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:51:PHE:HB2 | 5 | 0.76 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:51:PHE:HB2 | 5 | 0.76 |
| (2,203) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HB2 | 9 | 0.76 |
| (2,1920) | 1:A:76:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 3 | 0.76 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD21 | 8 | 0.76 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD22 | 8 | 0.76 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD23 | 8 | 0.76 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD21 | 8 | 0.76 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD22 | 8 | 0.76 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD23 | 8 | 0.76 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD21 | 8 | 0.76 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD22 | 8 | 0.76 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD23 | 8 | 0.76 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:ASN:HA | 9 | 0.76 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:ASN:HA | 9 | 0.76 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:ASN:HA | 9 | 0.76 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:ASN:HA | 15 | 0.76 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:ASN:HA | 15 | 0.76 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:ASN:HA | 15 | 0.76 |
| (2,183) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:11:ALA:H | 7 | 0.76 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:99:THR:H | 10 | 0.76 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:99:THR:H | 10 | 0.76 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:99:THR:H | 10 | 0.76 |
| (2,1749) | 1:A:95:HIS:HA | 1:A:98:LEU:HB3 | 1 | 0.76 |
| (2,1749) | 1:A:95:HIS:HA | 1:A:98:LEU:HB3 | 4 | 0.76 |
| (2,1696) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:25:LEU:HB3 | 3 | 0.76 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:91:THR:HA | 1 | 0.76 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:91:THR:HA | 1 | 0.76 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:91:THR:HA | 1 | 0.76 |
| (2,1675) | 1:A:90:LEU:HB2 | 1:A:90:LEU:H | 5 | 0.76 |
| (2,1675) | 1:A:90:LEU:HB2 | 1:A:90:LEU:H | 6 | 0.76 |
| (2,1675) | 1:A:90:LEU:HB2 | 1:A:90:LEU:H | 13 | 0.76 |
| (2,1675) | 1:A:90:LEU:HB2 | 1:A:90:LEU:H | 14 | 0.76 |
| (2,1675) | 1:A:90:LEU:HB2 | 1:A:90:LEU:H | 15 | 0.76 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:88:HIS:HB2 | 6 | 0.76 |
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:88:HIS:HB2 | 6 | 0.76 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1649) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:88:HIS:HB2 | 6 | 0.76 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:90:LEU:HB3 | 8 | 0.76 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:90:LEU:HB3 | 8 | 0.76 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:90:LEU:HB3 | 8 | 0.76 |
| (2,1614) | 1:A:87:PRO:HA | 1:A:51:PHE:HZ | 8 | 0.76 |
| (2,1549) | 1:A:81:ILE:HB | 1:A:82:PHE:H | 16 | 0.76 |
| (2,1539) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:99:THR:H | 3 | 0.76 |
| (2,1528) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:17:SER:H | 8 | 0.76 |
| (2,1528) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:17:SER:H | 12 | 0.76 |
| (2,1478) | 1:A:75:ASP:HB2 | 1:A:74:LEU:HB2 | 9 | 0.76 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 5 | 0.76 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 5 | 0.76 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 5 | 0.76 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB1 | 3 | 0.76 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB2 | 3 | 0.76 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB3 | 3 | 0.76 |
| (2,1369) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:97:ARG:H | 4 | 0.76 |
| (2,1298) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:HD21 | 1 | 0.76 |
| (2,1298) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:HD21 | 5 | 0.76 |
| (2,1298) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:HD21 | 9 | 0.76 |
| (2,1298) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:HD21 | 10 | 0.76 |
| (2,1192) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:65:ARG:HB2 | 12 | 0.76 |
| (2,117) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:4:SER:HA | 12 | 0.76 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:85:PRO:HA | 6 | 0.76 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:85:PRO:HA | 6 | 0.76 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:85:PRO:HA | 6 | 0.76 |
| (2,1064) | 1:A:53:ASP:HB3 | 1:A:50:ALA:H | 11 | 0.76 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 5 | 0.76 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 5 | 0.76 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 5 | 0.76 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 8 | 0.76 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 8 | 0.76 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 8 | 0.76 |
| (2,1026) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:52:LYS:H | 3 | 0.76 |
| (2,1026) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:52:LYS:H | 5 | 0.76 |
| (2,1026) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:52:LYS:H | 7 | 0.76 |
| (2,101) | 1:A:5:ALA:HA | 1:A:8:ASP:HB2 | 4 | 0.76 |
| (1,471) | 1:A:8:ASP:H | 1:A:9:LEU:H | 3 | 0.76 |
| (1,444) | 1:A:75:ASP:H | 1:A:74:LEU:HD21 | 16 | 0.76 |
| (1,444) | 1:A:75:ASP:H | 1:A:74:LEU:HD22 | 16 | 0.76 |
| (1,444) | 1:A:75:ASP:H | 1:A:74:LEU:HD23 | 16 | 0.76 |
| (1,254) | 1:A:79:THR:H | 1:A:78:PRO:HB3 | 1 | 0.76 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG21 | 10 | 0.76 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG22 | 10 | 0.76 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG23 | 10 | 0.76 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 9 | 0.76 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 9 | 0.76 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 9 | 0.76 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 11 | 0.76 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 11 | 0.76 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 11 | 0.76 |
| (1,191) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:65:ARG:HB2 | 10 | 0.76 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD21 | 7 | 0.76 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD22 | 7 | 0.76 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD23 | 7 | 0.76 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG21 | 1:A:33:THR:HB | 7 | 0.75 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG22 | 1:A:33:THR:HB | 7 | 0.75 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG23 | 1:A:33:THR:HB | 7 | 0.75 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG21 | 1:A:33:THR:HB | 14 | 0.75 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG22 | 1:A:33:THR:HB | 14 | 0.75 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG23 | 1:A:33:THR:HB | 14 | 0.75 |
| (2,923) | 1:A:101:SER:HB2 | 1:A:102:HIS:H | 11 | 0.75 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HG2 | 12 | 0.75 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HG2 | 12 | 0.75 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HG2 | 12 | 0.75 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:27:THR:HB | 15 | 0.75 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:27:THR:HB | 15 | 0.75 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:27:THR:HB | 15 | 0.75 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:56:ILE:HG12 | 12 | 0.75 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:56:ILE:HG12 | 12 | 0.75 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:56:ILE:HG12 | 12 | 0.75 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:64:LEU:HG | 13 | 0.75 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:64:LEU:HG | 13 | 0.75 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:64:LEU:HG | 13 | 0.75 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:22:GLN:HB2 | 15 | 0.75 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 15 | 0.75 |
| (2,585) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:22:GLN:HB2 | 15 | 0.75 |
| (2,534) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:23:GLN:HB3 | 2 | 0.75 |
| (2,534) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:23:GLN:HB3 | 13 | 0.75 |
| (2,534) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:23:GLN:HB3 | 16 | 0.75 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG21 | 2 | 0.75 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG22 | 2 | 0.75 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG23 | 2 | 0.75 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 2 | 0.75 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 2 | 0.75 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 2 | 0.75 |
| (2,454) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:17:SER:H | 2 | 0.75 |
| (2,454) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:17:SER:H | 4 | 0.75 |
| (2,381) | 1:A:18:PRO:HB2 | 1:A:19:GLN:H | 16 | 0.75 |
| (2,358) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:13:LEU:HA | 3 | 0.75 |
| (2,358) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:13:LEU:HA | 3 | 0.75 |
| (2,358) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:13:LEU:HA | 3 | 0.75 |
| (2,338) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 5 | 0.75 |
| (2,320) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:51:PHE:HA | 7 | 0.75 |
| (2,282) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:21:GLN:HA | 11 | 0.75 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB1 | 16 | 0.75 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB2 | 16 | 0.75 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB3 | 16 | 0.75 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:51:PHE:HB2 | 3 | 0.75 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:51:PHE:HB2 | 3 | 0.75 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:51:PHE:HB2 | 3 | 0.75 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:51:PHE:HB2 | 10 | 0.75 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:51:PHE:HB2 | 10 | 0.75 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:51:PHE:HB2 | 10 | 0.75 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:51:PHE:HB2 | 14 | 0.75 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:51:PHE:HB2 | 14 | 0.75 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:51:PHE:HB2 | 14 | 0.75 |
| (2,229) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:14:ASN:HD22 | 8 | 0.75 |
| (2,229) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:14:ASN:HD22 | 8 | 0.75 |
| (2,229) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:14:ASN:HD22 | 8 | 0.75 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD21 | 3 | 0.75 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD22 | 3 | 0.75 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD23 | 3 | 0.75 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD21 | 3 | 0.75 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD22 | 3 | 0.75 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD23 | 3 | 0.75 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD21 | 3 | 0.75 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD22 | 3 | 0.75 |
| (2,1900) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD23 | 3 | 0.75 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD11 | 6 | 0.75 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD12 | 6 | 0.75 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD13 | 6 | 0.75 |
| (2,1868) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:ASN:H | 6 | 0.75 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:ASN:HA | 3 | 0.75 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:ASN:HA | 3 | 0.75 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:ASN:HA | 3 | 0.75 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:ASN:HA | 11 | 0.75 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:ASN:HA | 11 | 0.75 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:ASN:HA | 11 | 0.75 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:99:THR:H | 15 | 0.75 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:99:THR:H | 15 | 0.75 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:99:THR:H | 15 | 0.75 |
| (2,1782) | 1:A:98:LEU:HD21 | 1:A:98:LEU:HA | 1 | 0.75 |
| (2,1782) | 1:A:98:LEU:HD22 | 1:A:98:LEU:HA | 1 | 0.75 |
| (2,1782) | 1:A:98:LEU:HD23 | 1:A:98:LEU:HA | 1 | 0.75 |
| (2,1749) | 1:A:95:HIS:HA | 1:A:98:LEU:HB3 | 3 | 0.75 |
| (2,1749) | 1:A:95:HIS:HA | 1:A:98:LEU:HB3 | 7 | 0.75 |
| (2,1740) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:97:ARG:HB2 | 6 | 0.75 |
| (2,1740) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:97:ARG:HB2 | 13 | 0.75 |
| (2,1696) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:25:LEU:HB3 | 5 | 0.75 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:91:THR:HA | 4 | 0.75 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:91:THR:HA | 4 | 0.75 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:91:THR:HA | 4 | 0.75 |
| (2,1675) | 1:A:90:LEU:HB2 | 1:A:90:LEU:H | 1 | 0.75 |
| (2,1675) | 1:A:90:LEU:HB2 | 1:A:90:LEU:H | 2 | 0.75 |
| (2,1675) | 1:A:90:LEU:HB2 | 1:A:90:LEU:H | 4 | 0.75 |
| (2,1675) | 1:A:90:LEU:HB2 | 1:A:90:LEU:H | 7 | 0.75 |
| (2,1675) | 1:A:90:LEU:HB2 | 1:A:90:LEU:H | 10 | 0.75 |
| (2,1675) | 1:A:90:LEU:HB2 | 1:A:90:LEU:H | 12 | 0.75 |
| (2,1673) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:91:THR:H | 13 | 0.75 |
| (2,1549) | 1:A:81:ILE:HB | 1:A:82:PHE:H | 9 | 0.75 |
| (2,1528) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:17:SER:H | 6 | 0.75 |
| (2,1528) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:17:SER:H | 9 | 0.75 |
| (2,1528) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:17:SER:H | 10 | 0.75 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:74:LEU:HB3 | 11 | 0.75 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:74:LEU:HB3 | 11 | 0.75 |
| (2,1508) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:74:LEU:HB3 | 11 | 0.75 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 14 | 0.75 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 14 | 0.75 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 14 | 0.75 |
| (2,1369) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:97:ARG:H | 8 | 0.75 |
| (2,1298) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:HD21 | 15 | 0.75 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD21 | 4 | 0.75 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD22 | 4 | 0.75 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD23 | 4 | 0.75 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD21 | 7 | 0.75 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD22 | 7 | 0.75 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD23 | 7 | 0.75 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD21 | 15 | 0.75 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD22 | 15 | 0.75 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD23 | 15 | 0.75 |
| (2,1064) | 1:A:53:ASP:HB3 | 1:A:50:ALA:H | 3 | 0.75 |
| (2,1064) | 1:A:53:ASP:HB3 | 1:A:50:ALA:H | 15 | 0.75 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 3 | 0.75 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 3 | 0.75 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 3 | 0.75 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 6 | 0.75 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 6 | 0.75 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 6 | 0.75 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 10 | 0.75 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 10 | 0.75 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 10 | 0.75 |
| (2,1026) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:52:LYS:H | 6 | 0.75 |
| (2,1026) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:52:LYS:H | 9 | 0.75 |
| (2,1026) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:52:LYS:H | 15 | 0.75 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD21 | 4 | 0.75 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD22 | 4 | 0.75 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD23 | 4 | 0.75 |
| (2,101) | 1:A:5:ALA:HA | 1:A:8:ASP:HB2 | 7 | 0.75 |
| (2,101) | 1:A:5:ALA:HA | 1:A:8:ASP:HB2 | 15 | 0.75 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 9 | 0.75 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 9 | 0.75 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 9 | 0.75 |
| (1,469) | 1:A:8:ASP:H | 1:A:7:THR:HB | 8 | 0.75 |
| (1,254) | 1:A:79:THR:H | 1:A:78:PRO:HB3 | 7 | 0.75 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG21 | 15 | 0.75 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG22 | 15 | 0.75 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG23 | 15 | 0.75 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 4 | 0.75 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 4 | 0.75 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 4 | 0.75 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 14 | 0.75 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 14 | 0.75 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 14 | 0.75 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD21 | 1 | 0.75 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD22 | 1 | 0.75 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD23 | 1 | 0.75 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD21 | 3 | 0.75 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD22 | 3 | 0.75 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD23 | 3 | 0.75 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD21 | 15 | 0.75 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD22 | 15 | 0.75 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD23 | 15 | 0.75 |
| (2,913) | 1:A:43:GLU:HG2 | 1:A:42:PRO:HA | 3 | 0.74 |
| (2,913) | 1:A:43:GLU:HG2 | 1:A:42:PRO:HA | 9 | 0.74 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HG2 | 8 | 0.74 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HG2 | 8 | 0.74 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HG2 | 8 | 0.74 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HG2 | 13 | 0.74 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HG2 | 13 | 0.74 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HG2 | 13 | 0.74 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:27:THR:HB | 8 | 0.74 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:27:THR:HB | 8 | 0.74 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:27:THR:HB | 8 | 0.74 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:27:THR:HB | 11 | 0.74 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:27:THR:HB | 11 | 0.74 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:27:THR:HB | 11 | 0.74 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:27:THR:HB | 12 | 0.74 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:27:THR:HB | 12 | 0.74 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:27:THR:HB | 12 | 0.74 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:27:THR:HB | 13 | 0.74 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:27:THR:HB | 13 | 0.74 |
| (2,718) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:27:THR:HB | 13 | 0.74 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:56:ILE:HG12 | 6 | 0.74 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:56:ILE:HG12 | 6 | 0.74 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:56:ILE:HG12 | 6 | 0.74 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:64:LEU:HG | 7 | 0.74 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:64:LEU:HG | 7 | 0.74 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:64:LEU:HG | 7 | 0.74 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD21 | 15 | 0.74 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD22 | 15 | 0.74 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD23 | 15 | 0.74 |
| (2,534) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:23:GLN:HB3 | 14 | 0.74 |
| (2,454) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:17:SER:H | 6 | 0.74 |
| (2,454) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:17:SER:H | 10 | 0.74 |
| (2,368) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:18:PRO:HB3 | 10 | 0.74 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB1 | 1 | 0.74 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB2 | 1 | 0.74 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB3 | 1 | 0.74 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB1 | 4 | 0.74 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB2 | 4 | 0.74 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB3 | 4 | 0.74 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:51:PHE:HB2 | 4 | 0.74 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:51:PHE:HB2 | 4 | 0.74 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:51:PHE:HB2 | 4 | 0.74 |
| (2,203) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HB2 | 12 | 0.74 |
| (2,1868) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:ASN:H | 2 | 0.74 |
| (2,1868) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:ASN:H | 5 | 0.74 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:ASN:HA | 5 | 0.74 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:ASN:HA | 5 | 0.74 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:ASN:HA | 5 | 0.74 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:ASN:HA | 13 | 0.74 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:ASN:HA | 13 | 0.74 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:ASN:HA | 13 | 0.74 |
| (2,1782) | 1:A:98:LEU:HD21 | 1:A:98:LEU:HA | 7 | 0.74 |
| (2,1782) | 1:A:98:LEU:HD22 | 1:A:98:LEU:HA | 7 | 0.74 |
| (2,1782) | 1:A:98:LEU:HD23 | 1:A:98:LEU:HA | 7 | 0.74 |
| (2,1773) | 1:A:97:ARG:HD2 | 1:A:100:GLN:H | 15 | 0.74 |
| (2,1749) | 1:A:95:HIS:HA | 1:A:98:LEU:HB3 | 10 | 0.74 |
| (2,1740) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:97:ARG:HB2 | 4 | 0.74 |
| (2,1740) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:97:ARG:HB2 | 12 | 0.74 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD11 | 3 | 0.74 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD12 | 3 | 0.74 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD13 | 3 | 0.74 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD11 | 3 | 0.74 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD12 | 3 | 0.74 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD13 | 3 | 0.74 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD11 | 3 | 0.74 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD12 | 3 | 0.74 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD13 | 3 | 0.74 |
| (2,1675) | 1:A:90:LEU:HB2 | 1:A:90:LEU:H | 11 | 0.74 |
| (2,1675) | 1:A:90:LEU:HB2 | 1:A:90:LEU:H | 16 | 0.74 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:90:LEU:HB3 | 1 | 0.74 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:90:LEU:HB3 | 1 | 0.74 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:90:LEU:HB3 | 1 | 0.74 |
| (2,1549) | 1:A:81:ILE:HB | 1:A:82:PHE:H | 11 | 0.74 |
| (2,1537) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:H | 5 | 0.74 |
| (2,1528) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:17:SER:H | 16 | 0.74 |
| (2,1522) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:13:LEU:HA | 4 | 0.74 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 2 | 0.74 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 2 | 0.74 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 2 | 0.74 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 8 | 0.74 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 8 | 0.74 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 8 | 0.74 |
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:39:HIS:HB2 | 14 | 0.74 |
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:39:HIS:HB2 | 14 | 0.74 |
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:39:HIS:HB2 | 14 | 0.74 |
| (2,139) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:4:SER:HB3 | 12 | 0.74 |
| (2,139) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:4:SER:HB3 | 12 | 0.74 |
| (2,139) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:4:SER:HB3 | 12 | 0.74 |
| (2,1369) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:97:ARG:H | 6 | 0.74 |
| (2,1343) | 1:A:70:HIS:HA | 1:A:73:GLY:HA3 | 12 | 0.74 |
| (2,1298) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:HD21 | 2 | 0.74 |
| (2,1298) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:HD21 | 3 | 0.74 |
| (2,1212) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:ASN:HD21 | 10 | 0.74 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:85:PRO:HA | 3 | 0.74 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:85:PRO:HA | 3 | 0.74 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:85:PRO:HA | 3 | 0.74 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD21 | 3 | 0.74 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD22 | 3 | 0.74 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD23 | 3 | 0.74 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 12 | 0.74 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 12 | 0.74 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 12 | 0.74 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD21 | 7 | 0.74 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD22 | 7 | 0.74 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD23 | 7 | 0.74 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD21 | 13 | 0.74 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD22 | 13 | 0.74 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD23 | 13 | 0.74 |
| (2,101) | 1:A:5:ALA:HA | 1:A:8:ASP:HB2 | 2 | 0.74 |
| (2,101) | 1:A:5:ALA:HA | 1:A:8:ASP:HB2 | 6 | 0.74 |
| (1,471) | 1:A:8:ASP:H | 1:A:9:LEU:H | 15 | 0.74 |
| (1,469) | 1:A:8:ASP:H | 1:A:7:THR:HB | 13 | 0.74 |
| (1,191) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:65:ARG:HB2 | 3 | 0.74 |
| (1,191) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:65:ARG:HB2 | 6 | 0.74 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG21 | 1:A:33:THR:HB | 1 | 0.73 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG22 | 1:A:33:THR:HB | 1 | 0.73 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG23 | 1:A:33:THR:HB | 1 | 0.73 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG21 | 1:A:33:THR:HB | 5 | 0.73 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG22 | 1:A:33:THR:HB | 5 | 0.73 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG23 | 1:A:33:THR:HB | 5 | 0.73 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG21 | 1:A:33:THR:HB | 13 | 0.73 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG22 | 1:A:33:THR:HB | 13 | 0.73 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG23 | 1:A:33:THR:HB | 13 | 0.73 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,923) | 1:A:101:SER:HB2 | 1:A:102:HIS:H | 13 | 0.73 |
| (2,892) | 1:A:43:GLU:HG2 | 1:A:41:THR:HB | 4 | 0.73 |
| (2,891) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:43:GLU:H | 7 | 0.73 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:56:ILE:HG12 | 10 | 0.73 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:56:ILE:HG12 | 10 | 0.73 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:56:ILE:HG12 | 10 | 0.73 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:64:LEU:HG | 16 | 0.73 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:64:LEU:HG | 16 | 0.73 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:64:LEU:HG | 16 | 0.73 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD21 | 1 | 0.73 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD22 | 1 | 0.73 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD23 | 1 | 0.73 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 1 | 0.73 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 1 | 0.73 |
| (2,55) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 1 | 0.73 |
| (2,534) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:23:GLN:HB3 | 3 | 0.73 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG21 | 1 | 0.73 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG22 | 1 | 0.73 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG23 | 1 | 0.73 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 1 | 0.73 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 1 | 0.73 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 1 | 0.73 |
| (2,425) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:21:GLN:HG2 | 4 | 0.73 |
| (2,425) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:21:GLN:HG2 | 9 | 0.73 |
| (2,368) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:18:PRO:HB3 | 3 | 0.73 |
| (2,320) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:51:PHE:HA | 13 | 0.73 |
| (2,318) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:87:PRO:HD2 | 3 | 0.73 |
| (2,318) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:87:PRO:HD2 | 8 | 0.73 |
| (2,318) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:87:PRO:HD2 | 9 | 0.73 |
| (2,318) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:87:PRO:HD2 | 10 | 0.73 |
| (2,318) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:87:PRO:HD2 | 11 | 0.73 |
| (2,318) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:87:PRO:HD2 | 14 | 0.73 |
| (2,318) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:87:PRO:HD2 | 15 | 0.73 |
| (2,318) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:87:PRO:HD2 | 16 | 0.73 |
| (2,282) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:21:GLN:HA | 1 | 0.73 |
| (2,282) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:21:GLN:HA | 8 | 0.73 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:51:PHE:HB2 | 2 | 0.73 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:51:PHE:HB2 | 2 | 0.73 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:51:PHE:HB2 | 2 | 0.73 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:51:PHE:HB2 | 11 | 0.73 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:51:PHE:HB2 | 11 | 0.73 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:51:PHE:HB2 | 11 | 0.73 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:51:PHE:HB2 | 12 | 0.73 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:51:PHE:HB2 | 12 | 0.73 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:51:PHE:HB2 | 12 | 0.73 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:51:PHE:HB2 | 13 | 0.73 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:51:PHE:HB2 | 13 | 0.73 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:51:PHE:HB2 | 13 | 0.73 |
| (2,203) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HB2 | 1 | 0.73 |
| (2,191) | 1:A:9:LEU:HA | 1:A:12:ARG:HD3 | 1 | 0.73 |
| (2,191) | 1:A:9:LEU:HA | 1:A:12:ARG:HD3 | 11 | 0.73 |
| (2,1868) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:ASN:H | 8 | 0.73 |
| (2,1868) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:ASN:H | 10 | 0.73 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:ASN:HA | 10 | 0.73 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:ASN:HA | 10 | 0.73 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:ASN:HA | 10 | 0.73 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:99:THR:H | 9 | 0.73 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:99:THR:H | 9 | 0.73 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:99:THR:H | 9 | 0.73 |
| (2,1782) | 1:A:98:LEU:HD21 | 1:A:98:LEU:HA | 5 | 0.73 |
| (2,1782) | 1:A:98:LEU:HD22 | 1:A:98:LEU:HA | 5 | 0.73 |
| (2,1782) | 1:A:98:LEU:HD23 | 1:A:98:LEU:HA | 5 | 0.73 |
| (2,1768) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:96:THR:HB | 7 | 0.73 |
| (2,1768) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:96:THR:HB | 16 | 0.73 |
| (2,1749) | 1:A:95:HIS:HA | 1:A:98:LEU:HB3 | 12 | 0.73 |
| (2,1749) | 1:A:95:HIS:HA | 1:A:98:LEU:HB3 | 16 | 0.73 |
| (2,1740) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:97:ARG:HB2 | 15 | 0.73 |
| (2,1696) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:25:LEU:HB3 | 4 | 0.73 |
| (2,1696) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:25:LEU:HB3 | 11 | 0.73 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD11 | 11 | 0.73 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD12 | 11 | 0.73 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD13 | 11 | 0.73 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD11 | 11 | 0.73 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD12 | 11 | 0.73 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD13 | 11 | 0.73 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD11 | 11 | 0.73 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD12 | 11 | 0.73 |
| (2,1686) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD13 | 11 | 0.73 |
| (2,1675) | 1:A:90:LEU:HB2 | 1:A:90:LEU:H | 3 | 0.73 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:90:LEU:HB3 | 5 | 0.73 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:90:LEU:HB3 | 5 | 0.73 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:90:LEU:HB3 | 5 | 0.73 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 4 | 0.73 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 4 | 0.73 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 4 | 0.73 |
| (2,1624) | 1:A:87:PRO:HB2 | 1:A:26:ALA:HA | 15 | 0.73 |
| (2,1528) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:17:SER:H | 3 | 0.73 |
| (2,1522) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:13:LEU:HA | 14 | 0.73 |
| (2,1497) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:79:THR:H | 9 | 0.73 |
| (2,1497) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:79:THR:H | 11 | 0.73 |
| (2,1471) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:74:LEU:H | 4 | 0.73 |
| (2,1471) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:74:LEU:H | 8 | 0.73 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 3 | 0.73 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 3 | 0.73 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 3 | 0.73 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 12 | 0.73 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 12 | 0.73 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 12 | 0.73 |
| (2,1451) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:88:HIS:HD2 | 8 | 0.73 |
| (2,1451) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:88:HIS:HD2 | 13 | 0.73 |
| (2,1451) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:88:HIS:HD2 | 15 | 0.73 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB1 | 10 | 0.73 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB2 | 10 | 0.73 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB3 | 10 | 0.73 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB1 | 13 | 0.73 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB2 | 13 | 0.73 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB3 | 13 | 0.73 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB1 | 16 | 0.73 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB2 | 16 | 0.73 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB3 | 16 | 0.73 |
| (2,1343) | 1:A:70:HIS:HA | 1:A:73:GLY:HA3 | 10 | 0.73 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD11 | 9 | 0.73 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD12 | 9 | 0.73 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD13 | 9 | 0.73 |
| (2,1212) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:ASN:HD21 | 13 | 0.73 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG21 | 6 | 0.73 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG22 | 6 | 0.73 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG23 | 6 | 0.73 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG21 | 6 | 0.73 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG22 | 6 | 0.73 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG23 | 6 | 0.73 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG21 | 6 | 0.73 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG22 | 6 | 0.73 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG23 | 6 | 0.73 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG21 | 7 | 0.73 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG22 | 7 | 0.73 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG23 | 7 | 0.73 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG21 | 7 | 0.73 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG22 | 7 | 0.73 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG23 | 7 | 0.73 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG21 | 7 | 0.73 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG22 | 7 | 0.73 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG23 | 7 | 0.73 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG21 | 10 | 0.73 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG22 | 10 | 0.73 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG23 | 10 | 0.73 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG21 | 10 | 0.73 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG22 | 10 | 0.73 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG23 | 10 | 0.73 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG21 | 10 | 0.73 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG22 | 10 | 0.73 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG23 | 10 | 0.73 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG21 | 14 | 0.73 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG22 | 14 | 0.73 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG23 | 14 | 0.73 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG21 | 14 | 0.73 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG22 | 14 | 0.73 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG23 | 14 | 0.73 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG21 | 14 | 0.73 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG22 | 14 | 0.73 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG23 | 14 | 0.73 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD11 | 2 | 0.73 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD12 | 2 | 0.73 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD13 | 2 | 0.73 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD11 | 13 | 0.73 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD12 | 13 | 0.73 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD13 | 13 | 0.73 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD11 | 14 | 0.73 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD12 | 14 | 0.73 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD13 | 14 | 0.73 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD21 | 12 | 0.73 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD22 | 12 | 0.73 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD23 | 12 | 0.73 |
| (2,1064) | 1:A:53:ASP:HB3 | 1:A:50:ALA:H | 4 | 0.73 |
| (2,1026) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:52:LYS:H | 4 | 0.73 |
| (2,1026) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:52:LYS:H | 10 | 0.73 |
| (2,1026) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:52:LYS:H | 12 | 0.73 |
| (2,1026) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:52:LYS:H | 13 | 0.73 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD21 | 9 | 0.73 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD22 | 9 | 0.73 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD23 | 9 | 0.73 |
| (2,101) | 1:A:5:ALA:HA | 1:A:8:ASP:HB2 | 13 | 0.73 |
| (1,602) | 1:A:57:ASP:H | 1:A:57:ASP:HB3 | 13 | 0.73 |
| (1,469) | 1:A:8:ASP:H | 1:A:7:THR:HB | 15 | 0.73 |
| (1,389) | 1:A:65:ARG:HE | 1:A:65:ARG:HG2 | 2 | 0.73 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG21 | 9 | 0.73 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG22 | 9 | 0.73 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG23 | 9 | 0.73 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 6 | 0.73 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 6 | 0.73 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 6 | 0.73 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 16 | 0.73 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 16 | 0.73 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 16 | 0.73 |
| (1,191) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:65:ARG:HB2 | 5 | 0.73 |
| (1,191) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:65:ARG:HB2 | 13 | 0.73 |
| (1,127) | 1:A:69:THR:H | 1:A:68:LEU:HB2 | 14 | 0.73 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB1 | 15 | 0.72 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB2 | 15 | 0.72 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB3 | 15 | 0.72 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG21 | 1:A:33:THR:HB | 3 | 0.72 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG22 | 1:A:33:THR:HB | 3 | 0.72 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG23 | 1:A:33:THR:HB | 3 | 0.72 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG21 | 1:A:33:THR:HB | 11 | 0.72 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG22 | 1:A:33:THR:HB | 11 | 0.72 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG23 | 1:A:33:THR:HB | 11 | 0.72 |
| (2,894) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:43:GLU:HB2 | 14 | 0.72 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HG2 | 7 | 0.72 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HG2 | 7 | 0.72 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HG2 | 7 | 0.72 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HG2 | 10 | 0.72 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HG2 | 10 | 0.72 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HG2 | 10 | 0.72 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:56:ILE:HG12 | 16 | 0.72 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:56:ILE:HG12 | 16 | 0.72 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:56:ILE:HG12 | 16 | 0.72 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:71:ASN:HB2 | 11 | 0.72 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:71:ASN:HB2 | 11 | 0.72 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:71:ASN:HB2 | 11 | 0.72 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:64:LEU:HG | 3 | 0.72 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:64:LEU:HG | 3 | 0.72 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:64:LEU:HG | 3 | 0.72 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD21 | 2 | 0.72 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD22 | 2 | 0.72 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD23 | 2 | 0.72 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD21 | 7 | 0.72 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD22 | 7 | 0.72 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD23 | 7 | 0.72 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD21 | 13 | 0.72 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD22 | 13 | 0.72 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD23 | 13 | 0.72 |
| (2,534) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:23:GLN:HB3 | 5 | 0.72 |
| (2,534) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:23:GLN:HB3 | 8 | 0.72 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG21 | 8 | 0.72 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG22 | 8 | 0.72 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG23 | 8 | 0.72 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 8 | 0.72 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 8 | 0.72 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 8 | 0.72 |
| (2,448) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:36:VAL:HA | 2 | 0.72 |
| (2,425) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:21:GLN:HG2 | 10 | 0.72 |
| (2,425) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:21:GLN:HG2 | 13 | 0.72 |
| (2,370) | 1:A:17:SER:HB2 | 1:A:20:GLN:HG3 | 10 | 0.72 |
| (2,368) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:18:PRO:HB3 | 2 | 0.72 |
| (2,320) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:51:PHE:HA | 12 | 0.72 |
| (2,320) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:51:PHE:HA | 16 | 0.72 |
| (2,318) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:87:PRO:HD2 | 1 | 0.72 |
| (2,318) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:87:PRO:HD2 | 2 | 0.72 |
| (2,318) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:87:PRO:HD2 | 4 | 0.72 |
| (2,318) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:87:PRO:HD2 | 5 | 0.72 |
| (2,318) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:87:PRO:HD2 | 6 | 0.72 |
| (2,318) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:87:PRO:HD2 | 7 | 0.72 |
| (2,318) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:87:PRO:HD2 | 12 | 0.72 |
| (2,318) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:87:PRO:HD2 | 13 | 0.72 |
| (2,282) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:21:GLN:HA | 7 | 0.72 |
| (2,281) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:12:ARG:H | 1 | 0.72 |
| (2,279) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:12:ARG:HA | 6 | 0.72 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB1 | 15 | 0.72 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB2 | 15 | 0.72 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB3 | 15 | 0.72 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:51:PHE:HB2 | 6 | 0.72 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:51:PHE:HB2 | 6 | 0.72 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:51:PHE:HB2 | 6 | 0.72 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:51:PHE:HB2 | 7 | 0.72 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:51:PHE:HB2 | 7 | 0.72 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:51:PHE:HB2 | 7 | 0.72 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:51:PHE:HB2 | 16 | 0.72 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:51:PHE:HB2 | 16 | 0.72 |
| (2,234) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:51:PHE:HB2 | 16 | 0.72 |
| (2,1749) | 1:A:95:HIS:HA | 1:A:98:LEU:HB3 | 2 | 0.72 |
| (2,1749) | 1:A:95:HIS:HA | 1:A:98:LEU:HB3 | 15 | 0.72 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:91:THR:HA | 12 | 0.72 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:91:THR:HA | 12 | 0.72 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:91:THR:HA | 12 | 0.72 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:90:LEU:HB3 | 4 | 0.72 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:90:LEU:HB3 | 4 | 0.72 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:90:LEU:HB3 | 4 | 0.72 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:90:LEU:HB3 | 12 | 0.72 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:90:LEU:HB3 | 12 | 0.72 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:90:LEU:HB3 | 12 | 0.72 |
| (2,1624) | 1:A:87:PRO:HB2 | 1:A:26:ALA:HA | 4 | 0.72 |
| (2,1624) | 1:A:87:PRO:HB2 | 1:A:26:ALA:HA | 8 | 0.72 |
| (2,1614) | 1:A:87:PRO:HA | 1:A:51:PHE:HZ | 13 | 0.72 |
| (2,1549) | 1:A:81:ILE:HB | 1:A:82:PHE:H | 3 | 0.72 |
| (2,1549) | 1:A:81:ILE:HB | 1:A:82:PHE:H | 5 | 0.72 |
| (2,1522) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:13:LEU:HA | 2 | 0.72 |
| (2,1522) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:13:LEU:HA | 3 | 0.72 |
| (2,1471) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:74:LEU:H | 5 | 0.72 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 16 | 0.72 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 16 | 0.72 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 16 | 0.72 |
| (2,1451) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:88:HIS:HD2 | 1 | 0.72 |
| (2,1451) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:88:HIS:HD2 | 2 | 0.72 |
| (2,1451) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:88:HIS:HD2 | 3 | 0.72 |
| (2,1451) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:88:HIS:HD2 | 4 | 0.72 |
| (2,1451) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:88:HIS:HD2 | 9 | 0.72 |
| (2,1451) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:88:HIS:HD2 | 11 | 0.72 |
| (2,1451) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:88:HIS:HD2 | 12 | 0.72 |
| (2,1442) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:89:ALA:H | 5 | 0.72 |
| (2,1442) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:89:ALA:H | 15 | 0.72 |
| (2,141) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:43:GLU:HG2 | 14 | 0.72 |
| (2,141) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:43:GLU:HG2 | 14 | 0.72 |
| (2,141) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:43:GLU:HG2 | 14 | 0.72 |
| (2,141) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:43:GLU:HG2 | 15 | 0.72 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,141) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:43:GLU:HG2 | 15 | 0.72 |
| (2,141) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:43:GLU:HG2 | 15 | 0.72 |
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:39:HIS:HB2 | 12 | 0.72 |
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:39:HIS:HB2 | 12 | 0.72 |
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:39:HIS:HB2 | 12 | 0.72 |
| (2,139) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:4:SER:HB3 | 13 | 0.72 |
| (2,139) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:4:SER:HB3 | 13 | 0.72 |
| (2,139) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:4:SER:HB3 | 13 | 0.72 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB1 | 5 | 0.72 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB2 | 5 | 0.72 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB3 | 5 | 0.72 |
| (2,1369) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:97:ARG:H | 2 | 0.72 |
| (2,1369) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:97:ARG:H | 5 | 0.72 |
| (2,1369) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:97:ARG:H | 11 | 0.72 |
| (2,1369) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:97:ARG:H | 13 | 0.72 |
| (2,1193) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:65:ARG:HB2 | 1 | 0.72 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:51:PHE:HB3 | 16 | 0.72 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:51:PHE:HB3 | 16 | 0.72 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:51:PHE:HB3 | 16 | 0.72 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG21 | 3 | 0.72 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG22 | 3 | 0.72 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG23 | 3 | 0.72 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG21 | 3 | 0.72 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG22 | 3 | 0.72 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG23 | 3 | 0.72 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG21 | 3 | 0.72 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG22 | 3 | 0.72 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG23 | 3 | 0.72 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG21 | 13 | 0.72 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG22 | 13 | 0.72 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG23 | 13 | 0.72 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG21 | 13 | 0.72 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG22 | 13 | 0.72 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG23 | 13 | 0.72 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG21 | 13 | 0.72 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG22 | 13 | 0.72 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG23 | 13 | 0.72 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:85:PRO:HA | 14 | 0.72 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:85:PRO:HA | 14 | 0.72 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:85:PRO:HA | 14 | 0.72 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD11 | 4 | 0.72 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD12 | 4 | 0.72 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD13 | 4 | 0.72 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD11 | 10 | 0.72 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD12 | 10 | 0.72 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD13 | 10 | 0.72 |
| (2,1064) | 1:A:53:ASP:HB3 | 1:A:50:ALA:H | 6 | 0.72 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 7 | 0.72 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 7 | 0.72 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 7 | 0.72 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 13 | 0.72 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 13 | 0.72 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 13 | 0.72 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD21 | 1 | 0.72 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD22 | 1 | 0.72 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD23 | 1 | 0.72 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD21 | 3 | 0.72 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD22 | 3 | 0.72 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD23 | 3 | 0.72 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD21 | 5 | 0.72 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD22 | 5 | 0.72 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD23 | 5 | 0.72 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD21 | 6 | 0.72 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD22 | 6 | 0.72 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD23 | 6 | 0.72 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD21 | 11 | 0.72 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD22 | 11 | 0.72 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD23 | 11 | 0.72 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD21 | 12 | 0.72 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD22 | 12 | 0.72 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD23 | 12 | 0.72 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD21 | 15 | 0.72 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD22 | 15 | 0.72 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD23 | 15 | 0.72 |
| (2,101) | 1:A:5:ALA:HA | 1:A:8:ASP:HB2 | 9 | 0.72 |
| (2,101) | 1:A:5:ALA:HA | 1:A:8:ASP:HB2 | 10 | 0.72 |
| (1,469) | 1:A:8:ASP:H | 1:A:7:THR:HB | 11 | 0.72 |
| (1,469) | 1:A:8:ASP:H | 1:A:7:THR:HB | 12 | 0.72 |
| (1,351) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HD21 | 7 | 0.72 |
| (1,351) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HD22 | 7 | 0.72 |
| (1,351) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HD23 | 7 | 0.72 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 3 | 0.72 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 3 | 0.72 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 3 | 0.72 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 12 | 0.72 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 12 | 0.72 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 12 | 0.72 |
| (1,191) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:65:ARG:HB2 | 9 | 0.72 |
| (1,127) | 1:A:69:THR:H | 1:A:68:LEU:HB2 | 9 | 0.72 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB1 | 4 | 0.71 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB2 | 4 | 0.71 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB3 | 4 | 0.71 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG21 | 1:A:33:THR:HB | 2 | 0.71 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG22 | 1:A:33:THR:HB | 2 | 0.71 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG23 | 1:A:33:THR:HB | 2 | 0.71 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG21 | 1:A:33:THR:HB | 10 | 0.71 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG22 | 1:A:33:THR:HB | 10 | 0.71 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG23 | 1:A:33:THR:HB | 10 | 0.71 |
| (2,914) | 1:A:43:GLU:HG2 | 1:A:43:GLU:H | 6 | 0.71 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HG2 | 15 | 0.71 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HG2 | 15 | 0.71 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HG2 | 15 | 0.71 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD21 | 13 | 0.71 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD22 | 13 | 0.71 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD23 | 13 | 0.71 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD21 | 13 | 0.71 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD22 | 13 | 0.71 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD23 | 13 | 0.71 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD21 | 13 | 0.71 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD22 | 13 | 0.71 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD23 | 13 | 0.71 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:64:LEU:HG | 5 | 0.71 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:64:LEU:HG | 5 | 0.71 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:64:LEU:HG | 5 | 0.71 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD21 | 3 | 0.71 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD22 | 3 | 0.71 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD23 | 3 | 0.71 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD21 | 11 | 0.71 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD22 | 11 | 0.71 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD23 | 11 | 0.71 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG21 | 9 | 0.71 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG22 | 9 | 0.71 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG23 | 9 | 0.71 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 9 | 0.71 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 9 | 0.71 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 9 | 0.71 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,454) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:17:SER:H | 13 | 0.71 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 1 | 0.71 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 1 | 0.71 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 1 | 0.71 |
| (2,425) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:21:GLN:HG2 | 12 | 0.71 |
| (2,425) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:21:GLN:HG2 | 15 | 0.71 |
| (2,368) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:18:PRO:HB3 | 13 | 0.71 |
| (2,320) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:51:PHE:HA | 2 | 0.71 |
| (2,320) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:51:PHE:HA | 6 | 0.71 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB1 | 3 | 0.71 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB2 | 3 | 0.71 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB3 | 3 | 0.71 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB1 | 11 | 0.71 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB2 | 11 | 0.71 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB3 | 11 | 0.71 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB1 | 13 | 0.71 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB2 | 13 | 0.71 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB3 | 13 | 0.71 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB1 | 14 | 0.71 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB2 | 14 | 0.71 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB3 | 14 | 0.71 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD11 | 12 | 0.71 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD12 | 12 | 0.71 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD13 | 12 | 0.71 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG21 | 7 | 0.71 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG22 | 7 | 0.71 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG23 | 7 | 0.71 |
| (2,1768) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:96:THR:HB | 12 | 0.71 |
| (2,1740) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:97:ARG:HB2 | 3 | 0.71 |
| (2,1740) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:97:ARG:HB2 | 7 | 0.71 |
| (2,1740) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:97:ARG:HB2 | 16 | 0.71 |
| (2,1696) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:25:LEU:HB3 | 2 | 0.71 |
| (2,1696) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:25:LEU:HB3 | 6 | 0.71 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:91:THR:HA | 5 | 0.71 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:91:THR:HA | 5 | 0.71 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:91:THR:HA | 5 | 0.71 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:91:THR:HA | 14 | 0.71 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:91:THR:HA | 14 | 0.71 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:91:THR:HA | 14 | 0.71 |
| (2,1673) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:91:THR:H | 2 | 0.71 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:90:LEU:HB3 | 6 | 0.71 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:90:LEU:HB3 | 6 | 0.71 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:90:LEU:HB3 | 6 | 0.71 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:90:LEU:HB3 | 10 | 0.71 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:90:LEU:HB3 | 10 | 0.71 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:90:LEU:HB3 | 10 | 0.71 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:90:LEU:HB3 | 14 | 0.71 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:90:LEU:HB3 | 14 | 0.71 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:90:LEU:HB3 | 14 | 0.71 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 5 | 0.71 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 5 | 0.71 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 5 | 0.71 |
| (2,1614) | 1:A:87:PRO:HA | 1:A:51:PHE:HZ | 6 | 0.71 |
| (2,1537) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:H | 9 | 0.71 |
| (2,1528) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:17:SER:H | 4 | 0.71 |
| (2,1521) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:21:GLN:HG2 | 3 | 0.71 |
| (2,1521) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:21:GLN:HG2 | 11 | 0.71 |
| (2,1497) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:79:THR:H | 2 | 0.71 |
| (2,1497) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:79:THR:H | 4 | 0.71 |
| (2,1497) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:79:THR:H | 8 | 0.71 |
| (2,1471) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:74:LEU:H | 1 | 0.71 |
| (2,1471) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:74:LEU:H | 13 | 0.71 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 4 | 0.71 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 4 | 0.71 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 4 | 0.71 |
| (2,1451) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:88:HIS:HD2 | 5 | 0.71 |
| (2,1451) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:88:HIS:HD2 | 6 | 0.71 |
| (2,1451) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:88:HIS:HD2 | 7 | 0.71 |
| (2,1451) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:88:HIS:HD2 | 14 | 0.71 |
| (2,1451) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:88:HIS:HD2 | 16 | 0.71 |
| (2,1442) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:89:ALA:H | 2 | 0.71 |
| (2,1442) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:89:ALA:H | 4 | 0.71 |
| (2,1442) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:89:ALA:H | 16 | 0.71 |
| (2,1392) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:81:ILE:H | 14 | 0.71 |
| (2,139) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:4:SER:HB3 | 4 | 0.71 |
| (2,139) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:4:SER:HB3 | 4 | 0.71 |
| (2,139) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:4:SER:HB3 | 4 | 0.71 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB1 | 4 | 0.71 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB2 | 4 | 0.71 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB3 | 4 | 0.71 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB1 | 12 | 0.71 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB2 | 12 | 0.71 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB3 | 12 | 0.71 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB1 | 14 | 0.71 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB2 | 14 | 0.71 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB3 | 14 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG21 | 2 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG22 | 2 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG23 | 2 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG21 | 2 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG22 | 2 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG23 | 2 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG21 | 2 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG22 | 2 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG23 | 2 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG21 | 8 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG22 | 8 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG23 | 8 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG21 | 8 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG22 | 8 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG23 | 8 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG21 | 8 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG22 | 8 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG23 | 8 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG21 | 12 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG22 | 12 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG23 | 12 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG21 | 12 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG22 | 12 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG23 | 12 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG21 | 12 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG22 | 12 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG23 | 12 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG21 | 16 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG22 | 16 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG23 | 16 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG21 | 16 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG22 | 16 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG23 | 16 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG21 | 16 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG22 | 16 | 0.71 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG23 | 16 | 0.71 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:85:PRO:HA | 11 | 0.71 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:85:PRO:HA | 11 | 0.71 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:85:PRO:HA | 11 | 0.71 |
| (2,1100) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:90:LEU:HB2 | 9 | 0.71 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1100) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:90:LEU:HB2 | 9 | 0.71 |
| (2,1100) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:90:LEU:HB2 | 9 | 0.71 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD11 | 15 | 0.71 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD12 | 15 | 0.71 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD13 | 15 | 0.71 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 11 | 0.71 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 11 | 0.71 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 11 | 0.71 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 15 | 0.71 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 15 | 0.71 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 15 | 0.71 |
| (2,1026) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:52:LYS:H | 1 | 0.71 |
| (2,1026) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:52:LYS:H | 8 | 0.71 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD21 | 10 | 0.71 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD22 | 10 | 0.71 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD23 | 10 | 0.71 |
| (2,101) | 1:A:5:ALA:HA | 1:A:8:ASP:HB2 | 11 | 0.71 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG21 | 1 | 0.71 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG22 | 1 | 0.71 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG23 | 1 | 0.71 |
| (1,471) | 1:A:8:ASP:H | 1:A:9:LEU:H | 6 | 0.71 |
| (1,389) | 1:A:65:ARG:HE | 1:A:65:ARG:HG2 | 6 | 0.71 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 2 | 0.71 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 2 | 0.71 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 2 | 0.71 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 8 | 0.71 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 8 | 0.71 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 8 | 0.71 |
| (1,191) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:65:ARG:HB2 | 4 | 0.71 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB1 | 12 | 0.7 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB2 | 12 | 0.7 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB3 | 12 | 0.7 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG21 | 1:A:33:THR:HB | 6 | 0.7 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG22 | 1:A:33:THR:HB | 6 | 0.7 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG23 | 1:A:33:THR:HB | 6 | 0.7 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:40:HIS:HD2 | 14 | 0.7 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:40:HIS:HD2 | 14 | 0.7 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:40:HIS:HD2 | 14 | 0.7 |
| (2,851) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:ASP:H | 3 | 0.7 |
| (2,851) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:ASP:H | 3 | 0.7 |
| (2,851) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:ASP:H | 3 | 0.7 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HA | 8 | 0.7 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HA | 8 | 0.7 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HA | 8 | 0.7 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:56:ILE:HG12 | 11 | 0.7 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:56:ILE:HG12 | 11 | 0.7 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:56:ILE:HG12 | 11 | 0.7 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:64:LEU:HG | 2 | 0.7 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:64:LEU:HG | 2 | 0.7 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:64:LEU:HG | 2 | 0.7 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:64:LEU:HG | 9 | 0.7 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:64:LEU:HG | 9 | 0.7 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:64:LEU:HG | 9 | 0.7 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:64:LEU:HG | 12 | 0.7 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:64:LEU:HG | 12 | 0.7 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:64:LEU:HG | 12 | 0.7 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD21 | 10 | 0.7 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD22 | 10 | 0.7 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD23 | 10 | 0.7 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD21 | 16 | 0.7 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD22 | 16 | 0.7 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD23 | 16 | 0.7 |
| (2,534) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:23:GLN:HB3 | 7 | 0.7 |
| (2,534) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:23:GLN:HB3 | 10 | 0.7 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG21 | 10 | 0.7 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG22 | 10 | 0.7 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG23 | 10 | 0.7 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 10 | 0.7 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 10 | 0.7 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 10 | 0.7 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG21 | 12 | 0.7 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG22 | 12 | 0.7 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG23 | 12 | 0.7 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 12 | 0.7 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 12 | 0.7 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 12 | 0.7 |
| (2,425) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:21:GLN:HG2 | 16 | 0.7 |
| (2,320) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:51:PHE:HA | 3 | 0.7 |
| (2,320) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:51:PHE:HA | 10 | 0.7 |
| (2,320) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:51:PHE:HA | 14 | 0.7 |
| (2,281) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:12:ARG:H | 8 | 0.7 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD11 | 7 | 0.7 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD12 | 7 | 0.7 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD13 | 7 | 0.7 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1871) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:15:GLY:HA2 | 3 | 0.7 |
| (2,1871) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:15:GLY:HA2 | 3 | 0.7 |
| (2,1871) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:15:GLY:HA2 | 3 | 0.7 |
| (2,1868) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:ASN:H | 12 | 0.7 |
| (2,1868) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:ASN:H | 14 | 0.7 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG21 | 11 | 0.7 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG22 | 11 | 0.7 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG23 | 11 | 0.7 |
| (2,1768) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:96:THR:HB | 5 | 0.7 |
| (2,1740) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:97:ARG:HB2 | 1 | 0.7 |
| (2,1740) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:97:ARG:HB2 | 10 | 0.7 |
| (2,1696) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:25:LEU:HB3 | 12 | 0.7 |
| (2,1696) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:25:LEU:HB3 | 15 | 0.7 |
| (2,1696) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:25:LEU:HB3 | 16 | 0.7 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:90:LEU:HB3 | 7 | 0.7 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:90:LEU:HB3 | 7 | 0.7 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:90:LEU:HB3 | 7 | 0.7 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 16 | 0.7 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 16 | 0.7 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 16 | 0.7 |
| (2,1614) | 1:A:87:PRO:HA | 1:A:51:PHE:HZ | 4 | 0.7 |
| (2,1614) | 1:A:87:PRO:HA | 1:A:51:PHE:HZ | 14 | 0.7 |
| (2,1528) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:17:SER:H | 2 | 0.7 |
| (2,1528) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:17:SER:H | 5 | 0.7 |
| (2,1528) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:17:SER:H | 14 | 0.7 |
| (2,1522) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:13:LEU:HA | 7 | 0.7 |
| (2,1522) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:13:LEU:HA | 15 | 0.7 |
| (2,1521) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:21:GLN:HG2 | 6 | 0.7 |
| (2,1497) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:79:THR:H | 3 | 0.7 |
| (2,1497) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:79:THR:H | 5 | 0.7 |
| (2,1497) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:79:THR:H | 6 | 0.7 |
| (2,1497) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:79:THR:H | 12 | 0.7 |
| (2,1497) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:79:THR:H | 13 | 0.7 |
| (2,1497) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:79:THR:H | 16 | 0.7 |
| (2,1451) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:88:HIS:HD2 | 10 | 0.7 |
| (2,1442) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:89:ALA:H | 6 | 0.7 |
| (2,1442) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:89:ALA:H | 8 | 0.7 |
| (2,1442) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:89:ALA:H | 9 | 0.7 |
| (2,139) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:4:SER:HB3 | 6 | 0.7 |
| (2,139) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:4:SER:HB3 | 6 | 0.7 |
| (2,139) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:4:SER:HB3 | 6 | 0.7 |
| (2,139) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:4:SER:HB3 | 14 | 0.7 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,139) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:4:SER:HB3 | 14 | 0.7 |
| (2,139) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:4:SER:HB3 | 14 | 0.7 |
| (2,1369) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:97:ARG:H | 10 | 0.7 |
| (2,1369) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:97:ARG:H | 15 | 0.7 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG21 | 4 | 0.7 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG22 | 4 | 0.7 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG23 | 4 | 0.7 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG21 | 4 | 0.7 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG22 | 4 | 0.7 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG23 | 4 | 0.7 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG21 | 4 | 0.7 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG22 | 4 | 0.7 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG23 | 4 | 0.7 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG21 | 5 | 0.7 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG22 | 5 | 0.7 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG23 | 5 | 0.7 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG21 | 5 | 0.7 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG22 | 5 | 0.7 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG23 | 5 | 0.7 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG21 | 5 | 0.7 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG22 | 5 | 0.7 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG23 | 5 | 0.7 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG21 | 15 | 0.7 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG22 | 15 | 0.7 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG23 | 15 | 0.7 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG21 | 15 | 0.7 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG22 | 15 | 0.7 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG23 | 15 | 0.7 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG21 | 15 | 0.7 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG22 | 15 | 0.7 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG23 | 15 | 0.7 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD21 | 1 | 0.7 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD22 | 1 | 0.7 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD23 | 1 | 0.7 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD21 | 14 | 0.7 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD22 | 14 | 0.7 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD23 | 14 | 0.7 |
| (2,1064) | 1:A:53:ASP:HB3 | 1:A:50:ALA:H | 16 | 0.7 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 1 | 0.7 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 1 | 0.7 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 1 | 0.7 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD21 | 14 | 0.7 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD22 | 14 | 0.7 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD23 | 14 | 0.7 |
| (2,101) | 1:A:5:ALA:HA | 1:A:8:ASP:HB2 | 12 | 0.7 |
| (2,101) | 1:A:5:ALA:HA | 1:A:8:ASP:HB2 | 14 | 0.7 |
| (2,101) | 1:A:5:ALA:HA | 1:A:8:ASP:HB2 | 16 | 0.7 |
| (1,602) | 1:A:57:ASP:H | 1:A:57:ASP:HB3 | 8 | 0.7 |
| (1,469) | 1:A:8:ASP:H | 1:A:7:THR:HB | 10 | 0.7 |
| (1,389) | 1:A:65:ARG:HE | 1:A:65:ARG:HG2 | 8 | 0.7 |
| (1,351) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HD21 | 5 | 0.7 |
| (1,351) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HD22 | 5 | 0.7 |
| (1,351) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HD23 | 5 | 0.7 |
| (1,351) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HD21 | 15 | 0.7 |
| (1,351) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HD22 | 15 | 0.7 |
| (1,351) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HD23 | 15 | 0.7 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD21 | 5 | 0.7 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD22 | 5 | 0.7 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD23 | 5 | 0.7 |
| (1,127) | 1:A:69:THR:H | 1:A:68:LEU:HB2 | 16 | 0.7 |
| (2,923) | 1:A:101:SER:HB2 | 1:A:102:HIS:H | 7 | 0.69 |
| (2,900) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:43:GLU:HB3 | 10 | 0.69 |
| (2,900) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:43:GLU:HB3 | 10 | 0.69 |
| (2,900) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:43:GLU:HB3 | 10 | 0.69 |
| (2,851) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:ASP:H | 5 | 0.69 |
| (2,851) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:ASP:H | 5 | 0.69 |
| (2,851) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:ASP:H | 5 | 0.69 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HG2 | 4 | 0.69 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HG2 | 4 | 0.69 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HG2 | 4 | 0.69 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HG2 | 14 | 0.69 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HG2 | 14 | 0.69 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HG2 | 14 | 0.69 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:71:ASN:HB2 | 3 | 0.69 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:71:ASN:HB2 | 3 | 0.69 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:71:ASN:HB2 | 3 | 0.69 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD21 | 12 | 0.69 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD22 | 12 | 0.69 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD23 | 12 | 0.69 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD21 | 12 | 0.69 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD22 | 12 | 0.69 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD23 | 12 | 0.69 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD21 | 12 | 0.69 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD22 | 12 | 0.69 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD23 | 12 | 0.69 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:64:LEU:HG | 1 | 0.69 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:64:LEU:HG | 1 | 0.69 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:64:LEU:HG | 1 | 0.69 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:64:LEU:HG | 4 | 0.69 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:64:LEU:HG | 4 | 0.69 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:64:LEU:HG | 4 | 0.69 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:64:LEU:HG | 8 | 0.69 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:64:LEU:HG | 8 | 0.69 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:64:LEU:HG | 8 | 0.69 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:64:LEU:HG | 14 | 0.69 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:64:LEU:HG | 14 | 0.69 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:64:LEU:HG | 14 | 0.69 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG21 | 1:A:25:LEU:HB2 | 8 | 0.69 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG22 | 1:A:25:LEU:HB2 | 8 | 0.69 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG23 | 1:A:25:LEU:HB2 | 8 | 0.69 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD21 | 1 | 0.69 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD22 | 1 | 0.69 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD23 | 1 | 0.69 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD21 | 12 | 0.69 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD22 | 12 | 0.69 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD23 | 12 | 0.69 |
| (2,448) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:36:VAL:HA | 9 | 0.69 |
| (2,448) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:36:VAL:HA | 16 | 0.69 |
| (2,425) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:21:GLN:HG2 | 2 | 0.69 |
| (2,425) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:21:GLN:HG2 | 5 | 0.69 |
| (2,425) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:21:GLN:HG2 | 8 | 0.69 |
| (2,425) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:21:GLN:HG2 | 14 | 0.69 |
| (2,40) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HD1 | 13 | 0.69 |
| (2,40) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HD2 | 13 | 0.69 |
| (2,370) | 1:A:17:SER:HB2 | 1:A:20:GLN:HG3 | 13 | 0.69 |
| (2,368) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:18:PRO:HB3 | 9 | 0.69 |
| (2,368) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:18:PRO:HB3 | 12 | 0.69 |
| (2,368) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:18:PRO:HB3 | 14 | 0.69 |
| (2,322) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:88:HIS:H | 5 | 0.69 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB1 | 5 | 0.69 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB2 | 5 | 0.69 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB3 | 5 | 0.69 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HB2 | 16 | 0.69 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HB2 | 16 | 0.69 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HB2 | 16 | 0.69 |
| (2,229) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:14:ASN:HD22 | 13 | 0.69 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,229) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:14:ASN:HD22 | 13 | 0.69 |
| (2,229) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:14:ASN:HD22 | 13 | 0.69 |
| (2,203) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HB2 | 10 | 0.69 |
| (2,191) | 1:A:9:LEU:HA | 1:A:12:ARG:HD3 | 10 | 0.69 |
| (2,191) | 1:A:9:LEU:HA | 1:A:12:ARG:HD3 | 12 | 0.69 |
| (2,191) | 1:A:9:LEU:HA | 1:A:12:ARG:HD3 | 13 | 0.69 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HG12 | 3 | 0.69 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HG12 | 3 | 0.69 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HG12 | 3 | 0.69 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HG12 | 5 | 0.69 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HG12 | 5 | 0.69 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HG12 | 5 | 0.69 |
| (2,1864) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:ASN:HA | 16 | 0.69 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG21 | 1 | 0.69 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG22 | 1 | 0.69 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG23 | 1 | 0.69 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG21 | 5 | 0.69 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG22 | 5 | 0.69 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG23 | 5 | 0.69 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:99:THR:H | 4 | 0.69 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:99:THR:H | 4 | 0.69 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:99:THR:H | 4 | 0.69 |
| (2,1673) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:91:THR:H | 15 | 0.69 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:90:LEU:HB3 | 11 | 0.69 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:90:LEU:HB3 | 11 | 0.69 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:90:LEU:HB3 | 11 | 0.69 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:90:LEU:HB3 | 15 | 0.69 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:90:LEU:HB3 | 15 | 0.69 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:90:LEU:HB3 | 15 | 0.69 |
| (2,1624) | 1:A:87:PRO:HB2 | 1:A:26:ALA:HA | 11 | 0.69 |
| (2,1624) | 1:A:87:PRO:HB2 | 1:A:26:ALA:HA | 12 | 0.69 |
| (2,1620) | 1:A:87:PRO:HA | 1:A:90:LEU:HB3 | 8 | 0.69 |
| (2,1614) | 1:A:87:PRO:HA | 1:A:51:PHE:HZ | 1 | 0.69 |
| (2,1614) | 1:A:87:PRO:HA | 1:A:51:PHE:HZ | 2 | 0.69 |
| (2,1571) | 1:A:84:HIS:HD2 | 1:A:83:ASP:HB3 | 9 | 0.69 |
| (2,153) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:70:HIS:HB2 | 11 | 0.69 |
| (2,1529) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:21:GLN:H | 12 | 0.69 |
| (2,1528) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:17:SER:H | 7 | 0.69 |
| (2,1522) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:13:LEU:HA | 1 | 0.69 |
| (2,1519) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:21:GLN:HG3 | 11 | 0.69 |
| (2,1497) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:79:THR:H | 10 | 0.69 |
| (2,1497) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:79:THR:H | 14 | 0.69 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG21 | 16 | 0.69 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG22 | 16 | 0.69 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG23 | 16 | 0.69 |
| (2,1446) | 1:A:95:HIS:HB3 | 1:A:96:THR:H | 9 | 0.69 |
| (2,1442) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:89:ALA:H | 13 | 0.69 |
| (2,1392) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:81:ILE:H | 2 | 0.69 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB1 | 8 | 0.69 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB2 | 8 | 0.69 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB3 | 8 | 0.69 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD11 | 5 | 0.69 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD12 | 5 | 0.69 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD13 | 5 | 0.69 |
| (2,1212) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:ASN:HD21 | 15 | 0.69 |
| (2,1193) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:65:ARG:HB2 | 16 | 0.69 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:51:PHE:HB3 | 6 | 0.69 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:51:PHE:HB3 | 6 | 0.69 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:51:PHE:HB3 | 6 | 0.69 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG21 | 1 | 0.69 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG22 | 1 | 0.69 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG23 | 1 | 0.69 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG21 | 1 | 0.69 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG22 | 1 | 0.69 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG23 | 1 | 0.69 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG21 | 1 | 0.69 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG22 | 1 | 0.69 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG23 | 1 | 0.69 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG21 | 11 | 0.69 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG22 | 11 | 0.69 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG23 | 11 | 0.69 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG21 | 11 | 0.69 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG22 | 11 | 0.69 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG23 | 11 | 0.69 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG21 | 11 | 0.69 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG22 | 11 | 0.69 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG23 | 11 | 0.69 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD11 | 16 | 0.69 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD12 | 16 | 0.69 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD13 | 16 | 0.69 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD21 | 2 | 0.69 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD22 | 2 | 0.69 |
| (2,1084) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:37:LEU:HD23 | 2 | 0.69 |
| (2,1026) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:52:LYS:H | 14 | 0.69 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD21 | 2 | 0.69 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD22 | 2 | 0.69 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD23 | 2 | 0.69 |
| (1,602) | 1:A:57:ASP:H | 1:A:57:ASP:HB3 | 14 | 0.69 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG21 | 5 | 0.69 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG22 | 5 | 0.69 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG23 | 5 | 0.69 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG21 | 9 | 0.69 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG22 | 9 | 0.69 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG23 | 9 | 0.69 |
| (1,469) | 1:A:8:ASP:H | 1:A:7:THR:HB | 2 | 0.69 |
| (1,469) | 1:A:8:ASP:H | 1:A:7:THR:HB | 4 | 0.69 |
| (1,351) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HD21 | 1 | 0.69 |
| (1,351) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HD22 | 1 | 0.69 |
| (1,351) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HD23 | 1 | 0.69 |
| (1,351) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HD21 | 14 | 0.69 |
| (1,351) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HD22 | 14 | 0.69 |
| (1,351) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HD23 | 14 | 0.69 |
| (1,351) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HD21 | 16 | 0.69 |
| (1,351) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HD22 | 16 | 0.69 |
| (1,351) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HD23 | 16 | 0.69 |
| (1,279) | 1:A:14:ASN:HD21 | 1:A:14:ASN:HB2 | 4 | 0.69 |
| (1,274) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:80:LEU:H | 9 | 0.69 |
| (1,268) | 1:A:99:THR:H | 1:A:98:LEU:HD21 | 8 | 0.69 |
| (1,268) | 1:A:99:THR:H | 1:A:98:LEU:HD22 | 8 | 0.69 |
| (1,268) | 1:A:99:THR:H | 1:A:98:LEU:HD23 | 8 | 0.69 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG21 | 4 | 0.69 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG22 | 4 | 0.69 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG23 | 4 | 0.69 |
| (1,205) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:47:PRO:HD2 | 8 | 0.69 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 10 | 0.69 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 10 | 0.69 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 10 | 0.69 |
| (1,191) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:65:ARG:HB2 | 8 | 0.69 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD21 | 8 | 0.69 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD22 | 8 | 0.69 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD23 | 8 | 0.69 |
| (1,127) | 1:A:69:THR:H | 1:A:68:LEU:HB2 | 13 | 0.69 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB1 | 9 | 0.68 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB2 | 9 | 0.68 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB3 | 9 | 0.68 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG21 | 1:A:33:THR:HB | 12 | 0.68 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG22 | 1:A:33:THR:HB | 12 | 0.68 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG23 | 1:A:33:THR:HB | 12 | 0.68 |
| (2,913) | 1:A:43:GLU:HG2 | 1:A:42:PRO:HA | 7 | 0.68 |
| (2,682) | 1:A:62:LEU:HD11 | 1:A:78:PRO:HB2 | 13 | 0.68 |
| (2,682) | 1:A:62:LEU:HD12 | 1:A:78:PRO:HB2 | 13 | 0.68 |
| (2,682) | 1:A:62:LEU:HD13 | 1:A:78:PRO:HB2 | 13 | 0.68 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:71:ASN:HB2 | 8 | 0.68 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:71:ASN:HB2 | 8 | 0.68 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:71:ASN:HB2 | 8 | 0.68 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:71:ASN:HB2 | 9 | 0.68 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:71:ASN:HB2 | 9 | 0.68 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:71:ASN:HB2 | 9 | 0.68 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:71:ASN:HB3 | 11 | 0.68 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:71:ASN:HB3 | 11 | 0.68 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:71:ASN:HB3 | 11 | 0.68 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HD1 | 7 | 0.68 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HD2 | 7 | 0.68 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HD1 | 7 | 0.68 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HD2 | 7 | 0.68 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HD1 | 7 | 0.68 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HD2 | 7 | 0.68 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:64:LEU:HG | 10 | 0.68 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:64:LEU:HG | 10 | 0.68 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:64:LEU:HG | 10 | 0.68 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG21 | 1:A:25:LEU:HB2 | 11 | 0.68 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG22 | 1:A:25:LEU:HB2 | 11 | 0.68 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG23 | 1:A:25:LEU:HB2 | 11 | 0.68 |
| (2,534) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:23:GLN:HB3 | 9 | 0.68 |
| (2,508) | 1:A:23:GLN:HB3 | 1:A:20:GLN:HA | 6 | 0.68 |
| (2,425) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:21:GLN:HG2 | 7 | 0.68 |
| (2,330) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:15:GLY:H | 1 | 0.68 |
| (2,330) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:15:GLY:H | 3 | 0.68 |
| (2,330) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:15:GLY:H | 6 | 0.68 |
| (2,330) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:15:GLY:H | 9 | 0.68 |
| (2,330) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:15:GLY:H | 15 | 0.68 |
| (2,322) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:88:HIS:H | 9 | 0.68 |
| (2,320) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:51:PHE:HA | 11 | 0.68 |
| (2,281) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:12:ARG:H | 11 | 0.68 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB1 | 8 | 0.68 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB2 | 8 | 0.68 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB3 | 8 | 0.68 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB1 | 10 | 0.68 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB2 | 10 | 0.68 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB3 | 10 | 0.68 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB1 | 12 | 0.68 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB2 | 12 | 0.68 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB3 | 12 | 0.68 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HB2 | 13 | 0.68 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HB2 | 13 | 0.68 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HB2 | 13 | 0.68 |
| (2,229) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:14:ASN:HD22 | 5 | 0.68 |
| (2,229) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:14:ASN:HD22 | 5 | 0.68 |
| (2,229) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:14:ASN:HD22 | 5 | 0.68 |
| (2,1920) | 1:A:76:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 4 | 0.68 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HG12 | 2 | 0.68 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HG12 | 2 | 0.68 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HG12 | 2 | 0.68 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HG12 | 4 | 0.68 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HG12 | 4 | 0.68 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HG12 | 4 | 0.68 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HG12 | 16 | 0.68 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HG12 | 16 | 0.68 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HG12 | 16 | 0.68 |
| (2,1871) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:15:GLY:HA2 | 11 | 0.68 |
| (2,1871) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:15:GLY:HA2 | 11 | 0.68 |
| (2,1871) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:15:GLY:HA2 | 11 | 0.68 |
| (2,1773) | 1:A:97:ARG:HD2 | 1:A:100:GLN:H | 13 | 0.68 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:40:HIS:HB2 | 7 | 0.68 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:40:HIS:HB2 | 7 | 0.68 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:40:HIS:HB2 | 7 | 0.68 |
| (2,1673) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:91:THR:H | 3 | 0.68 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:90:LEU:HB3 | 3 | 0.68 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:90:LEU:HB3 | 3 | 0.68 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:90:LEU:HB3 | 3 | 0.68 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:90:LEU:HB3 | 16 | 0.68 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:90:LEU:HB3 | 16 | 0.68 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:90:LEU:HB3 | 16 | 0.68 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 6 | 0.68 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 6 | 0.68 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 6 | 0.68 |
| (2,1614) | 1:A:87:PRO:HA | 1:A:51:PHE:HZ | 5 | 0.68 |
| (2,1614) | 1:A:87:PRO:HA | 1:A:51:PHE:HZ | 10 | 0.68 |
| (2,1549) | 1:A:81:ILE:HB | 1:A:82:PHE:H | 2 | 0.68 |
| (2,1549) | 1:A:81:ILE:HB | 1:A:82:PHE:H | 13 | 0.68 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1539) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:99:THR:H | 16 | 0.68 |
| (2,1525) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:16:LEU:H | 16 | 0.68 |
| (2,1522) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:13:LEU:HA | 5 | 0.68 |
| (2,1522) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:13:LEU:HA | 16 | 0.68 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG21 | 10 | 0.68 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG22 | 10 | 0.68 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG23 | 10 | 0.68 |
| (2,1471) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:74:LEU:H | 15 | 0.68 |
| (2,1471) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:74:LEU:H | 16 | 0.68 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 13 | 0.68 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 13 | 0.68 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 13 | 0.68 |
| (2,1442) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:89:ALA:H | 1 | 0.68 |
| (2,1392) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:81:ILE:H | 13 | 0.68 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB1 | 2 | 0.68 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB2 | 2 | 0.68 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB3 | 2 | 0.68 |
| (2,1193) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:65:ARG:HB2 | 15 | 0.68 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:51:PHE:HB3 | 14 | 0.68 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:51:PHE:HB3 | 14 | 0.68 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:51:PHE:HB3 | 14 | 0.68 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:85:PRO:HA | 1 | 0.68 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:85:PRO:HA | 1 | 0.68 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:85:PRO:HA | 1 | 0.68 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:85:PRO:HA | 10 | 0.68 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:85:PRO:HA | 10 | 0.68 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:85:PRO:HA | 10 | 0.68 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD11 | 1 | 0.68 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD12 | 1 | 0.68 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD13 | 1 | 0.68 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD11 | 7 | 0.68 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD12 | 7 | 0.68 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD13 | 7 | 0.68 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:45:ILE:HG13 | 8 | 0.68 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:45:ILE:HG13 | 8 | 0.68 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:45:ILE:HG13 | 8 | 0.68 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 4 | 0.68 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 4 | 0.68 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 4 | 0.68 |
| (1,471) | 1:A:8:ASP:H | 1:A:9:LEU:H | 5 | 0.68 |
| (1,471) | 1:A:8:ASP:H | 1:A:9:LEU:H | 9 | 0.68 |
| (1,444) | 1:A:75:ASP:H | 1:A:74:LEU:HD21 | 13 | 0.68 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,444) | 1:A:75:ASP:H | 1:A:74:LEU:HD22 | 13 | 0.68 |
| (1,444) | 1:A:75:ASP:H | 1:A:74:LEU:HD23 | 13 | 0.68 |
| (1,389) | 1:A:65:ARG:HE | 1:A:65:ARG:HG2 | 13 | 0.68 |
| (1,351) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HD21 | 4 | 0.68 |
| (1,351) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HD22 | 4 | 0.68 |
| (1,351) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HD23 | 4 | 0.68 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 13 | 0.68 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 13 | 0.68 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 13 | 0.68 |
| (1,191) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:65:ARG:HB2 | 14 | 0.68 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB1 | 6 | 0.67 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB2 | 6 | 0.67 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB3 | 6 | 0.67 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG21 | 1:A:33:THR:HB | 9 | 0.67 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG22 | 1:A:33:THR:HB | 9 | 0.67 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG23 | 1:A:33:THR:HB | 9 | 0.67 |
| (2,90) | 1:A:4:SER:HA | 1:A:5:ALA:H | 8 | 0.67 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:56:ILE:HG12 | 14 | 0.67 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:56:ILE:HG12 | 14 | 0.67 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:56:ILE:HG12 | 14 | 0.67 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:71:ASN:HB2 | 15 | 0.67 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:71:ASN:HB2 | 15 | 0.67 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:71:ASN:HB2 | 15 | 0.67 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:64:LEU:HB3 | 4 | 0.67 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:64:LEU:HB3 | 4 | 0.67 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:64:LEU:HB3 | 4 | 0.67 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD21 | 3 | 0.67 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD22 | 3 | 0.67 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD23 | 3 | 0.67 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD21 | 3 | 0.67 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD22 | 3 | 0.67 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD23 | 3 | 0.67 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD21 | 3 | 0.67 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD22 | 3 | 0.67 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD23 | 3 | 0.67 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD21 | 5 | 0.67 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD22 | 5 | 0.67 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD23 | 5 | 0.67 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD21 | 5 | 0.67 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD22 | 5 | 0.67 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD23 | 5 | 0.67 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD21 | 5 | 0.67 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD22 | 5 | 0.67 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD23 | 5 | 0.67 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:64:LEU:HG | 6 | 0.67 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:64:LEU:HG | 6 | 0.67 |
| (2,60) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:64:LEU:HG | 6 | 0.67 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG21 | 1:A:25:LEU:HB2 | 12 | 0.67 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG22 | 1:A:25:LEU:HB2 | 12 | 0.67 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG23 | 1:A:25:LEU:HB2 | 12 | 0.67 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD21 | 8 | 0.67 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD22 | 8 | 0.67 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD23 | 8 | 0.67 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG21 | 11 | 0.67 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG22 | 11 | 0.67 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG23 | 11 | 0.67 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 11 | 0.67 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 11 | 0.67 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 11 | 0.67 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG21 | 13 | 0.67 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG22 | 13 | 0.67 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG23 | 13 | 0.67 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 13 | 0.67 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 13 | 0.67 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 13 | 0.67 |
| (2,425) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:21:GLN:HG2 | 1 | 0.67 |
| (2,425) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:21:GLN:HG2 | 3 | 0.67 |
| (2,425) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:21:GLN:HG2 | 6 | 0.67 |
| (2,425) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:21:GLN:HG2 | 11 | 0.67 |
| (2,40) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HD1 | 5 | 0.67 |
| (2,40) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HD2 | 5 | 0.67 |
| (2,40) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HD1 | 10 | 0.67 |
| (2,40) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HD2 | 10 | 0.67 |
| (2,330) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:15:GLY:H | 2 | 0.67 |
| (2,330) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:15:GLY:H | 4 | 0.67 |
| (2,330) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:15:GLY:H | 5 | 0.67 |
| (2,330) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:15:GLY:H | 7 | 0.67 |
| (2,330) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:15:GLY:H | 8 | 0.67 |
| (2,330) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:15:GLY:H | 10 | 0.67 |
| (2,330) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:15:GLY:H | 11 | 0.67 |
| (2,330) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:15:GLY:H | 14 | 0.67 |
| (2,330) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:15:GLY:H | 16 | 0.67 |
| (2,322) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:88:HIS:H | 4 | 0.67 |
| (2,322) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:88:HIS:H | 16 | 0.67 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,281) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:12:ARG:H | 9 | 0.67 |
| (2,281) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:12:ARG:H | 13 | 0.67 |
| (2,1920) | 1:A:76:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 5 | 0.67 |
| (2,191) | 1:A:9:LEU:HA | 1:A:12:ARG:HD3 | 8 | 0.67 |
| (2,1869) | 1:A:65:ARG:HD2 | 1:A:65:ARG:HE | 8 | 0.67 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:ASN:HA | 8 | 0.67 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:ASN:HA | 8 | 0.67 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:ASN:HA | 8 | 0.67 |
| (2,1764) | 1:A:97:ARG:HD2 | 1:A:97:ARG:HA | 5 | 0.67 |
| (2,1696) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:25:LEU:HB3 | 10 | 0.67 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:91:THR:HA | 10 | 0.67 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:91:THR:HA | 10 | 0.67 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:91:THR:HA | 10 | 0.67 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 2 | 0.67 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 2 | 0.67 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 2 | 0.67 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 8 | 0.67 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 8 | 0.67 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 8 | 0.67 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 13 | 0.67 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 13 | 0.67 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 13 | 0.67 |
| (2,1614) | 1:A:87:PRO:HA | 1:A:51:PHE:HZ | 15 | 0.67 |
| (2,1571) | 1:A:84:HIS:HD2 | 1:A:83:ASP:HB3 | 1 | 0.67 |
| (2,1571) | 1:A:84:HIS:HD2 | 1:A:83:ASP:HB3 | 2 | 0.67 |
| (2,1571) | 1:A:84:HIS:HD2 | 1:A:83:ASP:HB3 | 4 | 0.67 |
| (2,1538) | 1:A:98:LEU:HB3 | 1:A:99:THR:H | 11 | 0.67 |
| (2,1522) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:13:LEU:HA | 10 | 0.67 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG21 | 5 | 0.67 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG22 | 5 | 0.67 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG23 | 5 | 0.67 |
| (2,1471) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:74:LEU:H | 3 | 0.67 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 7 | 0.67 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 7 | 0.67 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 7 | 0.67 |
| (2,1442) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:89:ALA:H | 7 | 0.67 |
| (2,1442) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:89:ALA:H | 10 | 0.67 |
| (2,1442) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:89:ALA:H | 11 | 0.67 |
| (2,1442) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:89:ALA:H | 12 | 0.67 |
| (2,1442) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:89:ALA:H | 14 | 0.67 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HB2 | 3 | 0.67 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HB2 | 3 | 0.67 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HB2 | 3 | 0.67 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:34:ALA:HA | 6 | 0.67 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:34:ALA:HA | 6 | 0.67 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:34:ALA:HA | 6 | 0.67 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:34:ALA:HA | 7 | 0.67 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:34:ALA:HA | 7 | 0.67 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:34:ALA:HA | 7 | 0.67 |
| (2,139) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:4:SER:HB3 | 1 | 0.67 |
| (2,139) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:4:SER:HB3 | 1 | 0.67 |
| (2,139) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:4:SER:HB3 | 1 | 0.67 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB1 | 6 | 0.67 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB2 | 6 | 0.67 |
| (2,1387) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:61:ALA:HB3 | 6 | 0.67 |
| (2,1369) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:97:ARG:H | 1 | 0.67 |
| (2,1369) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:97:ARG:H | 3 | 0.67 |
| (2,1369) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:97:ARG:H | 12 | 0.67 |
| (2,1304) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:H | 11 | 0.67 |
| (2,1296) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:63:GLU:HA | 11 | 0.67 |
| (2,1192) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:65:ARG:HB2 | 3 | 0.67 |
| (2,1192) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:65:ARG:HB2 | 10 | 0.67 |
| (2,117) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:4:SER:HA | 8 | 0.67 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:51:PHE:HB3 | 3 | 0.67 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:51:PHE:HB3 | 3 | 0.67 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:51:PHE:HB3 | 3 | 0.67 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:51:PHE:HB3 | 4 | 0.67 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:51:PHE:HB3 | 4 | 0.67 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:51:PHE:HB3 | 4 | 0.67 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG21 | 9 | 0.67 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG22 | 9 | 0.67 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HG23 | 9 | 0.67 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG21 | 9 | 0.67 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG22 | 9 | 0.67 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HG23 | 9 | 0.67 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG21 | 9 | 0.67 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG22 | 9 | 0.67 |
| (2,1113) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HG23 | 9 | 0.67 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD11 | 12 | 0.67 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD12 | 12 | 0.67 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD13 | 12 | 0.67 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:45:ILE:HG13 | 6 | 0.67 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:45:ILE:HG13 | 6 | 0.67 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:45:ILE:HG13 | 6 | 0.67 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1064) | 1:A:53:ASP:HB3 | 1:A:50:ALA:H | 8 | 0.67 |
| (2,1064) | 1:A:53:ASP:HB3 | 1:A:50:ALA:H | 9 | 0.67 |
| (2,1043) | 1:A:52:LYS:HB3 | 1:A:52:LYS:HE2 | 14 | 0.67 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 16 | 0.67 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 16 | 0.67 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 16 | 0.67 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD21 | 8 | 0.67 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD22 | 8 | 0.67 |
| (2,1021) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:54:LEU:HD23 | 8 | 0.67 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG21 | 4 | 0.67 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG22 | 4 | 0.67 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG23 | 4 | 0.67 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG21 | 6 | 0.67 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG22 | 6 | 0.67 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG23 | 6 | 0.67 |
| (1,389) | 1:A:65:ARG:HE | 1:A:65:ARG:HG2 | 1 | 0.67 |
| (1,384) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:71:ASN:H | 12 | 0.67 |
| (1,351) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HD21 | 2 | 0.67 |
| (1,351) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HD22 | 2 | 0.67 |
| (1,351) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HD23 | 2 | 0.67 |
| (1,351) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HD21 | 9 | 0.67 |
| (1,351) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HD22 | 9 | 0.67 |
| (1,351) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HD23 | 9 | 0.67 |
| (1,279) | 1:A:14:ASN:HD21 | 1:A:14:ASN:HB2 | 1 | 0.67 |
| (1,279) | 1:A:14:ASN:HD21 | 1:A:14:ASN:HB2 | 6 | 0.67 |
| (1,274) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:80:LEU:H | 11 | 0.67 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB1 | 2 | 0.66 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB2 | 2 | 0.66 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB3 | 2 | 0.66 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB1 | 7 | 0.66 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB2 | 7 | 0.66 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB3 | 7 | 0.66 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG21 | 1:A:33:THR:HB | 4 | 0.66 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG22 | 1:A:33:THR:HB | 4 | 0.66 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG23 | 1:A:33:THR:HB | 4 | 0.66 |
| (2,914) | 1:A:43:GLU:HG2 | 1:A:43:GLU:H | 16 | 0.66 |
| (2,888) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:41:THR:HA | 4 | 0.66 |
| (2,888) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:41:THR:HA | 5 | 0.66 |
| (2,888) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:41:THR:HA | 6 | 0.66 |
| (2,888) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:41:THR:HA | 12 | 0.66 |
| (2,888) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:41:THR:HA | 13 | 0.66 |
| (2,888) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:41:THR:HA | 16 | 0.66 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:71:ASN:HB2 | 16 | 0.66 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:71:ASN:HB2 | 16 | 0.66 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:71:ASN:HB2 | 16 | 0.66 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HD1 | 10 | 0.66 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HD2 | 10 | 0.66 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HD1 | 10 | 0.66 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HD2 | 10 | 0.66 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HD1 | 10 | 0.66 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HD2 | 10 | 0.66 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HD1 | 13 | 0.66 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HD2 | 13 | 0.66 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HD1 | 13 | 0.66 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HD2 | 13 | 0.66 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HD1 | 13 | 0.66 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HD2 | 13 | 0.66 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HD1 | 16 | 0.66 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HD2 | 16 | 0.66 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HD1 | 16 | 0.66 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HD2 | 16 | 0.66 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HD1 | 16 | 0.66 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HD2 | 16 | 0.66 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:64:LEU:HB3 | 6 | 0.66 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:64:LEU:HB3 | 6 | 0.66 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:64:LEU:HB3 | 6 | 0.66 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD11 | 9 | 0.66 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD12 | 9 | 0.66 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD13 | 9 | 0.66 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD11 | 9 | 0.66 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD12 | 9 | 0.66 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD13 | 9 | 0.66 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD11 | 9 | 0.66 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD12 | 9 | 0.66 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD13 | 9 | 0.66 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG21 | 1:A:25:LEU:HB2 | 1 | 0.66 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG22 | 1:A:25:LEU:HB2 | 1 | 0.66 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG23 | 1:A:25:LEU:HB2 | 1 | 0.66 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG21 | 1:A:25:LEU:HB2 | 10 | 0.66 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG22 | 1:A:25:LEU:HB2 | 10 | 0.66 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG23 | 1:A:25:LEU:HB2 | 10 | 0.66 |
| (2,534) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:23:GLN:HB3 | 1 | 0.66 |
| (2,534) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:23:GLN:HB3 | 15 | 0.66 |
| (2,454) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:17:SER:H | 9 | 0.66 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 2 | 0.66 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 2 | 0.66 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 2 | 0.66 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 4 | 0.66 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 4 | 0.66 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 4 | 0.66 |
| (2,40) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HD1 | 6 | 0.66 |
| (2,40) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HD2 | 6 | 0.66 |
| (2,313) | 1:A:85:PRO:HD2 | 1:A:84:HIS:HA | 7 | 0.66 |
| (2,313) | 1:A:85:PRO:HD2 | 1:A:84:HIS:HA | 13 | 0.66 |
| (2,313) | 1:A:85:PRO:HD2 | 1:A:84:HIS:HA | 16 | 0.66 |
| (2,229) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:14:ASN:HD22 | 9 | 0.66 |
| (2,229) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:14:ASN:HD22 | 9 | 0.66 |
| (2,229) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:14:ASN:HD22 | 9 | 0.66 |
| (2,229) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:14:ASN:HD22 | 11 | 0.66 |
| (2,229) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:14:ASN:HD22 | 11 | 0.66 |
| (2,229) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:14:ASN:HD22 | 11 | 0.66 |
| (2,1920) | 1:A:76:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 13 | 0.66 |
| (2,1920) | 1:A:76:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 15 | 0.66 |
| (2,191) | 1:A:9:LEU:HA | 1:A:12:ARG:HD3 | 9 | 0.66 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HG12 | 11 | 0.66 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HG12 | 11 | 0.66 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HG12 | 11 | 0.66 |
| (2,1869) | 1:A:65:ARG:HD2 | 1:A:65:ARG:HE | 5 | 0.66 |
| (2,1809) | 1:A:101:SER:HB2 | 1:A:100:GLN:H | 14 | 0.66 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG21 | 10 | 0.66 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG22 | 10 | 0.66 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG23 | 10 | 0.66 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:99:THR:H | 1 | 0.66 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:99:THR:H | 1 | 0.66 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:99:THR:H | 1 | 0.66 |
| (2,1768) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:96:THR:HB | 3 | 0.66 |
| (2,1764) | 1:A:97:ARG:HD2 | 1:A:97:ARG:HA | 14 | 0.66 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:91:THR:HA | 6 | 0.66 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:91:THR:HA | 6 | 0.66 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:91:THR:HA | 6 | 0.66 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:90:LEU:HB3 | 2 | 0.66 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:90:LEU:HB3 | 2 | 0.66 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:90:LEU:HB3 | 2 | 0.66 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:90:LEU:HB3 | 13 | 0.66 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:90:LEU:HB3 | 13 | 0.66 |
| (2,1645) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:90:LEU:HB3 | 13 | 0.66 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1614) | 1:A:87:PRO:HA | 1:A:51:PHE:HZ | 12 | 0.66 |
| (2,1571) | 1:A:84:HIS:HD2 | 1:A:83:ASP:HB3 | 5 | 0.66 |
| (2,1571) | 1:A:84:HIS:HD2 | 1:A:83:ASP:HB3 | 6 | 0.66 |
| (2,1571) | 1:A:84:HIS:HD2 | 1:A:83:ASP:HB3 | 14 | 0.66 |
| (2,1571) | 1:A:84:HIS:HD2 | 1:A:83:ASP:HB3 | 16 | 0.66 |
| (2,1549) | 1:A:81:ILE:HB | 1:A:82:PHE:H | 10 | 0.66 |
| (2,1549) | 1:A:81:ILE:HB | 1:A:82:PHE:H | 14 | 0.66 |
| (2,1540) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:95:HIS:HA | 9 | 0.66 |
| (2,1539) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:99:THR:H | 14 | 0.66 |
| (2,1537) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:H | 10 | 0.66 |
| (2,1537) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:H | 15 | 0.66 |
| (2,153) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:70:HIS:HB2 | 1 | 0.66 |
| (2,1529) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:21:GLN:H | 14 | 0.66 |
| (2,1525) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:16:LEU:H | 6 | 0.66 |
| (2,1469) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:74:LEU:HB3 | 14 | 0.66 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 6 | 0.66 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 6 | 0.66 |
| (2,1464) | 1:A:73:GLY:HA3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 6 | 0.66 |
| (2,1442) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:89:ALA:H | 3 | 0.66 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HB2 | 9 | 0.66 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HB2 | 9 | 0.66 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HB2 | 9 | 0.66 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:34:ALA:HA | 10 | 0.66 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:34:ALA:HA | 10 | 0.66 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:34:ALA:HA | 10 | 0.66 |
| (2,139) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:4:SER:HB3 | 9 | 0.66 |
| (2,139) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:4:SER:HB3 | 9 | 0.66 |
| (2,139) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:4:SER:HB3 | 9 | 0.66 |
| (2,139) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:4:SER:HB3 | 10 | 0.66 |
| (2,139) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:4:SER:HB3 | 10 | 0.66 |
| (2,139) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:4:SER:HB3 | 10 | 0.66 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:7:THR:H | 9 | 0.66 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:7:THR:H | 9 | 0.66 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:7:THR:H | 9 | 0.66 |
| (2,1304) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:H | 7 | 0.66 |
| (2,1212) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:ASN:HD21 | 14 | 0.66 |
| (2,1192) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:65:ARG:HB2 | 6 | 0.66 |
| (2,1133) | 1:A:58:SER:HB3 | 1:A:59:LEU:HG | 1 | 0.66 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:51:PHE:HB3 | 13 | 0.66 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:51:PHE:HB3 | 13 | 0.66 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:51:PHE:HB3 | 13 | 0.66 |
| (2,1068) | 1:A:54:LEU:HB3 | 1:A:54:LEU:HB2 | 4 | 0.66 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1064) | 1:A:53:ASP:HB3 | 1:A:50:ALA:H | 10 | 0.66 |
| (1,602) | 1:A:57:ASP:H | 1:A:57:ASP:HB3 | 3 | 0.66 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG21 | 3 | 0.66 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG22 | 3 | 0.66 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG23 | 3 | 0.66 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG21 | 7 | 0.66 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG22 | 7 | 0.66 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG23 | 7 | 0.66 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG21 | 8 | 0.66 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG22 | 8 | 0.66 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG23 | 8 | 0.66 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG21 | 15 | 0.66 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG22 | 15 | 0.66 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG23 | 15 | 0.66 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG21 | 16 | 0.66 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG22 | 16 | 0.66 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG23 | 16 | 0.66 |
| (1,469) | 1:A:8:ASP:H | 1:A:7:THR:HB | 1 | 0.66 |
| (1,469) | 1:A:8:ASP:H | 1:A:7:THR:HB | 7 | 0.66 |
| (1,389) | 1:A:65:ARG:HE | 1:A:65:ARG:HG2 | 5 | 0.66 |
| (1,389) | 1:A:65:ARG:HE | 1:A:65:ARG:HG2 | 7 | 0.66 |
| (1,389) | 1:A:65:ARG:HE | 1:A:65:ARG:HG2 | 10 | 0.66 |
| (1,389) | 1:A:65:ARG:HE | 1:A:65:ARG:HG2 | 16 | 0.66 |
| (1,351) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HD21 | 8 | 0.66 |
| (1,351) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HD22 | 8 | 0.66 |
| (1,351) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HD23 | 8 | 0.66 |
| (1,351) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HD21 | 10 | 0.66 |
| (1,351) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HD22 | 10 | 0.66 |
| (1,351) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HD23 | 10 | 0.66 |
| (1,351) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HD21 | 13 | 0.66 |
| (1,351) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HD22 | 13 | 0.66 |
| (1,351) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HD23 | 13 | 0.66 |
| (1,274) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:80:LEU:H | 3 | 0.66 |
| (1,274) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:80:LEU:H | 16 | 0.66 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG21 | 1 | 0.66 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG22 | 1 | 0.66 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG23 | 1 | 0.66 |
| (1,191) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:65:ARG:HB2 | 2 | 0.66 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG21 | 1:A:33:THR:HB | 16 | 0.65 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG22 | 1:A:33:THR:HB | 16 | 0.65 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG23 | 1:A:33:THR:HB | 16 | 0.65 |
| (2,913) | 1:A:43:GLU:HG2 | 1:A:42:PRO:HA | 8 | 0.65 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,888) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:41:THR:HA | 1 | 0.65 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:74:LEU:HA | 2 | 0.65 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:74:LEU:HA | 2 | 0.65 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:74:LEU:HA | 2 | 0.65 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:74:LEU:HA | 12 | 0.65 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:74:LEU:HA | 12 | 0.65 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:74:LEU:HA | 12 | 0.65 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:74:LEU:HA | 14 | 0.65 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:74:LEU:HA | 14 | 0.65 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:74:LEU:HA | 14 | 0.65 |
| (2,835) | 1:A:37:LEU:HB2 | 1:A:37:LEU:HB3 | 1 | 0.65 |
| (2,835) | 1:A:37:LEU:HB2 | 1:A:37:LEU:HB3 | 2 | 0.65 |
| (2,835) | 1:A:37:LEU:HB2 | 1:A:37:LEU:HB3 | 3 | 0.65 |
| (2,835) | 1:A:37:LEU:HB2 | 1:A:37:LEU:HB3 | 4 | 0.65 |
| (2,835) | 1:A:37:LEU:HB2 | 1:A:37:LEU:HB3 | 5 | 0.65 |
| (2,835) | 1:A:37:LEU:HB2 | 1:A:37:LEU:HB3 | 6 | 0.65 |
| (2,835) | 1:A:37:LEU:HB2 | 1:A:37:LEU:HB3 | 7 | 0.65 |
| (2,835) | 1:A:37:LEU:HB2 | 1:A:37:LEU:HB3 | 8 | 0.65 |
| (2,835) | 1:A:37:LEU:HB2 | 1:A:37:LEU:HB3 | 9 | 0.65 |
| (2,835) | 1:A:37:LEU:HB2 | 1:A:37:LEU:HB3 | 10 | 0.65 |
| (2,835) | 1:A:37:LEU:HB2 | 1:A:37:LEU:HB3 | 11 | 0.65 |
| (2,835) | 1:A:37:LEU:HB2 | 1:A:37:LEU:HB3 | 12 | 0.65 |
| (2,835) | 1:A:37:LEU:HB2 | 1:A:37:LEU:HB3 | 13 | 0.65 |
| (2,835) | 1:A:37:LEU:HB2 | 1:A:37:LEU:HB3 | 14 | 0.65 |
| (2,835) | 1:A:37:LEU:HB2 | 1:A:37:LEU:HB3 | 15 | 0.65 |
| (2,835) | 1:A:37:LEU:HB2 | 1:A:37:LEU:HB3 | 16 | 0.65 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:56:ILE:HG12 | 4 | 0.65 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:56:ILE:HG12 | 4 | 0.65 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:56:ILE:HG12 | 4 | 0.65 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:71:ASN:HB2 | 14 | 0.65 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:71:ASN:HB2 | 14 | 0.65 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:71:ASN:HB2 | 14 | 0.65 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HD1 | 6 | 0.65 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HD2 | 6 | 0.65 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HD1 | 6 | 0.65 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HD2 | 6 | 0.65 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HD1 | 6 | 0.65 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HD2 | 6 | 0.65 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:64:LEU:HB3 | 8 | 0.65 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:64:LEU:HB3 | 8 | 0.65 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:64:LEU:HB3 | 8 | 0.65 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD21 | 9 | 0.65 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD22 | 9 | 0.65 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD23 | 9 | 0.65 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD21 | 9 | 0.65 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD22 | 9 | 0.65 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD23 | 9 | 0.65 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD21 | 9 | 0.65 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD22 | 9 | 0.65 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD23 | 9 | 0.65 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG21 | 5 | 0.65 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG22 | 5 | 0.65 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG23 | 5 | 0.65 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 5 | 0.65 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 5 | 0.65 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 5 | 0.65 |
| (2,454) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:17:SER:H | 12 | 0.65 |
| (2,454) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:17:SER:H | 14 | 0.65 |
| (2,448) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:36:VAL:HA | 3 | 0.65 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 10 | 0.65 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 10 | 0.65 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 10 | 0.65 |
| (2,418) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 12 | 0.65 |
| (2,40) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HD1 | 3 | 0.65 |
| (2,40) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HD2 | 3 | 0.65 |
| (2,40) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HD1 | 9 | 0.65 |
| (2,40) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HD2 | 9 | 0.65 |
| (2,40) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HD1 | 12 | 0.65 |
| (2,40) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HD2 | 12 | 0.65 |
| (2,40) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HD1 | 16 | 0.65 |
| (2,40) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HD2 | 16 | 0.65 |
| (2,367) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:17:SER:HB2 | 11 | 0.65 |
| (2,330) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:15:GLY:H | 13 | 0.65 |
| (2,322) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:88:HIS:H | 2 | 0.65 |
| (2,322) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:88:HIS:H | 10 | 0.65 |
| (2,322) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:88:HIS:H | 15 | 0.65 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB1 | 9 | 0.65 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB2 | 9 | 0.65 |
| (2,252) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:11:ALA:HB3 | 9 | 0.65 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 6 | 0.65 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 6 | 0.65 |
| (2,249) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 6 | 0.65 |
| (2,229) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:14:ASN:HD22 | 10 | 0.65 |
| (2,229) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:14:ASN:HD22 | 10 | 0.65 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,229) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:14:ASN:HD22 | 10 | 0.65 |
| (2,217) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HB2 | 5 | 0.65 |
| (2,217) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HB2 | 9 | 0.65 |
| (2,203) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HB2 | 15 | 0.65 |
| (2,1920) | 1:A:76:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 2 | 0.65 |
| (2,191) | 1:A:9:LEU:HA | 1:A:12:ARG:HD3 | 4 | 0.65 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HG12 | 6 | 0.65 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HG12 | 6 | 0.65 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HG12 | 6 | 0.65 |
| (2,1869) | 1:A:65:ARG:HD2 | 1:A:65:ARG:HE | 10 | 0.65 |
| (2,1869) | 1:A:65:ARG:HD2 | 1:A:65:ARG:HE | 12 | 0.65 |
| (2,1869) | 1:A:65:ARG:HD2 | 1:A:65:ARG:HE | 13 | 0.65 |
| (2,1869) | 1:A:65:ARG:HD2 | 1:A:65:ARG:HE | 15 | 0.65 |
| (2,1868) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:ASN:H | 3 | 0.65 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:5:ALA:H | 11 | 0.65 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:5:ALA:H | 11 | 0.65 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:5:ALA:H | 11 | 0.65 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:5:ALA:H | 13 | 0.65 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:5:ALA:H | 13 | 0.65 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:5:ALA:H | 13 | 0.65 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:5:ALA:H | 16 | 0.65 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:5:ALA:H | 16 | 0.65 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:5:ALA:H | 16 | 0.65 |
| (2,1764) | 1:A:97:ARG:HD2 | 1:A:97:ARG:HA | 9 | 0.65 |
| (2,1764) | 1:A:97:ARG:HD2 | 1:A:97:ARG:HA | 16 | 0.65 |
| (2,1740) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:97:ARG:HB2 | 2 | 0.65 |
| (2,1740) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:97:ARG:HB2 | 5 | 0.65 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:91:THR:HA | 7 | 0.65 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:91:THR:HA | 7 | 0.65 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:91:THR:HA | 7 | 0.65 |
| (2,1673) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:91:THR:H | 6 | 0.65 |
| (2,1673) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:91:THR:H | 11 | 0.65 |
| (2,1673) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:91:THR:H | 16 | 0.65 |
| (2,1614) | 1:A:87:PRO:HA | 1:A:51:PHE:HZ | 9 | 0.65 |
| (2,1614) | 1:A:87:PRO:HA | 1:A:51:PHE:HZ | 16 | 0.65 |
| (2,1577) | 1:A:84:HIS:HB3 | 1:A:84:HIS:HB2 | 1 | 0.65 |
| (2,1577) | 1:A:84:HIS:HB3 | 1:A:84:HIS:HB2 | 2 | 0.65 |
| (2,1577) | 1:A:84:HIS:HB3 | 1:A:84:HIS:HB2 | 3 | 0.65 |
| (2,1577) | 1:A:84:HIS:HB3 | 1:A:84:HIS:HB2 | 4 | 0.65 |
| (2,1577) | 1:A:84:HIS:HB3 | 1:A:84:HIS:HB2 | 5 | 0.65 |
| (2,1577) | 1:A:84:HIS:HB3 | 1:A:84:HIS:HB2 | 6 | 0.65 |
| (2,1577) | 1:A:84:HIS:HB3 | 1:A:84:HIS:HB2 | 7 | 0.65 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,1577) | 1:A:84:HIS:HB3 | 1:A:84:HIS:HB2 | 10 | 0.65 |
| (2,1577) | 1:A:84:HIS:HB3 | 1:A:84:HIS:HB2 | 11 | 0.65 |
| (2,1577) | 1:A:84:HIS:HB3 | 1:A:84:HIS:HB2 | 12 | 0.65 |
| (2,1577) | 1:A:84:HIS:HB3 | 1:A:84:HIS:HB2 | 13 | 0.65 |
| (2,1577) | 1:A:84:HIS:HB3 | 1:A:84:HIS:HB2 | 14 | 0.65 |
| (2,1577) | 1:A:84:HIS:HB3 | 1:A:84:HIS:HB2 | 15 | 0.65 |
| (2,1577) | 1:A:84:HIS:HB3 | 1:A:84:HIS:HB2 | 16 | 0.65 |
| (2,1549) | 1:A:81:ILE:HB | 1:A:82:PHE:H | 4 | 0.65 |
| (2,1549) | 1:A:81:ILE:HB | 1:A:82:PHE:H | 6 | 0.65 |
| (2,1538) | 1:A:98:LEU:HB3 | 1:A:99:THR:H | 16 | 0.65 |
| (2,153) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:70:HIS:HB2 | 5 | 0.65 |
| (2,1469) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:74:LEU:HB3 | 1 | 0.65 |
| (2,1469) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:74:LEU:HB3 | 2 | 0.65 |
| (2,1469) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:74:LEU:HB3 | 3 | 0.65 |
| (2,1469) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:74:LEU:HB3 | 4 | 0.65 |
| (2,1469) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:74:LEU:HB3 | 5 | 0.65 |
| (2,1469) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:74:LEU:HB3 | 6 | 0.65 |
| (2,1469) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:74:LEU:HB3 | 7 | 0.65 |
| (2,1469) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:74:LEU:HB3 | 8 | 0.65 |
| (2,1469) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:74:LEU:HB3 | 9 | 0.65 |
| (2,1469) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:74:LEU:HB3 | 10 | 0.65 |
| (2,1469) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:74:LEU:HB3 | 11 | 0.65 |
| (2,1469) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:74:LEU:HB3 | 12 | 0.65 |
| (2,1469) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:74:LEU:HB3 | 13 | 0.65 |
| (2,1469) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:74:LEU:HB3 | 15 | 0.65 |
| (2,1469) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:74:LEU:HB3 | 16 | 0.65 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HG | 6 | 0.65 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HG | 6 | 0.65 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HG | 6 | 0.65 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HB2 | 6 | 0.65 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HB2 | 6 | 0.65 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HB2 | 6 | 0.65 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HB2 | 13 | 0.65 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HB2 | 13 | 0.65 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HB2 | 13 | 0.65 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HB2 | 14 | 0.65 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HB2 | 14 | 0.65 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HB2 | 14 | 0.65 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HB2 | 15 | 0.65 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HB2 | 15 | 0.65 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HB2 | 15 | 0.65 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:34:ALA:HA | 1 | 0.65 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:34:ALA:HA | 1 | 0.65 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:34:ALA:HA | 1 | 0.65 |
| (2,1392) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:81:ILE:H | 3 | 0.65 |
| (2,1392) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:81:ILE:H | 6 | 0.65 |
| (2,1376) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:97:ARG:HB3 | 1 | 0.65 |
| (2,1376) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:97:ARG:HB3 | 2 | 0.65 |
| (2,1376) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:97:ARG:HB3 | 3 | 0.65 |
| (2,1376) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:97:ARG:HB3 | 5 | 0.65 |
| (2,1376) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:97:ARG:HB3 | 6 | 0.65 |
| (2,1376) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:97:ARG:HB3 | 9 | 0.65 |
| (2,1376) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:97:ARG:HB3 | 12 | 0.65 |
| (2,1376) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:97:ARG:HB3 | 14 | 0.65 |
| (2,1376) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:97:ARG:HB3 | 16 | 0.65 |
| (2,1374) | 1:A:97:ARG:HD2 | 1:A:97:ARG:HB3 | 7 | 0.65 |
| (2,1369) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:97:ARG:H | 9 | 0.65 |
| (2,1369) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:97:ARG:H | 16 | 0.65 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:7:THR:H | 5 | 0.65 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:7:THR:H | 5 | 0.65 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:7:THR:H | 5 | 0.65 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD11 | 12 | 0.65 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD12 | 12 | 0.65 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD13 | 12 | 0.65 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD11 | 15 | 0.65 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD12 | 15 | 0.65 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD13 | 15 | 0.65 |
| (2,1212) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:ASN:HD21 | 12 | 0.65 |
| (2,1143) | 1:A:59:LEU:HD11 | 1:A:59:LEU:HA | 8 | 0.65 |
| (2,1143) | 1:A:59:LEU:HD12 | 1:A:59:LEU:HA | 8 | 0.65 |
| (2,1143) | 1:A:59:LEU:HD13 | 1:A:59:LEU:HA | 8 | 0.65 |
| (2,1143) | 1:A:59:LEU:HD11 | 1:A:59:LEU:HA | 14 | 0.65 |
| (2,1143) | 1:A:59:LEU:HD12 | 1:A:59:LEU:HA | 14 | 0.65 |
| (2,1143) | 1:A:59:LEU:HD13 | 1:A:59:LEU:HA | 14 | 0.65 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:51:PHE:HB3 | 9 | 0.65 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:51:PHE:HB3 | 9 | 0.65 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:51:PHE:HB3 | 9 | 0.65 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:51:PHE:HB3 | 10 | 0.65 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:51:PHE:HB3 | 10 | 0.65 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:51:PHE:HB3 | 10 | 0.65 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:51:PHE:HB3 | 12 | 0.65 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:51:PHE:HB3 | 12 | 0.65 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:51:PHE:HB3 | 12 | 0.65 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:51:PHE:HB3 | 15 | 0.65 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:51:PHE:HB3 | 15 | 0.65 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:51:PHE:HB3 | 15 | 0.65 |
| (2,1068) | 1:A:54:LEU:HB3 | 1:A:54:LEU:HB2 | 1 | 0.65 |
| (2,1068) | 1:A:54:LEU:HB3 | 1:A:54:LEU:HB2 | 2 | 0.65 |
| (2,1068) | 1:A:54:LEU:HB3 | 1:A:54:LEU:HB2 | 3 | 0.65 |
| (2,1068) | 1:A:54:LEU:HB3 | 1:A:54:LEU:HB2 | 5 | 0.65 |
| (2,1068) | 1:A:54:LEU:HB3 | 1:A:54:LEU:HB2 | 6 | 0.65 |
| (2,1068) | 1:A:54:LEU:HB3 | 1:A:54:LEU:HB2 | 7 | 0.65 |
| (2,1068) | 1:A:54:LEU:HB3 | 1:A:54:LEU:HB2 | 8 | 0.65 |
| (2,1068) | 1:A:54:LEU:HB3 | 1:A:54:LEU:HB2 | 9 | 0.65 |
| (2,1068) | 1:A:54:LEU:HB3 | 1:A:54:LEU:HB2 | 10 | 0.65 |
| (2,1068) | 1:A:54:LEU:HB3 | 1:A:54:LEU:HB2 | 11 | 0.65 |
| (2,1068) | 1:A:54:LEU:HB3 | 1:A:54:LEU:HB2 | 12 | 0.65 |
| (2,1068) | 1:A:54:LEU:HB3 | 1:A:54:LEU:HB2 | 13 | 0.65 |
| (2,1068) | 1:A:54:LEU:HB3 | 1:A:54:LEU:HB2 | 14 | 0.65 |
| (2,1068) | 1:A:54:LEU:HB3 | 1:A:54:LEU:HB2 | 15 | 0.65 |
| (2,1068) | 1:A:54:LEU:HB3 | 1:A:54:LEU:HB2 | 16 | 0.65 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 9 | 0.65 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 9 | 0.65 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 9 | 0.65 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG21 | 2 | 0.65 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG22 | 2 | 0.65 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG23 | 2 | 0.65 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG21 | 11 | 0.65 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG22 | 11 | 0.65 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG23 | 11 | 0.65 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG21 | 14 | 0.65 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG22 | 14 | 0.65 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG23 | 14 | 0.65 |
| (1,584) | 1:A:96:THR:H | 1:A:92:GLN:HB2 | 7 | 0.65 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 5 | 0.65 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 5 | 0.65 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 5 | 0.65 |
| (1,526) | 1:A:20:GLN:H | 1:A:20:GLN:HG3 | 4 | 0.65 |
| (1,469) | 1:A:8:ASP:H | 1:A:7:THR:HB | 6 | 0.65 |
| (1,469) | 1:A:8:ASP:H | 1:A:7:THR:HB | 14 | 0.65 |
| (1,389) | 1:A:65:ARG:HE | 1:A:65:ARG:HG2 | 12 | 0.65 |
| (1,366) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG2 | 10 | 0.65 |
| (1,279) | 1:A:14:ASN:HD21 | 1:A:14:ASN:HB2 | 15 | 0.65 |
| (1,279) | 1:A:14:ASN:HD21 | 1:A:14:ASN:HB2 | 16 | 0.65 |
| (1,274) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:80:LEU:H | 15 | 0.65 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD21 | 12 | 0.65 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD22 | 12 | 0.65 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD23 | 12 | 0.65 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB1 | 8 | 0.64 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB2 | 8 | 0.64 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB3 | 8 | 0.64 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB1 | 10 | 0.64 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB2 | 10 | 0.64 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB3 | 10 | 0.64 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG21 | 1:A:33:THR:HB | 8 | 0.64 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG22 | 1:A:33:THR:HB | 8 | 0.64 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG23 | 1:A:33:THR:HB | 8 | 0.64 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:40:HIS:HD2 | 15 | 0.64 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:40:HIS:HD2 | 15 | 0.64 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:40:HIS:HD2 | 15 | 0.64 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:74:LEU:HA | 3 | 0.64 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:74:LEU:HA | 3 | 0.64 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:74:LEU:HA | 3 | 0.64 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:74:LEU:HA | 4 | 0.64 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:74:LEU:HA | 4 | 0.64 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:74:LEU:HA | 4 | 0.64 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:74:LEU:HA | 5 | 0.64 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:74:LEU:HA | 5 | 0.64 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:74:LEU:HA | 5 | 0.64 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:74:LEU:HA | 6 | 0.64 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:74:LEU:HA | 6 | 0.64 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:74:LEU:HA | 6 | 0.64 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:74:LEU:HA | 7 | 0.64 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:74:LEU:HA | 7 | 0.64 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:74:LEU:HA | 7 | 0.64 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:74:LEU:HA | 8 | 0.64 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:74:LEU:HA | 8 | 0.64 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:74:LEU:HA | 8 | 0.64 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:74:LEU:HA | 13 | 0.64 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:74:LEU:HA | 13 | 0.64 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:74:LEU:HA | 13 | 0.64 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HG2 | 11 | 0.64 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HG2 | 11 | 0.64 |
| (2,769) | 1:A:34:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HG2 | 11 | 0.64 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:56:ILE:HG12 | 13 | 0.64 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:56:ILE:HG12 | 13 | 0.64 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:56:ILE:HG12 | 13 | 0.64 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:56:ILE:HG12 | 15 | 0.64 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:56:ILE:HG12 | 15 | 0.64 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:56:ILE:HG12 | 15 | 0.64 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HD1 | 2 | 0.64 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HD2 | 2 | 0.64 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HD1 | 2 | 0.64 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HD2 | 2 | 0.64 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HD1 | 2 | 0.64 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HD2 | 2 | 0.64 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HD1 | 3 | 0.64 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HD2 | 3 | 0.64 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HD1 | 3 | 0.64 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HD2 | 3 | 0.64 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HD1 | 3 | 0.64 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HD2 | 3 | 0.64 |
| (2,639) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG21 | 8 | 0.64 |
| (2,639) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG22 | 8 | 0.64 |
| (2,639) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG23 | 8 | 0.64 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:64:LEU:HB3 | 10 | 0.64 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:64:LEU:HB3 | 10 | 0.64 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:64:LEU:HB3 | 10 | 0.64 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:64:LEU:HB3 | 12 | 0.64 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:64:LEU:HB3 | 12 | 0.64 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:64:LEU:HB3 | 12 | 0.64 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD21 | 1 | 0.64 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD22 | 1 | 0.64 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD23 | 1 | 0.64 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD21 | 1 | 0.64 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD22 | 1 | 0.64 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD23 | 1 | 0.64 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD21 | 1 | 0.64 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD22 | 1 | 0.64 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD23 | 1 | 0.64 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD21 | 6 | 0.64 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD22 | 6 | 0.64 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD23 | 6 | 0.64 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD21 | 6 | 0.64 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD22 | 6 | 0.64 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD23 | 6 | 0.64 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD21 | 6 | 0.64 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD22 | 6 | 0.64 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD23 | 6 | 0.64 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD21 | 14 | 0.64 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD22 | 14 | 0.64 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD23 | 14 | 0.64 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD21 | 14 | 0.64 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD22 | 14 | 0.64 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD23 | 14 | 0.64 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD21 | 14 | 0.64 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD22 | 14 | 0.64 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD23 | 14 | 0.64 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG21 | 1:A:25:LEU:HB2 | 3 | 0.64 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG22 | 1:A:25:LEU:HB2 | 3 | 0.64 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG23 | 1:A:25:LEU:HB2 | 3 | 0.64 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG21 | 1:A:25:LEU:HB2 | 9 | 0.64 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG22 | 1:A:25:LEU:HB2 | 9 | 0.64 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG23 | 1:A:25:LEU:HB2 | 9 | 0.64 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 15 | 0.64 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 15 | 0.64 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 15 | 0.64 |
| (2,40) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HD1 | 2 | 0.64 |
| (2,40) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HD2 | 2 | 0.64 |
| (2,368) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:18:PRO:HB3 | 8 | 0.64 |
| (2,367) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:17:SER:HB2 | 1 | 0.64 |
| (2,367) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:17:SER:HB2 | 2 | 0.64 |
| (2,367) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:17:SER:HB2 | 3 | 0.64 |
| (2,367) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:17:SER:HB2 | 4 | 0.64 |
| (2,367) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:17:SER:HB2 | 5 | 0.64 |
| (2,367) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:17:SER:HB2 | 6 | 0.64 |
| (2,367) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:17:SER:HB2 | 7 | 0.64 |
| (2,367) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:17:SER:HB2 | 8 | 0.64 |
| (2,367) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:17:SER:HB2 | 9 | 0.64 |
| (2,367) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:17:SER:HB2 | 10 | 0.64 |
| (2,367) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:17:SER:HB2 | 12 | 0.64 |
| (2,367) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:17:SER:HB2 | 13 | 0.64 |
| (2,367) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:17:SER:HB2 | 14 | 0.64 |
| (2,367) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:17:SER:HB2 | 15 | 0.64 |
| (2,367) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:17:SER:HB2 | 16 | 0.64 |
| (2,322) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:88:HIS:H | 1 | 0.64 |
| (2,322) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:88:HIS:H | 3 | 0.64 |
| (2,322) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:88:HIS:H | 12 | 0.64 |
| (2,281) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:12:ARG:H | 10 | 0.64 |
| (2,279) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:12:ARG:HA | 2 | 0.64 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HB2 | 4 | 0.64 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HB2 | 4 | 0.64 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HB2 | 4 | 0.64 |
| (2,229) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:14:ASN:HD22 | 14 | 0.64 |
| (2,229) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:14:ASN:HD22 | 14 | 0.64 |
| (2,229) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:14:ASN:HD22 | 14 | 0.64 |
| (2,217) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HB2 | 1 | 0.64 |
| (2,217) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HB2 | 11 | 0.64 |
| (2,1920) | 1:A:76:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 1 | 0.64 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HG12 | 14 | 0.64 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HG12 | 14 | 0.64 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HG12 | 14 | 0.64 |
| (2,1869) | 1:A:65:ARG:HD2 | 1:A:65:ARG:HE | 1 | 0.64 |
| (2,1869) | 1:A:65:ARG:HD2 | 1:A:65:ARG:HE | 3 | 0.64 |
| (2,1869) | 1:A:65:ARG:HD2 | 1:A:65:ARG:HE | 7 | 0.64 |
| (2,1863) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:65:ARG:HE | 9 | 0.64 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:5:ALA:H | 2 | 0.64 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:5:ALA:H | 2 | 0.64 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:5:ALA:H | 2 | 0.64 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:5:ALA:H | 4 | 0.64 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:5:ALA:H | 4 | 0.64 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:5:ALA:H | 4 | 0.64 |
| (2,1764) | 1:A:97:ARG:HD2 | 1:A:97:ARG:HA | 3 | 0.64 |
| (2,1624) | 1:A:87:PRO:HB2 | 1:A:26:ALA:HA | 14 | 0.64 |
| (2,1614) | 1:A:87:PRO:HA | 1:A:51:PHE:HZ | 3 | 0.64 |
| (2,1614) | 1:A:87:PRO:HA | 1:A:51:PHE:HZ | 7 | 0.64 |
| (2,1577) | 1:A:84:HIS:HB3 | 1:A:84:HIS:HB2 | 8 | 0.64 |
| (2,1577) | 1:A:84:HIS:HB3 | 1:A:84:HIS:HB2 | 9 | 0.64 |
| (2,1571) | 1:A:84:HIS:HD2 | 1:A:83:ASP:HB3 | 7 | 0.64 |
| (2,1571) | 1:A:84:HIS:HD2 | 1:A:83:ASP:HB3 | 8 | 0.64 |
| (2,1571) | 1:A:84:HIS:HD2 | 1:A:83:ASP:HB3 | 12 | 0.64 |
| (2,1571) | 1:A:84:HIS:HD2 | 1:A:83:ASP:HB3 | 13 | 0.64 |
| (2,1549) | 1:A:81:ILE:HB | 1:A:82:PHE:H | 8 | 0.64 |
| (2,1538) | 1:A:98:LEU:HB3 | 1:A:99:THR:H | 12 | 0.64 |
| (2,1537) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:H | 8 | 0.64 |
| (2,153) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:70:HIS:HB2 | 3 | 0.64 |
| (2,153) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:70:HIS:HB2 | 15 | 0.64 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 10 | 0.64 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 10 | 0.64 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 10 | 0.64 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 10 | 0.64 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 10 | 0.64 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 10 | 0.64 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 10 | 0.64 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 10 | 0.64 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 10 | 0.64 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HG | 10 | 0.64 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HG | 10 | 0.64 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HG | 10 | 0.64 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HB2 | 7 | 0.64 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HB2 | 7 | 0.64 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HB2 | 7 | 0.64 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HB2 | 10 | 0.64 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HB2 | 10 | 0.64 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HB2 | 10 | 0.64 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HB2 | 11 | 0.64 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HB2 | 11 | 0.64 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HB2 | 11 | 0.64 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HB2 | 12 | 0.64 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HB2 | 12 | 0.64 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HB2 | 12 | 0.64 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:34:ALA:HA | 5 | 0.64 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:34:ALA:HA | 5 | 0.64 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:34:ALA:HA | 5 | 0.64 |
| (2,1376) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:97:ARG:HB3 | 4 | 0.64 |
| (2,1376) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:97:ARG:HB3 | 7 | 0.64 |
| (2,1376) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:97:ARG:HB3 | 8 | 0.64 |
| (2,1376) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:97:ARG:HB3 | 10 | 0.64 |
| (2,1376) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:97:ARG:HB3 | 11 | 0.64 |
| (2,1376) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:97:ARG:HB3 | 13 | 0.64 |
| (2,1376) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:97:ARG:HB3 | 15 | 0.64 |
| (2,1359) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:93:HIS:HB2 | 1 | 0.64 |
| (2,1359) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:93:HIS:HB2 | 2 | 0.64 |
| (2,1359) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:93:HIS:HB2 | 3 | 0.64 |
| (2,1359) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:93:HIS:HB2 | 4 | 0.64 |
| (2,1359) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:93:HIS:HB2 | 5 | 0.64 |
| (2,1359) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:93:HIS:HB2 | 6 | 0.64 |
| (2,1359) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:93:HIS:HB2 | 7 | 0.64 |
| (2,1359) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:93:HIS:HB2 | 8 | 0.64 |
| (2,1359) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:93:HIS:HB2 | 9 | 0.64 |
| (2,1359) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:93:HIS:HB2 | 10 | 0.64 |
| (2,1359) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:93:HIS:HB2 | 11 | 0.64 |
| (2,1359) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:93:HIS:HB2 | 12 | 0.64 |
| (2,1359) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:93:HIS:HB2 | 13 | 0.64 |
| (2,1359) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:93:HIS:HB2 | 14 | 0.64 |
| (2,1359) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:93:HIS:HB2 | 15 | 0.64 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1359) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:93:HIS:HB2 | 16 | 0.64 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:7:THR:H | 8 | 0.64 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:7:THR:H | 8 | 0.64 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:7:THR:H | 8 | 0.64 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD11 | 7 | 0.64 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD12 | 7 | 0.64 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD13 | 7 | 0.64 |
| (2,1319) | 1:A:68:LEU:HB3 | 1:A:68:LEU:H | 11 | 0.64 |
| (2,1304) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:H | 4 | 0.64 |
| (2,1304) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:H | 16 | 0.64 |
| (2,1237) | 1:A:64:LEU:HB2 | 1:A:64:LEU:HB3 | 1 | 0.64 |
| (2,1237) | 1:A:64:LEU:HB2 | 1:A:64:LEU:HB3 | 2 | 0.64 |
| (2,1237) | 1:A:64:LEU:HB2 | 1:A:64:LEU:HB3 | 3 | 0.64 |
| (2,1237) | 1:A:64:LEU:HB2 | 1:A:64:LEU:HB3 | 4 | 0.64 |
| (2,1237) | 1:A:64:LEU:HB2 | 1:A:64:LEU:HB3 | 5 | 0.64 |
| (2,1237) | 1:A:64:LEU:HB2 | 1:A:64:LEU:HB3 | 6 | 0.64 |
| (2,1237) | 1:A:64:LEU:HB2 | 1:A:64:LEU:HB3 | 7 | 0.64 |
| (2,1237) | 1:A:64:LEU:HB2 | 1:A:64:LEU:HB3 | 8 | 0.64 |
| (2,1237) | 1:A:64:LEU:HB2 | 1:A:64:LEU:HB3 | 9 | 0.64 |
| (2,1237) | 1:A:64:LEU:HB2 | 1:A:64:LEU:HB3 | 10 | 0.64 |
| (2,1237) | 1:A:64:LEU:HB2 | 1:A:64:LEU:HB3 | 11 | 0.64 |
| (2,1237) | 1:A:64:LEU:HB2 | 1:A:64:LEU:HB3 | 12 | 0.64 |
| (2,1237) | 1:A:64:LEU:HB2 | 1:A:64:LEU:HB3 | 13 | 0.64 |
| (2,1237) | 1:A:64:LEU:HB2 | 1:A:64:LEU:HB3 | 14 | 0.64 |
| (2,1237) | 1:A:64:LEU:HB2 | 1:A:64:LEU:HB3 | 15 | 0.64 |
| (2,1237) | 1:A:64:LEU:HB2 | 1:A:64:LEU:HB3 | 16 | 0.64 |
| (2,1143) | 1:A:59:LEU:HD11 | 1:A:59:LEU:HA | 4 | 0.64 |
| (2,1143) | 1:A:59:LEU:HD12 | 1:A:59:LEU:HA | 4 | 0.64 |
| (2,1143) | 1:A:59:LEU:HD13 | 1:A:59:LEU:HA | 4 | 0.64 |
| (2,1143) | 1:A:59:LEU:HD11 | 1:A:59:LEU:HA | 7 | 0.64 |
| (2,1143) | 1:A:59:LEU:HD12 | 1:A:59:LEU:HA | 7 | 0.64 |
| (2,1143) | 1:A:59:LEU:HD13 | 1:A:59:LEU:HA | 7 | 0.64 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:51:PHE:HB3 | 8 | 0.64 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:51:PHE:HB3 | 8 | 0.64 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:51:PHE:HB3 | 8 | 0.64 |
| (2,1100) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:90:LEU:HB2 | 8 | 0.64 |
| (2,1100) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:90:LEU:HB2 | 8 | 0.64 |
| (2,1100) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:90:LEU:HB2 | 8 | 0.64 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD11 | 9 | 0.64 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD12 | 9 | 0.64 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD13 | 9 | 0.64 |
| (2,101) | 1:A:5:ALA:HA | 1:A:8:ASP:HB2 | 5 | 0.64 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG21 | 11 | 0.64 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG22 | 11 | 0.64 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG23 | 11 | 0.64 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG21 | 10 | 0.64 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG22 | 10 | 0.64 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG23 | 10 | 0.64 |
| (1,469) | 1:A:8:ASP:H | 1:A:7:THR:HB | 5 | 0.64 |
| (1,469) | 1:A:8:ASP:H | 1:A:7:THR:HB | 9 | 0.64 |
| (1,389) | 1:A:65:ARG:HE | 1:A:65:ARG:HG2 | 3 | 0.64 |
| (1,366) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG2 | 4 | 0.64 |
| (1,366) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG2 | 7 | 0.64 |
| (1,366) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG2 | 15 | 0.64 |
| (1,349) | 1:A:17:SER:H | 1:A:20:GLN:HB2 | 15 | 0.64 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD21 | 10 | 0.64 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD22 | 10 | 0.64 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD23 | 10 | 0.64 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD21 | 4 | 0.64 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD22 | 4 | 0.64 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD23 | 4 | 0.64 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG21 | 1:A:33:THR:HB | 15 | 0.63 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG22 | 1:A:33:THR:HB | 15 | 0.63 |
| (2,939) | 1:A:45:ILE:HG23 | 1:A:33:THR:HB | 15 | 0.63 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:74:LEU:HA | 1 | 0.63 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:74:LEU:HA | 1 | 0.63 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:74:LEU:HA | 1 | 0.63 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:74:LEU:HA | 9 | 0.63 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:74:LEU:HA | 9 | 0.63 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:74:LEU:HA | 9 | 0.63 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:74:LEU:HA | 16 | 0.63 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:74:LEU:HA | 16 | 0.63 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:74:LEU:HA | 16 | 0.63 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:56:ILE:HG12 | 5 | 0.63 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:56:ILE:HG12 | 5 | 0.63 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:56:ILE:HG12 | 5 | 0.63 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:71:ASN:HB2 | 2 | 0.63 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:71:ASN:HB2 | 2 | 0.63 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:71:ASN:HB2 | 2 | 0.63 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:71:ASN:HB3 | 13 | 0.63 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:71:ASN:HB3 | 13 | 0.63 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:71:ASN:HB3 | 13 | 0.63 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HD1 | 12 | 0.63 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HD2 | 12 | 0.63 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HD1 | 12 | 0.63 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HD2 | 12 | 0.63 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HD1 | 12 | 0.63 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HD2 | 12 | 0.63 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD21 | 4 | 0.63 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD22 | 4 | 0.63 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD23 | 4 | 0.63 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD21 | 4 | 0.63 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD22 | 4 | 0.63 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD23 | 4 | 0.63 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD21 | 4 | 0.63 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD22 | 4 | 0.63 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD23 | 4 | 0.63 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD11 | 3 | 0.63 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD12 | 3 | 0.63 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD13 | 3 | 0.63 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD11 | 3 | 0.63 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD12 | 3 | 0.63 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD13 | 3 | 0.63 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD11 | 3 | 0.63 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD12 | 3 | 0.63 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD13 | 3 | 0.63 |
| (2,454) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:17:SER:H | 8 | 0.63 |
| (2,454) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:17:SER:H | 16 | 0.63 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 13 | 0.63 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 13 | 0.63 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 13 | 0.63 |
| (2,418) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 14 | 0.63 |
| (2,40) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HD1 | 14 | 0.63 |
| (2,40) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HD2 | 14 | 0.63 |
| (2,368) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:18:PRO:HB3 | 7 | 0.63 |
| (2,322) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:88:HIS:H | 7 | 0.63 |
| (2,322) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:88:HIS:H | 11 | 0.63 |
| (2,322) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:88:HIS:H | 13 | 0.63 |
| (2,313) | 1:A:85:PRO:HD2 | 1:A:84:HIS:HA | 3 | 0.63 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HB2 | 12 | 0.63 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HB2 | 12 | 0.63 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HB2 | 12 | 0.63 |
| (2,229) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:14:ASN:HD22 | 3 | 0.63 |
| (2,229) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:14:ASN:HD22 | 3 | 0.63 |
| (2,229) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:14:ASN:HD22 | 3 | 0.63 |
| (2,229) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:14:ASN:HD22 | 12 | 0.63 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,229) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:14:ASN:HD22 | 12 | 0.63 |
| (2,229) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:14:ASN:HD22 | 12 | 0.63 |
| (2,217) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HB2 | 7 | 0.63 |
| (2,217) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HB2 | 15 | 0.63 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HG12 | 1 | 0.63 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HG12 | 1 | 0.63 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HG12 | 1 | 0.63 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HG12 | 8 | 0.63 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HG12 | 8 | 0.63 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HG12 | 8 | 0.63 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HG12 | 13 | 0.63 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HG12 | 13 | 0.63 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HG12 | 13 | 0.63 |
| (2,1869) | 1:A:65:ARG:HD2 | 1:A:65:ARG:HE | 4 | 0.63 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:5:ALA:H | 6 | 0.63 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:5:ALA:H | 6 | 0.63 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:5:ALA:H | 6 | 0.63 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:5:ALA:H | 12 | 0.63 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:5:ALA:H | 12 | 0.63 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:5:ALA:H | 12 | 0.63 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:5:ALA:H | 15 | 0.63 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:5:ALA:H | 15 | 0.63 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:5:ALA:H | 15 | 0.63 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG21 | 14 | 0.63 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG22 | 14 | 0.63 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG23 | 14 | 0.63 |
| (2,1764) | 1:A:97:ARG:HD2 | 1:A:97:ARG:HA | 11 | 0.63 |
| (2,1740) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:97:ARG:HB2 | 8 | 0.63 |
| (2,1673) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:91:THR:H | 10 | 0.63 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 12 | 0.63 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 12 | 0.63 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 12 | 0.63 |
| (2,1549) | 1:A:81:ILE:HB | 1:A:82:PHE:H | 12 | 0.63 |
| (2,1537) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:H | 1 | 0.63 |
| (2,1537) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:H | 4 | 0.63 |
| (2,1537) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:H | 12 | 0.63 |
| (2,153) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:70:HIS:HB2 | 13 | 0.63 |
| (2,1529) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:21:GLN:H | 7 | 0.63 |
| (2,1522) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:13:LEU:HA | 13 | 0.63 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HG | 5 | 0.63 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HG | 5 | 0.63 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HG | 5 | 0.63 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HG | 14 | 0.63 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HG | 14 | 0.63 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HG | 14 | 0.63 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HB2 | 8 | 0.63 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HB2 | 8 | 0.63 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HB2 | 8 | 0.63 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:34:ALA:HA | 2 | 0.63 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:34:ALA:HA | 2 | 0.63 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:34:ALA:HA | 2 | 0.63 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:34:ALA:HA | 11 | 0.63 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:34:ALA:HA | 11 | 0.63 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:34:ALA:HA | 11 | 0.63 |
| (2,1392) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:81:ILE:H | 5 | 0.63 |
| (2,1392) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:81:ILE:H | 7 | 0.63 |
| (2,1392) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:81:ILE:H | 10 | 0.63 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB1 | 12 | 0.63 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB2 | 12 | 0.63 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB3 | 12 | 0.63 |
| (2,1378) | 1:A:97:ARG:HB3 | 1:A:74:LEU:HD21 | 9 | 0.63 |
| (2,1378) | 1:A:97:ARG:HB3 | 1:A:74:LEU:HD22 | 9 | 0.63 |
| (2,1378) | 1:A:97:ARG:HB3 | 1:A:74:LEU:HD23 | 9 | 0.63 |
| (2,1374) | 1:A:97:ARG:HD2 | 1:A:97:ARG:HB3 | 13 | 0.63 |
| (2,1365) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:94:LEU:H | 14 | 0.63 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:7:THR:H | 14 | 0.63 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:7:THR:H | 14 | 0.63 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:7:THR:H | 14 | 0.63 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD11 | 8 | 0.63 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD12 | 8 | 0.63 |
| (2,1271) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:90:LEU:HD13 | 8 | 0.63 |
| (2,1192) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:65:ARG:HB2 | 13 | 0.63 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:85:PRO:HA | 7 | 0.63 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:85:PRO:HA | 7 | 0.63 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:85:PRO:HA | 7 | 0.63 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:85:PRO:HA | 9 | 0.63 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:85:PRO:HA | 9 | 0.63 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:85:PRO:HA | 9 | 0.63 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:3:ALA:HA | 2 | 0.63 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:3:ALA:HA | 2 | 0.63 |
| (2,105) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:3:ALA:HA | 2 | 0.63 |
| (2,1014) | 1:A:50:ALA:HA | 1:A:51:PHE:HB3 | 9 | 0.63 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG21 | 12 | 0.63 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG22 | 12 | 0.63 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG23 | 12 | 0.63 |
| (1,584) | 1:A:96:THR:H | 1:A:92:GLN:HB2 | 2 | 0.63 |
| (1,584) | 1:A:96:THR:H | 1:A:92:GLN:HB2 | 3 | 0.63 |
| (1,526) | 1:A:20:GLN:H | 1:A:20:GLN:HG3 | 5 | 0.63 |
| (1,526) | 1:A:20:GLN:H | 1:A:20:GLN:HG3 | 16 | 0.63 |
| (1,279) | 1:A:14:ASN:HD21 | 1:A:14:ASN:HB2 | 7 | 0.63 |
| (1,158) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:4:SER:HA | 9 | 0.63 |
| (1,158) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:4:SER:HA | 10 | 0.63 |
| (2,923) | 1:A:101:SER:HB2 | 1:A:102:HIS:H | 9 | 0.62 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:40:HIS:HD2 | 6 | 0.62 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:40:HIS:HD2 | 6 | 0.62 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:40:HIS:HD2 | 6 | 0.62 |
| (2,894) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:43:GLU:HB2 | 15 | 0.62 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:74:LEU:HA | 10 | 0.62 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:74:LEU:HA | 10 | 0.62 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:74:LEU:HA | 10 | 0.62 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG21 | 12 | 0.62 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG22 | 12 | 0.62 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG23 | 12 | 0.62 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:71:ASN:HB2 | 10 | 0.62 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:71:ASN:HB2 | 10 | 0.62 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:71:ASN:HB2 | 10 | 0.62 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:71:ASN:HB2 | 12 | 0.62 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:71:ASN:HB2 | 12 | 0.62 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:71:ASN:HB2 | 12 | 0.62 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:64:LEU:HB3 | 2 | 0.62 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:64:LEU:HB3 | 2 | 0.62 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:64:LEU:HB3 | 2 | 0.62 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD21 | 8 | 0.62 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD22 | 8 | 0.62 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD23 | 8 | 0.62 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD21 | 8 | 0.62 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD22 | 8 | 0.62 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD23 | 8 | 0.62 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD21 | 8 | 0.62 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD22 | 8 | 0.62 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD23 | 8 | 0.62 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG21 | 1:A:25:LEU:HB2 | 6 | 0.62 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG22 | 1:A:25:LEU:HB2 | 6 | 0.62 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG23 | 1:A:25:LEU:HB2 | 6 | 0.62 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG21 | 1:A:25:LEU:HB2 | 16 | 0.62 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG22 | 1:A:25:LEU:HB2 | 16 | 0.62 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG23 | 1:A:25:LEU:HB2 | 16 | 0.62 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD21 | 6 | 0.62 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD22 | 6 | 0.62 |
| (2,535) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:13:LEU:HD23 | 6 | 0.62 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG21 | 3 | 0.62 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG22 | 3 | 0.62 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG23 | 3 | 0.62 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 3 | 0.62 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 3 | 0.62 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 3 | 0.62 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG21 | 6 | 0.62 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG22 | 6 | 0.62 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG23 | 6 | 0.62 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 6 | 0.62 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 6 | 0.62 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 6 | 0.62 |
| (2,368) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:18:PRO:HB3 | 1 | 0.62 |
| (2,368) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:18:PRO:HB3 | 16 | 0.62 |
| (2,322) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:88:HIS:H | 14 | 0.62 |
| (2,313) | 1:A:85:PRO:HD2 | 1:A:84:HIS:HA | 6 | 0.62 |
| (2,281) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:12:ARG:H | 12 | 0.62 |
| (2,281) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:12:ARG:H | 15 | 0.62 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HB2 | 6 | 0.62 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HB2 | 6 | 0.62 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HB2 | 6 | 0.62 |
| (2,217) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HB2 | 2 | 0.62 |
| (2,217) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HB2 | 4 | 0.62 |
| (2,217) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HB2 | 8 | 0.62 |
| (2,217) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HB2 | 14 | 0.62 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HG12 | 12 | 0.62 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HG12 | 12 | 0.62 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HG12 | 12 | 0.62 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:5:ALA:H | 1 | 0.62 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:5:ALA:H | 1 | 0.62 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:5:ALA:H | 1 | 0.62 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:99:THR:H | 7 | 0.62 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:99:THR:H | 7 | 0.62 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:99:THR:H | 7 | 0.62 |
| (2,1676) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HB3 | 1 | 0.62 |
| (2,1676) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HB3 | 2 | 0.62 |
| (2,1676) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HB3 | 4 | 0.62 |
| (2,1676) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HB3 | 5 | 0.62 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1676) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HB3 | 14 | 0.62 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 14 | 0.62 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 14 | 0.62 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 14 | 0.62 |
| (2,1614) | 1:A:87:PRO:HA | 1:A:51:PHE:HZ | 11 | 0.62 |
| (2,1571) | 1:A:84:HIS:HD2 | 1:A:83:ASP:HB3 | 10 | 0.62 |
| (2,1571) | 1:A:84:HIS:HD2 | 1:A:83:ASP:HB3 | 15 | 0.62 |
| (2,1538) | 1:A:98:LEU:HB3 | 1:A:99:THR:H | 10 | 0.62 |
| (2,1537) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:H | 6 | 0.62 |
| (2,1537) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:H | 7 | 0.62 |
| (2,1537) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:H | 16 | 0.62 |
| (2,1529) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:21:GLN:H | 10 | 0.62 |
| (2,1525) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:16:LEU:H | 7 | 0.62 |
| (2,1522) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:13:LEU:HA | 8 | 0.62 |
| (2,1522) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:13:LEU:HA | 9 | 0.62 |
| (2,1522) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:13:LEU:HA | 11 | 0.62 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HB2 | 1 | 0.62 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HB2 | 1 | 0.62 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HB2 | 1 | 0.62 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HB2 | 4 | 0.62 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HB2 | 4 | 0.62 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HB2 | 4 | 0.62 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HB2 | 16 | 0.62 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HB2 | 16 | 0.62 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HB2 | 16 | 0.62 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:34:ALA:HA | 3 | 0.62 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:34:ALA:HA | 3 | 0.62 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:34:ALA:HA | 3 | 0.62 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:34:ALA:HA | 12 | 0.62 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:34:ALA:HA | 12 | 0.62 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:34:ALA:HA | 12 | 0.62 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:34:ALA:HA | 15 | 0.62 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:34:ALA:HA | 15 | 0.62 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:34:ALA:HA | 15 | 0.62 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:34:ALA:HA | 16 | 0.62 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:34:ALA:HA | 16 | 0.62 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:34:ALA:HA | 16 | 0.62 |
| (2,1392) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:81:ILE:H | 12 | 0.62 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB1 | 4 | 0.62 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB2 | 4 | 0.62 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB3 | 4 | 0.62 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB1 | 10 | 0.62 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB2 | 10 | 0.62 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB3 | 10 | 0.62 |
| (2,1378) | 1:A:97:ARG:HB3 | 1:A:74:LEU:HD21 | 16 | 0.62 |
| (2,1378) | 1:A:97:ARG:HB3 | 1:A:74:LEU:HD22 | 16 | 0.62 |
| (2,1378) | 1:A:97:ARG:HB3 | 1:A:74:LEU:HD23 | 16 | 0.62 |
| (2,1374) | 1:A:97:ARG:HD2 | 1:A:97:ARG:HB3 | 4 | 0.62 |
| (2,1365) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:94:LEU:H | 10 | 0.62 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:7:THR:H | 7 | 0.62 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:7:THR:H | 7 | 0.62 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:7:THR:H | 7 | 0.62 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD11 | 4 | 0.62 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD12 | 4 | 0.62 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD13 | 4 | 0.62 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD11 | 6 | 0.62 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD12 | 6 | 0.62 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD13 | 6 | 0.62 |
| (2,1212) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:ASN:HD21 | 2 | 0.62 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:51:PHE:HB3 | 5 | 0.62 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:51:PHE:HB3 | 5 | 0.62 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:51:PHE:HB3 | 5 | 0.62 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:51:PHE:HB3 | 7 | 0.62 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:51:PHE:HB3 | 7 | 0.62 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:51:PHE:HB3 | 7 | 0.62 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:51:PHE:HB3 | 11 | 0.62 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:51:PHE:HB3 | 11 | 0.62 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:51:PHE:HB3 | 11 | 0.62 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 9 | 0.62 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 9 | 0.62 |
| (2,1032) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 9 | 0.62 |
| (2,1011) | 1:A:75:ASP:HA | 1:A:74:LEU:HG | 8 | 0.62 |
| (2,1011) | 1:A:75:ASP:HA | 1:A:74:LEU:HG | 12 | 0.62 |
| (2,101) | 1:A:5:ALA:HA | 1:A:8:ASP:HB2 | 1 | 0.62 |
| (2,101) | 1:A:5:ALA:HA | 1:A:8:ASP:HB2 | 8 | 0.62 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG21 | 13 | 0.62 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG22 | 13 | 0.62 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG23 | 13 | 0.62 |
| (1,602) | 1:A:57:ASP:H | 1:A:57:ASP:HB3 | 2 | 0.62 |
| (1,584) | 1:A:96:THR:H | 1:A:92:GLN:HB2 | 10 | 0.62 |
| (1,584) | 1:A:96:THR:H | 1:A:92:GLN:HB2 | 11 | 0.62 |
| (1,584) | 1:A:96:THR:H | 1:A:92:GLN:HB2 | 13 | 0.62 |
| (1,526) | 1:A:20:GLN:H | 1:A:20:GLN:HG3 | 7 | 0.62 |
| (1,366) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG2 | 5 | 0.62 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,351) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HD21 | 12 | 0.62 |
| (1,351) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HD22 | 12 | 0.62 |
| (1,351) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HD23 | 12 | 0.62 |
| (1,279) | 1:A:14:ASN:HD21 | 1:A:14:ASN:HB2 | 12 | 0.62 |
| (1,274) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:80:LEU:H | 5 | 0.62 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG21 | 7 | 0.62 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG22 | 7 | 0.62 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG23 | 7 | 0.62 |
| (1,158) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:4:SER:HA | 14 | 0.62 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD21 | 14 | 0.62 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD22 | 14 | 0.62 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD23 | 14 | 0.62 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB1 | 1 | 0.61 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB2 | 1 | 0.61 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB3 | 1 | 0.61 |
| (2,851) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:ASP:H | 10 | 0.61 |
| (2,851) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:ASP:H | 10 | 0.61 |
| (2,851) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:ASP:H | 10 | 0.61 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD11 | 1:A:65:ARG:H | 2 | 0.61 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD12 | 1:A:65:ARG:H | 2 | 0.61 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD13 | 1:A:65:ARG:H | 2 | 0.61 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HD1 | 14 | 0.61 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HD2 | 14 | 0.61 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HD1 | 14 | 0.61 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HD2 | 14 | 0.61 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HD1 | 14 | 0.61 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HD2 | 14 | 0.61 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:64:LEU:HB3 | 5 | 0.61 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:64:LEU:HB3 | 5 | 0.61 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:64:LEU:HB3 | 5 | 0.61 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD21 | 2 | 0.61 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD22 | 2 | 0.61 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD23 | 2 | 0.61 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD21 | 2 | 0.61 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD22 | 2 | 0.61 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD23 | 2 | 0.61 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD21 | 2 | 0.61 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD22 | 2 | 0.61 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD23 | 2 | 0.61 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD21 | 15 | 0.61 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD22 | 15 | 0.61 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD23 | 15 | 0.61 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD21 | 15 | 0.61 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD22 | 15 | 0.61 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD23 | 15 | 0.61 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD21 | 15 | 0.61 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD22 | 15 | 0.61 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD23 | 15 | 0.61 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD11 | 7 | 0.61 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD12 | 7 | 0.61 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD13 | 7 | 0.61 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD11 | 7 | 0.61 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD12 | 7 | 0.61 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD13 | 7 | 0.61 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD11 | 7 | 0.61 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD12 | 7 | 0.61 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD13 | 7 | 0.61 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:32:ALA:H | 10 | 0.61 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:32:ALA:H | 10 | 0.61 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:32:ALA:H | 10 | 0.61 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG21 | 1:A:25:LEU:HB2 | 4 | 0.61 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG22 | 1:A:25:LEU:HB2 | 4 | 0.61 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG23 | 1:A:25:LEU:HB2 | 4 | 0.61 |
| (2,508) | 1:A:23:GLN:HB3 | 1:A:20:GLN:HA | 1 | 0.61 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG21 | 14 | 0.61 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG22 | 14 | 0.61 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG23 | 14 | 0.61 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 14 | 0.61 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 14 | 0.61 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 14 | 0.61 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 14 | 0.61 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 14 | 0.61 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 14 | 0.61 |
| (2,423) | 1:A:18:PRO:HA | 1:A:21:GLN:HB2 | 16 | 0.61 |
| (2,417) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:H | 7 | 0.61 |
| (2,40) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HD1 | 4 | 0.61 |
| (2,40) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HD2 | 4 | 0.61 |
| (2,322) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:88:HIS:H | 6 | 0.61 |
| (2,322) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:88:HIS:H | 8 | 0.61 |
| (2,313) | 1:A:85:PRO:HD2 | 1:A:84:HIS:HA | 12 | 0.61 |
| (2,217) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HB2 | 10 | 0.61 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD11 | 9 | 0.61 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD12 | 9 | 0.61 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD13 | 9 | 0.61 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1869) | 1:A:65:ARG:HD2 | 1:A:65:ARG:HE | 16 | 0.61 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:ASN:HA | 12 | 0.61 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:ASN:HA | 12 | 0.61 |
| (2,1838) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:ASN:HA | 12 | 0.61 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:5:ALA:H | 3 | 0.61 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:5:ALA:H | 3 | 0.61 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:5:ALA:H | 3 | 0.61 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:5:ALA:H | 10 | 0.61 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:5:ALA:H | 10 | 0.61 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:5:ALA:H | 10 | 0.61 |
| (2,1740) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:97:ARG:HB2 | 9 | 0.61 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:91:THR:HA | 15 | 0.61 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:91:THR:HA | 15 | 0.61 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:91:THR:HA | 15 | 0.61 |
| (2,1676) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HB3 | 6 | 0.61 |
| (2,1676) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HB3 | 13 | 0.61 |
| (2,1676) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HB3 | 15 | 0.61 |
| (2,1673) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:91:THR:H | 7 | 0.61 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB1 | 5 | 0.61 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB2 | 5 | 0.61 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB3 | 5 | 0.61 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB1 | 9 | 0.61 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB2 | 9 | 0.61 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB3 | 9 | 0.61 |
| (2,1575) | 1:A:84:HIS:HB2 | 1:A:84:HIS:H | 14 | 0.61 |
| (2,1571) | 1:A:84:HIS:HD2 | 1:A:83:ASP:HB3 | 11 | 0.61 |
| (2,1539) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:99:THR:H | 12 | 0.61 |
| (2,1537) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:H | 3 | 0.61 |
| (2,153) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:70:HIS:HB2 | 4 | 0.61 |
| (2,1525) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:16:LEU:H | 2 | 0.61 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 6 | 0.61 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 6 | 0.61 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 6 | 0.61 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 6 | 0.61 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 6 | 0.61 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 6 | 0.61 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 6 | 0.61 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 6 | 0.61 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 6 | 0.61 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 7 | 0.61 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 7 | 0.61 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 7 | 0.61 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 7 | 0.61 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 7 | 0.61 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 7 | 0.61 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 7 | 0.61 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 7 | 0.61 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 7 | 0.61 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HG | 2 | 0.61 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HG | 2 | 0.61 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HG | 2 | 0.61 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HG | 7 | 0.61 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HG | 7 | 0.61 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HG | 7 | 0.61 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HG | 12 | 0.61 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HG | 12 | 0.61 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HG | 12 | 0.61 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HB2 | 2 | 0.61 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HB2 | 2 | 0.61 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HB2 | 2 | 0.61 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:34:ALA:HA | 13 | 0.61 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:34:ALA:HA | 13 | 0.61 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:34:ALA:HA | 13 | 0.61 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:34:ALA:HA | 14 | 0.61 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:34:ALA:HA | 14 | 0.61 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:34:ALA:HA | 14 | 0.61 |
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:39:HIS:HB2 | 13 | 0.61 |
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:39:HIS:HB2 | 13 | 0.61 |
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:39:HIS:HB2 | 13 | 0.61 |
| (2,1392) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:81:ILE:H | 1 | 0.61 |
| (2,1392) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:81:ILE:H | 8 | 0.61 |
| (2,1392) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:81:ILE:H | 15 | 0.61 |
| (2,139) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:4:SER:HB3 | 7 | 0.61 |
| (2,139) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:4:SER:HB3 | 7 | 0.61 |
| (2,139) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:4:SER:HB3 | 7 | 0.61 |
| (2,1378) | 1:A:97:ARG:HB3 | 1:A:74:LEU:HD21 | 10 | 0.61 |
| (2,1378) | 1:A:97:ARG:HB3 | 1:A:74:LEU:HD22 | 10 | 0.61 |
| (2,1378) | 1:A:97:ARG:HB3 | 1:A:74:LEU:HD23 | 10 | 0.61 |
| (2,1369) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:97:ARG:H | 14 | 0.61 |
| (2,1319) | 1:A:68:LEU:HB3 | 1:A:68:LEU:H | 3 | 0.61 |
| (2,1296) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:63:GLU:HA | 7 | 0.61 |
| (2,1220) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:35:THR:HG21 | 8 | 0.61 |
| (2,1220) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:35:THR:HG22 | 8 | 0.61 |
| (2,1220) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:35:THR:HG23 | 8 | 0.61 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1192) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:65:ARG:HB2 | 5 | 0.61 |
| (2,1192) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:65:ARG:HB2 | 9 | 0.61 |
| (2,117) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:4:SER:HA | 4 | 0.61 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:51:PHE:HB3 | 2 | 0.61 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:51:PHE:HB3 | 2 | 0.61 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:51:PHE:HB3 | 2 | 0.61 |
| (2,1014) | 1:A:50:ALA:HA | 1:A:51:PHE:HB3 | 7 | 0.61 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 12 | 0.61 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 12 | 0.61 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 12 | 0.61 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG21 | 13 | 0.61 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG22 | 13 | 0.61 |
| (1,596) | 1:A:33:THR:H | 1:A:29:VAL:HG23 | 13 | 0.61 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 1 | 0.61 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 1 | 0.61 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 1 | 0.61 |
| (1,526) | 1:A:20:GLN:H | 1:A:20:GLN:HG3 | 14 | 0.61 |
| (1,349) | 1:A:17:SER:H | 1:A:20:GLN:HB2 | 5 | 0.61 |
| (1,279) | 1:A:14:ASN:HD21 | 1:A:14:ASN:HB2 | 14 | 0.61 |
| (1,274) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:80:LEU:H | 2 | 0.61 |
| (1,274) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:80:LEU:H | 4 | 0.61 |
| (1,274) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:80:LEU:H | 6 | 0.61 |
| (1,274) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:80:LEU:H | 8 | 0.61 |
| (1,158) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:4:SER:HA | 5 | 0.61 |
| (1,143) | 1:A:49:THR:H | 1:A:50:ALA:H | 14 | 0.61 |
| (2,894) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:43:GLU:HB2 | 10 | 0.6 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG21 | 2 | 0.6 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG22 | 2 | 0.6 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG23 | 2 | 0.6 |
| (2,747) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:36:VAL:H | 13 | 0.6 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD11 | 1:A:65:ARG:H | 4 | 0.6 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD12 | 1:A:65:ARG:H | 4 | 0.6 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD13 | 1:A:65:ARG:H | 4 | 0.6 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD11 | 1:A:65:ARG:H | 9 | 0.6 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD12 | 1:A:65:ARG:H | 9 | 0.6 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD13 | 1:A:65:ARG:H | 9 | 0.6 |
| (2,658) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:28:LEU:HB2 | 11 | 0.6 |
| (2,658) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:28:LEU:HB2 | 12 | 0.6 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:71:ASN:HB2 | 1 | 0.6 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:71:ASN:HB2 | 1 | 0.6 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:71:ASN:HB2 | 1 | 0.6 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:71:ASN:HB2 | 7 | 0.6 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:71:ASN:HB2 | 7 | 0.6 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:71:ASN:HB2 | 7 | 0.6 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD21 | 3 | 0.6 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD22 | 3 | 0.6 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD23 | 3 | 0.6 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD21 | 4 | 0.6 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD22 | 4 | 0.6 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD23 | 4 | 0.6 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD21 | 10 | 0.6 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD22 | 10 | 0.6 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD23 | 10 | 0.6 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD21 | 16 | 0.6 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD22 | 16 | 0.6 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD23 | 16 | 0.6 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HD1 | 4 | 0.6 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HD2 | 4 | 0.6 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HD1 | 4 | 0.6 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HD2 | 4 | 0.6 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HD1 | 4 | 0.6 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HD2 | 4 | 0.6 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HD1 | 8 | 0.6 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HD2 | 8 | 0.6 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HD1 | 8 | 0.6 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HD2 | 8 | 0.6 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HD1 | 8 | 0.6 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HD2 | 8 | 0.6 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HD1 | 9 | 0.6 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HD2 | 9 | 0.6 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HD1 | 9 | 0.6 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HD2 | 9 | 0.6 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HD1 | 9 | 0.6 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HD2 | 9 | 0.6 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HD1 | 11 | 0.6 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HD2 | 11 | 0.6 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HD1 | 11 | 0.6 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HD2 | 11 | 0.6 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HD1 | 11 | 0.6 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HD2 | 11 | 0.6 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:64:LEU:HB3 | 1 | 0.6 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:64:LEU:HB3 | 1 | 0.6 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:64:LEU:HB3 | 1 | 0.6 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:64:LEU:HB3 | 14 | 0.6 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:64:LEU:HB3 | 14 | 0.6 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:64:LEU:HB3 | 14 | 0.6 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD21 | 7 | 0.6 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD22 | 7 | 0.6 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD23 | 7 | 0.6 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD21 | 7 | 0.6 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD22 | 7 | 0.6 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD23 | 7 | 0.6 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD21 | 7 | 0.6 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD22 | 7 | 0.6 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD23 | 7 | 0.6 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD21 | 10 | 0.6 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD22 | 10 | 0.6 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD23 | 10 | 0.6 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD21 | 10 | 0.6 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD22 | 10 | 0.6 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD23 | 10 | 0.6 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD21 | 10 | 0.6 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD22 | 10 | 0.6 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD23 | 10 | 0.6 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD11 | 11 | 0.6 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD12 | 11 | 0.6 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD13 | 11 | 0.6 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD11 | 11 | 0.6 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD12 | 11 | 0.6 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD13 | 11 | 0.6 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD11 | 11 | 0.6 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD12 | 11 | 0.6 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD13 | 11 | 0.6 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD11 | 15 | 0.6 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD12 | 15 | 0.6 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD13 | 15 | 0.6 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD11 | 15 | 0.6 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD12 | 15 | 0.6 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD13 | 15 | 0.6 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD11 | 15 | 0.6 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD12 | 15 | 0.6 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD13 | 15 | 0.6 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:32:ALA:H | 4 | 0.6 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:32:ALA:H | 4 | 0.6 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:32:ALA:H | 4 | 0.6 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:32:ALA:H | 9 | 0.6 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:32:ALA:H | 9 | 0.6 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:32:ALA:H | 9 | 0.6 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG21 | 15 | 0.6 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG22 | 15 | 0.6 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG23 | 15 | 0.6 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 15 | 0.6 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 15 | 0.6 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 15 | 0.6 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 6 | 0.6 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 6 | 0.6 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 6 | 0.6 |
| (2,417) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:H | 1 | 0.6 |
| (2,417) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:H | 11 | 0.6 |
| (2,313) | 1:A:85:PRO:HD2 | 1:A:84:HIS:HA | 4 | 0.6 |
| (2,313) | 1:A:85:PRO:HD2 | 1:A:84:HIS:HA | 8 | 0.6 |
| (2,313) | 1:A:85:PRO:HD2 | 1:A:84:HIS:HA | 15 | 0.6 |
| (2,31) | 1:A:39:HIS:HD2 | 1:A:37:LEU:HB3 | 13 | 0.6 |
| (2,217) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HB2 | 3 | 0.6 |
| (2,217) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HB2 | 13 | 0.6 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HG12 | 10 | 0.6 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HG12 | 10 | 0.6 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HG12 | 10 | 0.6 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HG12 | 15 | 0.6 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HG12 | 15 | 0.6 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HG12 | 15 | 0.6 |
| (2,1869) | 1:A:65:ARG:HD2 | 1:A:65:ARG:HE | 2 | 0.6 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:5:ALA:H | 7 | 0.6 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:5:ALA:H | 7 | 0.6 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:5:ALA:H | 7 | 0.6 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:5:ALA:H | 14 | 0.6 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:5:ALA:H | 14 | 0.6 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:5:ALA:H | 14 | 0.6 |
| (2,1764) | 1:A:97:ARG:HD2 | 1:A:97:ARG:HA | 12 | 0.6 |
| (2,1740) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:97:ARG:HB2 | 11 | 0.6 |
| (2,1696) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:25:LEU:HB3 | 13 | 0.6 |
| (2,1676) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HB3 | 10 | 0.6 |
| (2,1676) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HB3 | 12 | 0.6 |
| (2,1676) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HB3 | 16 | 0.6 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB1 | 4 | 0.6 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB2 | 4 | 0.6 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB3 | 4 | 0.6 |
| (2,1575) | 1:A:84:HIS:HB2 | 1:A:84:HIS:H | 3 | 0.6 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,1575) | 1:A:84:HIS:HB2 | 1:A:84:HIS:H | 8 | 0.6 |
| (2,1575) | 1:A:84:HIS:HB2 | 1:A:84:HIS:H | 9 | 0.6 |
| (2,1575) | 1:A:84:HIS:HB2 | 1:A:84:HIS:H | 10 | 0.6 |
| (2,1575) | 1:A:84:HIS:HB2 | 1:A:84:HIS:H | 11 | 0.6 |
| (2,1539) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:99:THR:H | 7 | 0.6 |
| (2,1537) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:H | 11 | 0.6 |
| (2,153) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:70:HIS:HB2 | 7 | 0.6 |
| (2,153) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:70:HIS:HB2 | 16 | 0.6 |
| (2,1529) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:21:GLN:H | 5 | 0.6 |
| (2,1529) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:21:GLN:H | 6 | 0.6 |
| (2,1529) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:21:GLN:H | 16 | 0.6 |
| (2,1525) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:16:LEU:H | 5 | 0.6 |
| (2,1525) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:16:LEU:H | 8 | 0.6 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HG | 1 | 0.6 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HG | 1 | 0.6 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HG | 1 | 0.6 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HG | 4 | 0.6 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HG | 4 | 0.6 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HG | 4 | 0.6 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HG | 11 | 0.6 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HG | 11 | 0.6 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HG | 11 | 0.6 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HB2 | 5 | 0.6 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HB2 | 5 | 0.6 |
| (2,1413) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HB2 | 5 | 0.6 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:34:ALA:HA | 4 | 0.6 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:34:ALA:HA | 4 | 0.6 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:34:ALA:HA | 4 | 0.6 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:34:ALA:HA | 9 | 0.6 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:34:ALA:HA | 9 | 0.6 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:34:ALA:HA | 9 | 0.6 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB1 | 2 | 0.6 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB2 | 2 | 0.6 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB3 | 2 | 0.6 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB1 | 6 | 0.6 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB2 | 6 | 0.6 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB3 | 6 | 0.6 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:7:THR:H | 10 | 0.6 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:7:THR:H | 10 | 0.6 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:7:THR:H | 10 | 0.6 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:7:THR:H | 12 | 0.6 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:7:THR:H | 12 | 0.6 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:7:THR:H | 12 | 0.6 |
| (2,1304) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:H | 13 | 0.6 |
| (2,117) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:4:SER:HA | 1 | 0.6 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:45:ILE:HG13 | 7 | 0.6 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:45:ILE:HG13 | 7 | 0.6 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:45:ILE:HG13 | 7 | 0.6 |
| (2,1014) | 1:A:50:ALA:HA | 1:A:51:PHE:HB3 | 1 | 0.6 |
| (2,1014) | 1:A:50:ALA:HA | 1:A:51:PHE:HB3 | 2 | 0.6 |
| (2,1014) | 1:A:50:ALA:HA | 1:A:51:PHE:HB3 | 4 | 0.6 |
| (2,1014) | 1:A:50:ALA:HA | 1:A:51:PHE:HB3 | 5 | 0.6 |
| (2,1014) | 1:A:50:ALA:HA | 1:A:51:PHE:HB3 | 6 | 0.6 |
| (2,1014) | 1:A:50:ALA:HA | 1:A:51:PHE:HB3 | 11 | 0.6 |
| (2,1014) | 1:A:50:ALA:HA | 1:A:51:PHE:HB3 | 14 | 0.6 |
| (2,1014) | 1:A:50:ALA:HA | 1:A:51:PHE:HB3 | 16 | 0.6 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 5 | 0.6 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 5 | 0.6 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 5 | 0.6 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 6 | 0.6 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 6 | 0.6 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 6 | 0.6 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG21 | 1 | 0.6 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG22 | 1 | 0.6 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG23 | 1 | 0.6 |
| (1,602) | 1:A:57:ASP:H | 1:A:57:ASP:HB3 | 12 | 0.6 |
| (1,576) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:27:THR:H | 7 | 0.6 |
| (1,576) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:27:THR:H | 8 | 0.6 |
| (1,576) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:27:THR:H | 9 | 0.6 |
| (1,576) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:27:THR:H | 15 | 0.6 |
| (1,349) | 1:A:17:SER:H | 1:A:20:GLN:HB2 | 1 | 0.6 |
| (1,349) | 1:A:17:SER:H | 1:A:20:GLN:HB2 | 7 | 0.6 |
| (1,279) | 1:A:14:ASN:HD21 | 1:A:14:ASN:HB2 | 2 | 0.6 |
| (1,274) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:80:LEU:H | 12 | 0.6 |
| (1,158) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:4:SER:HA | 6 | 0.6 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB1 | 13 | 0.59 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB2 | 13 | 0.59 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB3 | 13 | 0.59 |
| (2,894) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:43:GLU:HB2 | 11 | 0.59 |
| (2,747) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:36:VAL:H | 14 | 0.59 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HA | 4 | 0.59 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HA | 4 | 0.59 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HA | 4 | 0.59 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD11 | 1:A:65:ARG:H | 10 | 0.59 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD12 | 1:A:65:ARG:H | 10 | 0.59 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD13 | 1:A:65:ARG:H | 10 | 0.59 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD11 | 1:A:65:ARG:H | 14 | 0.59 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD12 | 1:A:65:ARG:H | 14 | 0.59 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD13 | 1:A:65:ARG:H | 14 | 0.59 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD11 | 1:A:65:ARG:H | 16 | 0.59 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD12 | 1:A:65:ARG:H | 16 | 0.59 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD13 | 1:A:65:ARG:H | 16 | 0.59 |
| (2,658) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:28:LEU:HB2 | 1 | 0.59 |
| (2,658) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:28:LEU:HB2 | 3 | 0.59 |
| (2,658) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:28:LEU:HB2 | 8 | 0.59 |
| (2,658) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:28:LEU:HB2 | 13 | 0.59 |
| (2,658) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:28:LEU:HB2 | 15 | 0.59 |
| (2,658) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:28:LEU:HB2 | 16 | 0.59 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:71:ASN:HB2 | 5 | 0.59 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:71:ASN:HB2 | 5 | 0.59 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:71:ASN:HB2 | 5 | 0.59 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD21 | 1 | 0.59 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD22 | 1 | 0.59 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD23 | 1 | 0.59 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD21 | 2 | 0.59 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD22 | 2 | 0.59 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD23 | 2 | 0.59 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD21 | 5 | 0.59 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD22 | 5 | 0.59 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD23 | 5 | 0.59 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD21 | 6 | 0.59 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD22 | 6 | 0.59 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD23 | 6 | 0.59 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD21 | 7 | 0.59 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD22 | 7 | 0.59 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD23 | 7 | 0.59 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD21 | 8 | 0.59 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD22 | 8 | 0.59 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD23 | 8 | 0.59 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD21 | 9 | 0.59 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD22 | 9 | 0.59 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD23 | 9 | 0.59 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD21 | 12 | 0.59 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD22 | 12 | 0.59 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD23 | 12 | 0.59 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD21 | 13 | 0.59 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD22 | 13 | 0.59 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD23 | 13 | 0.59 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD21 | 14 | 0.59 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD22 | 14 | 0.59 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD23 | 14 | 0.59 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD21 | 15 | 0.59 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD22 | 15 | 0.59 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD23 | 15 | 0.59 |
| (2,634) | 1:A:28:LEU:HG | 1:A:27:THR:H | 5 | 0.59 |
| (2,634) | 1:A:28:LEU:HG | 1:A:27:THR:H | 6 | 0.59 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:32:ALA:H | 2 | 0.59 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:32:ALA:H | 2 | 0.59 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:32:ALA:H | 2 | 0.59 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:32:ALA:H | 5 | 0.59 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:32:ALA:H | 5 | 0.59 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:32:ALA:H | 5 | 0.59 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:32:ALA:H | 14 | 0.59 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:32:ALA:H | 14 | 0.59 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:32:ALA:H | 14 | 0.59 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:32:ALA:H | 15 | 0.59 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:32:ALA:H | 15 | 0.59 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:32:ALA:H | 15 | 0.59 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:32:ALA:H | 16 | 0.59 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:32:ALA:H | 16 | 0.59 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:32:ALA:H | 16 | 0.59 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG21 | 1:A:25:LEU:HB2 | 2 | 0.59 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG22 | 1:A:25:LEU:HB2 | 2 | 0.59 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG23 | 1:A:25:LEU:HB2 | 2 | 0.59 |
| (2,513) | 1:A:23:GLN:HG3 | 1:A:23:GLN:H | 1 | 0.59 |
| (2,454) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:17:SER:H | 11 | 0.59 |
| (2,423) | 1:A:18:PRO:HA | 1:A:21:GLN:HB2 | 8 | 0.59 |
| (2,423) | 1:A:18:PRO:HA | 1:A:21:GLN:HB2 | 14 | 0.59 |
| (2,417) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:H | 5 | 0.59 |
| (2,417) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:H | 8 | 0.59 |
| (2,313) | 1:A:85:PRO:HD2 | 1:A:84:HIS:HA | 2 | 0.59 |
| (2,313) | 1:A:85:PRO:HD2 | 1:A:84:HIS:HA | 10 | 0.59 |
| (2,313) | 1:A:85:PRO:HD2 | 1:A:84:HIS:HA | 11 | 0.59 |
| (2,281) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:12:ARG:H | 4 | 0.59 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HB2 | 2 | 0.59 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HB2 | 2 | 0.59 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HB2 | 2 | 0.59 |
| (2,217) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HB2 | 6 | 0.59 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,217) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HB2 | 12 | 0.59 |
| (2,1869) | 1:A:65:ARG:HD2 | 1:A:65:ARG:HE | 6 | 0.59 |
| (2,1858) | 1:A:25:LEU:HG | 1:A:21:GLN:HA | 15 | 0.59 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:5:ALA:H | 8 | 0.59 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:5:ALA:H | 8 | 0.59 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:5:ALA:H | 8 | 0.59 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:5:ALA:H | 9 | 0.59 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:5:ALA:H | 9 | 0.59 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:5:ALA:H | 9 | 0.59 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG21 | 16 | 0.59 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG22 | 16 | 0.59 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG23 | 16 | 0.59 |
| (2,1696) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:25:LEU:HB3 | 7 | 0.59 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:91:THR:HA | 11 | 0.59 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:91:THR:HA | 11 | 0.59 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:91:THR:HA | 11 | 0.59 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:91:THR:HA | 16 | 0.59 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:91:THR:HA | 16 | 0.59 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:91:THR:HA | 16 | 0.59 |
| (2,1676) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HB3 | 3 | 0.59 |
| (2,1676) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HB3 | 7 | 0.59 |
| (2,1676) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HB3 | 11 | 0.59 |
| (2,1673) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:91:THR:H | 5 | 0.59 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB1 | 11 | 0.59 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB2 | 11 | 0.59 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB3 | 11 | 0.59 |
| (2,1624) | 1:A:87:PRO:HB2 | 1:A:26:ALA:HA | 13 | 0.59 |
| (2,1575) | 1:A:84:HIS:HB2 | 1:A:84:HIS:H | 2 | 0.59 |
| (2,1575) | 1:A:84:HIS:HB2 | 1:A:84:HIS:H | 6 | 0.59 |
| (2,1575) | 1:A:84:HIS:HB2 | 1:A:84:HIS:H | 7 | 0.59 |
| (2,1575) | 1:A:84:HIS:HB2 | 1:A:84:HIS:H | 12 | 0.59 |
| (2,1575) | 1:A:84:HIS:HB2 | 1:A:84:HIS:H | 15 | 0.59 |
| (2,1571) | 1:A:84:HIS:HD2 | 1:A:83:ASP:HB3 | 3 | 0.59 |
| (2,1537) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:H | 13 | 0.59 |
| (2,1537) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:H | 14 | 0.59 |
| (2,153) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:70:HIS:HB2 | 8 | 0.59 |
| (2,1529) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:21:GLN:H | 4 | 0.59 |
| (2,1525) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:16:LEU:H | 4 | 0.59 |
| (2,1521) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:21:GLN:HG2 | 15 | 0.59 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:68:LEU:HB2 | 9 | 0.59 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:68:LEU:HB2 | 9 | 0.59 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:68:LEU:HB2 | 9 | 0.59 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1471) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:74:LEU:H | 10 | 0.59 |
| (2,1431) | 1:A:67:THR:HB | 1:A:71:ASN:HD21 | 12 | 0.59 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB1 | 7 | 0.59 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB2 | 7 | 0.59 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB3 | 7 | 0.59 |
| (2,1304) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:H | 5 | 0.59 |
| (2,1304) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:H | 8 | 0.59 |
| (2,1304) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:H | 12 | 0.59 |
| (2,1212) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:ASN:HD21 | 8 | 0.59 |
| (2,1192) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:65:ARG:HB2 | 14 | 0.59 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD11 | 11 | 0.59 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD12 | 11 | 0.59 |
| (2,1085) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:37:LEU:HD13 | 11 | 0.59 |
| (2,1014) | 1:A:50:ALA:HA | 1:A:51:PHE:HB3 | 8 | 0.59 |
| (2,1014) | 1:A:50:ALA:HA | 1:A:51:PHE:HB3 | 15 | 0.59 |
| (1,602) | 1:A:57:ASP:H | 1:A:57:ASP:HB3 | 10 | 0.59 |
| (1,576) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:27:THR:H | 3 | 0.59 |
| (1,576) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:27:THR:H | 5 | 0.59 |
| (1,576) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:27:THR:H | 6 | 0.59 |
| (1,576) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:27:THR:H | 10 | 0.59 |
| (1,576) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:27:THR:H | 11 | 0.59 |
| (1,557) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:23:GLN:HG3 | 1 | 0.59 |
| (1,526) | 1:A:20:GLN:H | 1:A:20:GLN:HG3 | 8 | 0.59 |
| (1,41) | 1:A:15:GLY:H | 1:A:14:ASN:H | 12 | 0.59 |
| (1,408) | 1:A:4:SER:H | 1:A:3:ALA:HA | 4 | 0.59 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD21 | 1 | 0.59 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD22 | 1 | 0.59 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD23 | 1 | 0.59 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD21 | 16 | 0.59 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD22 | 16 | 0.59 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD23 | 16 | 0.59 |
| (1,282) | 1:A:14:ASN:HD21 | 1:A:11:ALA:HA | 16 | 0.59 |
| (1,279) | 1:A:14:ASN:HD21 | 1:A:14:ASN:HB2 | 3 | 0.59 |
| (1,279) | 1:A:14:ASN:HD21 | 1:A:14:ASN:HB2 | 9 | 0.59 |
| (1,279) | 1:A:14:ASN:HD21 | 1:A:14:ASN:HB2 | 13 | 0.59 |
| (1,208) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:47:PRO:HG3 | 8 | 0.59 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 7 | 0.59 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 7 | 0.59 |
| (1,193) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 7 | 0.59 |
| (1,191) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:65:ARG:HB2 | 16 | 0.59 |
| (1,158) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:4:SER:HA | 12 | 0.59 |
| (2,923) | 1:A:101:SER:HB2 | 1:A:102:HIS:H | 14 | 0.58 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:40:HIS:HD2 | 10 | 0.58 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:40:HIS:HD2 | 10 | 0.58 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:40:HIS:HD2 | 10 | 0.58 |
| (2,747) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:36:VAL:H | 7 | 0.58 |
| (2,747) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:36:VAL:H | 12 | 0.58 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HA | 16 | 0.58 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HA | 16 | 0.58 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HA | 16 | 0.58 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD11 | 1:A:65:ARG:H | 1 | 0.58 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD12 | 1:A:65:ARG:H | 1 | 0.58 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD13 | 1:A:65:ARG:H | 1 | 0.58 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD11 | 1:A:65:ARG:H | 5 | 0.58 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD12 | 1:A:65:ARG:H | 5 | 0.58 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD13 | 1:A:65:ARG:H | 5 | 0.58 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD11 | 1:A:65:ARG:H | 6 | 0.58 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD12 | 1:A:65:ARG:H | 6 | 0.58 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD13 | 1:A:65:ARG:H | 6 | 0.58 |
| (2,658) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:28:LEU:HB2 | 4 | 0.58 |
| (2,658) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:28:LEU:HB2 | 6 | 0.58 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:71:ASN:HB2 | 13 | 0.58 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:71:ASN:HB2 | 13 | 0.58 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:71:ASN:HB2 | 13 | 0.58 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD21 | 11 | 0.58 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD22 | 11 | 0.58 |
| (2,645) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HD23 | 11 | 0.58 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HD1 | 5 | 0.58 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HD2 | 5 | 0.58 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HD1 | 5 | 0.58 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HD2 | 5 | 0.58 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HD1 | 5 | 0.58 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HD2 | 5 | 0.58 |
| (2,634) | 1:A:28:LEU:HG | 1:A:27:THR:H | 2 | 0.58 |
| (2,634) | 1:A:28:LEU:HG | 1:A:27:THR:H | 4 | 0.58 |
| (2,634) | 1:A:28:LEU:HG | 1:A:27:THR:H | 14 | 0.58 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:64:LEU:HB3 | 9 | 0.58 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:64:LEU:HB3 | 9 | 0.58 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:64:LEU:HB3 | 9 | 0.58 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD11 | 10 | 0.58 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD12 | 10 | 0.58 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD13 | 10 | 0.58 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD11 | 10 | 0.58 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD12 | 10 | 0.58 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD13 | 10 | 0.58 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD11 | 10 | 0.58 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD12 | 10 | 0.58 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD13 | 10 | 0.58 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD11 | 12 | 0.58 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD12 | 12 | 0.58 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD13 | 12 | 0.58 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD11 | 12 | 0.58 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD12 | 12 | 0.58 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD13 | 12 | 0.58 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD11 | 12 | 0.58 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD12 | 12 | 0.58 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD13 | 12 | 0.58 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD11 | 16 | 0.58 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD12 | 16 | 0.58 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD13 | 16 | 0.58 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD11 | 16 | 0.58 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD12 | 16 | 0.58 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD13 | 16 | 0.58 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD11 | 16 | 0.58 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD12 | 16 | 0.58 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD13 | 16 | 0.58 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:32:ALA:H | 1 | 0.58 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:32:ALA:H | 1 | 0.58 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:32:ALA:H | 1 | 0.58 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:32:ALA:H | 7 | 0.58 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:32:ALA:H | 7 | 0.58 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:32:ALA:H | 7 | 0.58 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:32:ALA:H | 8 | 0.58 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:32:ALA:H | 8 | 0.58 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:32:ALA:H | 8 | 0.58 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG21 | 1:A:25:LEU:HB2 | 7 | 0.58 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG22 | 1:A:25:LEU:HB2 | 7 | 0.58 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG23 | 1:A:25:LEU:HB2 | 7 | 0.58 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG21 | 1:A:25:LEU:HB2 | 13 | 0.58 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG22 | 1:A:25:LEU:HB2 | 13 | 0.58 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG23 | 1:A:25:LEU:HB2 | 13 | 0.58 |
| (2,513) | 1:A:23:GLN:HG3 | 1:A:23:GLN:H | 10 | 0.58 |
| (2,513) | 1:A:23:GLN:HG3 | 1:A:23:GLN:H | 15 | 0.58 |
| (2,508) | 1:A:23:GLN:HB3 | 1:A:20:GLN:HA | 7 | 0.58 |
| (2,451) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:20:GLN:H | 7 | 0.58 |
| (2,449) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:H | 14 | 0.58 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 11 | 0.58 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 11 | 0.58 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 11 | 0.58 |
| (2,417) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:H | 3 | 0.58 |
| (2,417) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:H | 6 | 0.58 |
| (2,40) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HD1 | 8 | 0.58 |
| (2,40) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HD2 | 8 | 0.58 |
| (2,394) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:19:GLN:HA | 14 | 0.58 |
| (2,313) | 1:A:85:PRO:HD2 | 1:A:84:HIS:HA | 14 | 0.58 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HB2 | 1 | 0.58 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HB2 | 1 | 0.58 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HB2 | 1 | 0.58 |
| (2,1864) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:ASN:HA | 1 | 0.58 |
| (2,1764) | 1:A:97:ARG:HD2 | 1:A:97:ARG:HA | 1 | 0.58 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:40:HIS:HB2 | 10 | 0.58 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:40:HIS:HB2 | 10 | 0.58 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:40:HIS:HB2 | 10 | 0.58 |
| (2,1673) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:91:THR:H | 14 | 0.58 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:86:THR:H | 2 | 0.58 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:86:THR:H | 2 | 0.58 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:86:THR:H | 2 | 0.58 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 3 | 0.58 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 3 | 0.58 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 3 | 0.58 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 10 | 0.58 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 10 | 0.58 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 10 | 0.58 |
| (2,1575) | 1:A:84:HIS:HB2 | 1:A:84:HIS:H | 5 | 0.58 |
| (2,1575) | 1:A:84:HIS:HB2 | 1:A:84:HIS:H | 16 | 0.58 |
| (2,153) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:70:HIS:HB2 | 6 | 0.58 |
| (2,1529) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:21:GLN:H | 1 | 0.58 |
| (2,1529) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:21:GLN:H | 2 | 0.58 |
| (2,1529) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:21:GLN:H | 13 | 0.58 |
| (2,1521) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:21:GLN:HG2 | 1 | 0.58 |
| (2,1499) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:78:PRO:HB3 | 9 | 0.58 |
| (2,1493) | 1:A:79:THR:HB | 1:A:82:PHE:HB2 | 12 | 0.58 |
| (2,1471) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:74:LEU:H | 11 | 0.58 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HG | 3 | 0.58 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HG | 3 | 0.58 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HG | 3 | 0.58 |
| (2,1392) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:81:ILE:H | 4 | 0.58 |
| (2,1392) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:81:ILE:H | 16 | 0.58 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1378) | 1:A:97:ARG:HB3 | 1:A:74:LEU:HD21 | 3 | 0.58 |
| (2,1378) | 1:A:97:ARG:HB3 | 1:A:74:LEU:HD22 | 3 | 0.58 |
| (2,1378) | 1:A:97:ARG:HB3 | 1:A:74:LEU:HD23 | 3 | 0.58 |
| (2,1378) | 1:A:97:ARG:HB3 | 1:A:74:LEU:HD21 | 12 | 0.58 |
| (2,1378) | 1:A:97:ARG:HB3 | 1:A:74:LEU:HD22 | 12 | 0.58 |
| (2,1378) | 1:A:97:ARG:HB3 | 1:A:74:LEU:HD23 | 12 | 0.58 |
| (2,1365) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:94:LEU:H | 16 | 0.58 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:7:THR:H | 1 | 0.58 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:7:THR:H | 1 | 0.58 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:7:THR:H | 1 | 0.58 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:7:THR:H | 15 | 0.58 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:7:THR:H | 15 | 0.58 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:7:THR:H | 15 | 0.58 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD11 | 8 | 0.58 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD12 | 8 | 0.58 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD13 | 8 | 0.58 |
| (2,1304) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:H | 14 | 0.58 |
| (2,1304) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:H | 15 | 0.58 |
| (2,1296) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:63:GLU:HA | 10 | 0.58 |
| (2,1225) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:60:THR:HA | 8 | 0.58 |
| (2,1192) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:65:ARG:HB2 | 2 | 0.58 |
| (2,1192) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:65:ARG:HB2 | 4 | 0.58 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:85:PRO:HA | 15 | 0.58 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:85:PRO:HA | 15 | 0.58 |
| (2,1106) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:85:PRO:HA | 15 | 0.58 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:45:ILE:HG13 | 10 | 0.58 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:45:ILE:HG13 | 10 | 0.58 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:45:ILE:HG13 | 10 | 0.58 |
| (2,1024) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HB2 | 8 | 0.58 |
| (2,1024) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HB2 | 8 | 0.58 |
| (2,1014) | 1:A:50:ALA:HA | 1:A:51:PHE:HB3 | 3 | 0.58 |
| (2,1014) | 1:A:50:ALA:HA | 1:A:51:PHE:HB3 | 10 | 0.58 |
| (2,1014) | 1:A:50:ALA:HA | 1:A:51:PHE:HB3 | 13 | 0.58 |
| (2,101) | 1:A:5:ALA:HA | 1:A:8:ASP:HB2 | 3 | 0.58 |
| (1,584) | 1:A:96:THR:H | 1:A:92:GLN:HB2 | 1 | 0.58 |
| (1,584) | 1:A:96:THR:H | 1:A:92:GLN:HB2 | 6 | 0.58 |
| (1,584) | 1:A:96:THR:H | 1:A:92:GLN:HB2 | 8 | 0.58 |
| (1,584) | 1:A:96:THR:H | 1:A:92:GLN:HB2 | 14 | 0.58 |
| (1,584) | 1:A:96:THR:H | 1:A:92:GLN:HB2 | 15 | 0.58 |
| (1,576) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:27:THR:H | 12 | 0.58 |
| (1,576) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:27:THR:H | 16 | 0.58 |
| (1,558) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:23:GLN:HB3 | 10 | 0.58 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,558) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:23:GLN:HB3 | 15 | 0.58 |
| (1,557) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:23:GLN:HG3 | 10 | 0.58 |
| (1,557) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:23:GLN:HG3 | 15 | 0.58 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD21 | 4 | 0.58 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD22 | 4 | 0.58 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD23 | 4 | 0.58 |
| (1,279) | 1:A:14:ASN:HD21 | 1:A:14:ASN:HB2 | 10 | 0.58 |
| (1,279) | 1:A:14:ASN:HD21 | 1:A:14:ASN:HB2 | 11 | 0.58 |
| (1,274) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:80:LEU:H | 10 | 0.58 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD11 | 7 | 0.58 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD12 | 7 | 0.58 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD13 | 7 | 0.58 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD11 | 12 | 0.58 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD12 | 12 | 0.58 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD13 | 12 | 0.58 |
| (1,158) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:4:SER:HA | 7 | 0.58 |
| (1,143) | 1:A:49:THR:H | 1:A:50:ALA:H | 15 | 0.58 |
| (2,911) | 1:A:43:GLU:HB2 | 1:A:43:GLU:H | 13 | 0.57 |
| (2,888) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:41:THR:HA | 3 | 0.57 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG21 | 9 | 0.57 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG22 | 9 | 0.57 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG23 | 9 | 0.57 |
| (2,747) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:36:VAL:H | 1 | 0.57 |
| (2,747) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:36:VAL:H | 2 | 0.57 |
| (2,747) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:36:VAL:H | 4 | 0.57 |
| (2,747) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:36:VAL:H | 5 | 0.57 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD11 | 1:A:65:ARG:H | 13 | 0.57 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD12 | 1:A:65:ARG:H | 13 | 0.57 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD13 | 1:A:65:ARG:H | 13 | 0.57 |
| (2,658) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:28:LEU:HB2 | 2 | 0.57 |
| (2,658) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:28:LEU:HB2 | 5 | 0.57 |
| (2,658) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:28:LEU:HB2 | 7 | 0.57 |
| (2,658) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:28:LEU:HB2 | 9 | 0.57 |
| (2,658) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:28:LEU:HB2 | 14 | 0.57 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:71:ASN:HB2 | 6 | 0.57 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:71:ASN:HB2 | 6 | 0.57 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:71:ASN:HB2 | 6 | 0.57 |
| (2,634) | 1:A:28:LEU:HG | 1:A:27:THR:H | 3 | 0.57 |
| (2,634) | 1:A:28:LEU:HG | 1:A:27:THR:H | 7 | 0.57 |
| (2,634) | 1:A:28:LEU:HG | 1:A:27:THR:H | 9 | 0.57 |
| (2,634) | 1:A:28:LEU:HG | 1:A:27:THR:H | 10 | 0.57 |
| (2,634) | 1:A:28:LEU:HG | 1:A:27:THR:H | 12 | 0.57 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,634) | 1:A:28:LEU:HG | 1:A:27:THR:H | 16 | 0.57 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD11 | 13 | 0.57 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD12 | 13 | 0.57 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD13 | 13 | 0.57 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD11 | 13 | 0.57 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD12 | 13 | 0.57 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD13 | 13 | 0.57 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD11 | 13 | 0.57 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD12 | 13 | 0.57 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD13 | 13 | 0.57 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:32:ALA:H | 3 | 0.57 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:32:ALA:H | 3 | 0.57 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:32:ALA:H | 3 | 0.57 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:32:ALA:H | 6 | 0.57 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:32:ALA:H | 6 | 0.57 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:32:ALA:H | 6 | 0.57 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:20:GLN:HB3 | 9 | 0.57 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:20:GLN:HB3 | 9 | 0.57 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:20:GLN:HB3 | 9 | 0.57 |
| (2,451) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:20:GLN:H | 4 | 0.57 |
| (2,451) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:20:GLN:H | 16 | 0.57 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG21 | 2 | 0.57 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG22 | 2 | 0.57 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG23 | 2 | 0.57 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG21 | 2 | 0.57 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG22 | 2 | 0.57 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG23 | 2 | 0.57 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 7 | 0.57 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 7 | 0.57 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 7 | 0.57 |
| (2,418) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 6 | 0.57 |
| (2,40) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HD1 | 11 | 0.57 |
| (2,40) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HD2 | 11 | 0.57 |
| (2,313) | 1:A:85:PRO:HD2 | 1:A:84:HIS:HA | 5 | 0.57 |
| (2,313) | 1:A:85:PRO:HD2 | 1:A:84:HIS:HA | 9 | 0.57 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD11 | 9 | 0.57 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD12 | 9 | 0.57 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD13 | 9 | 0.57 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD11 | 9 | 0.57 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD12 | 9 | 0.57 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD13 | 9 | 0.57 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD11 | 9 | 0.57 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD12 | 9 | 0.57 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD13 | 9 | 0.57 |
| (2,217) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HB2 | 16 | 0.57 |
| (2,1858) | 1:A:25:LEU:HG | 1:A:21:GLN:HA | 6 | 0.57 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:5:ALA:H | 5 | 0.57 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:5:ALA:H | 5 | 0.57 |
| (2,1820) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:5:ALA:H | 5 | 0.57 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD21 | 8 | 0.57 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD22 | 8 | 0.57 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD23 | 8 | 0.57 |
| (2,1764) | 1:A:97:ARG:HD2 | 1:A:97:ARG:HA | 6 | 0.57 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:91:THR:HA | 2 | 0.57 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:91:THR:HA | 2 | 0.57 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:91:THR:HA | 2 | 0.57 |
| (2,1673) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:91:THR:H | 4 | 0.57 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:86:THR:H | 15 | 0.57 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:86:THR:H | 15 | 0.57 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:86:THR:H | 15 | 0.57 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB1 | 8 | 0.57 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB2 | 8 | 0.57 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB3 | 8 | 0.57 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB1 | 12 | 0.57 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB2 | 12 | 0.57 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB3 | 12 | 0.57 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB1 | 14 | 0.57 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB2 | 14 | 0.57 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB3 | 14 | 0.57 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 7 | 0.57 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 7 | 0.57 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 7 | 0.57 |
| (2,1575) | 1:A:84:HIS:HB2 | 1:A:84:HIS:H | 4 | 0.57 |
| (2,1537) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:H | 2 | 0.57 |
| (2,153) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:70:HIS:HB2 | 9 | 0.57 |
| (2,1525) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:16:LEU:H | 15 | 0.57 |
| (2,1519) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:21:GLN:HG3 | 3 | 0.57 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG21 | 3 | 0.57 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG22 | 3 | 0.57 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG23 | 3 | 0.57 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB1 | 16 | 0.57 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB2 | 16 | 0.57 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB3 | 16 | 0.57 |
| (2,1365) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:94:LEU:H | 1 | 0.57 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD11 | 1 | 0.57 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD12 | 1 | 0.57 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD13 | 1 | 0.57 |
| (2,1304) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:H | 6 | 0.57 |
| (2,1296) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:63:GLU:HA | 12 | 0.57 |
| (2,117) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:4:SER:HA | 16 | 0.57 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:45:ILE:HG13 | 3 | 0.57 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:45:ILE:HG13 | 3 | 0.57 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:45:ILE:HG13 | 3 | 0.57 |
| (2,1024) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HB2 | 9 | 0.57 |
| (2,1024) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HB2 | 9 | 0.57 |
| (2,1014) | 1:A:50:ALA:HA | 1:A:51:PHE:HB3 | 12 | 0.57 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 2 | 0.57 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 2 | 0.57 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 2 | 0.57 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 11 | 0.57 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 11 | 0.57 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 11 | 0.57 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG21 | 2 | 0.57 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG22 | 2 | 0.57 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG23 | 2 | 0.57 |
| (1,584) | 1:A:96:THR:H | 1:A:92:GLN:HB2 | 4 | 0.57 |
| (1,576) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:27:THR:H | 1 | 0.57 |
| (1,576) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:27:THR:H | 2 | 0.57 |
| (1,576) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:27:THR:H | 4 | 0.57 |
| (1,576) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:27:THR:H | 13 | 0.57 |
| (1,576) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:27:THR:H | 14 | 0.57 |
| (1,558) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:23:GLN:HB3 | 8 | 0.57 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD21 | 3 | 0.57 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD22 | 3 | 0.57 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD23 | 3 | 0.57 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD21 | 13 | 0.57 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD22 | 13 | 0.57 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD23 | 13 | 0.57 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD11 | 1 | 0.57 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD12 | 1 | 0.57 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD13 | 1 | 0.57 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD11 | 3 | 0.57 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD12 | 3 | 0.57 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD13 | 3 | 0.57 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD11 | 5 | 0.57 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD12 | 5 | 0.57 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD13 | 5 | 0.57 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD11 | 6 | 0.57 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD12 | 6 | 0.57 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD13 | 6 | 0.57 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD11 | 11 | 0.57 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD12 | 11 | 0.57 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD13 | 11 | 0.57 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD11 | 13 | 0.57 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD12 | 13 | 0.57 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD13 | 13 | 0.57 |
| (1,158) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:4:SER:HA | 1 | 0.57 |
| (1,143) | 1:A:49:THR:H | 1:A:50:ALA:H | 10 | 0.57 |
| (2,851) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:ASP:H | 16 | 0.56 |
| (2,851) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:ASP:H | 16 | 0.56 |
| (2,851) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:ASP:H | 16 | 0.56 |
| (2,747) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:36:VAL:H | 10 | 0.56 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD11 | 1:A:65:ARG:H | 7 | 0.56 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD12 | 1:A:65:ARG:H | 7 | 0.56 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD13 | 1:A:65:ARG:H | 7 | 0.56 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD11 | 1:A:65:ARG:H | 15 | 0.56 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD12 | 1:A:65:ARG:H | 15 | 0.56 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD13 | 1:A:65:ARG:H | 15 | 0.56 |
| (2,658) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:28:LEU:HB2 | 10 | 0.56 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:71:ASN:HB2 | 4 | 0.56 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:71:ASN:HB2 | 4 | 0.56 |
| (2,649) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:71:ASN:HB2 | 4 | 0.56 |
| (2,634) | 1:A:28:LEU:HG | 1:A:27:THR:H | 1 | 0.56 |
| (2,634) | 1:A:28:LEU:HG | 1:A:27:THR:H | 8 | 0.56 |
| (2,634) | 1:A:28:LEU:HG | 1:A:27:THR:H | 11 | 0.56 |
| (2,634) | 1:A:28:LEU:HG | 1:A:27:THR:H | 13 | 0.56 |
| (2,634) | 1:A:28:LEU:HG | 1:A:27:THR:H | 15 | 0.56 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:64:LEU:HB3 | 16 | 0.56 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:64:LEU:HB3 | 16 | 0.56 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:64:LEU:HB3 | 16 | 0.56 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD11 | 1 | 0.56 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD12 | 1 | 0.56 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD13 | 1 | 0.56 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD11 | 1 | 0.56 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD12 | 1 | 0.56 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD13 | 1 | 0.56 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD11 | 1 | 0.56 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD12 | 1 | 0.56 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD13 | 1 | 0.56 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:32:ALA:H | 12 | 0.56 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:32:ALA:H | 12 | 0.56 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:32:ALA:H | 12 | 0.56 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG21 | 1:A:25:LEU:HB2 | 15 | 0.56 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG22 | 1:A:25:LEU:HB2 | 15 | 0.56 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG23 | 1:A:25:LEU:HB2 | 15 | 0.56 |
| (2,513) | 1:A:23:GLN:HG3 | 1:A:23:GLN:H | 11 | 0.56 |
| (2,508) | 1:A:23:GLN:HB3 | 1:A:20:GLN:HA | 2 | 0.56 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG21 | 4 | 0.56 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG22 | 4 | 0.56 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG23 | 4 | 0.56 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 4 | 0.56 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 4 | 0.56 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 4 | 0.56 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:20:GLN:HB3 | 10 | 0.56 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:20:GLN:HB3 | 10 | 0.56 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:20:GLN:HB3 | 10 | 0.56 |
| (2,451) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:20:GLN:H | 11 | 0.56 |
| (2,423) | 1:A:18:PRO:HA | 1:A:21:GLN:HB2 | 3 | 0.56 |
| (2,417) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:H | 9 | 0.56 |
| (2,31) | 1:A:39:HIS:HD2 | 1:A:37:LEU:HB3 | 12 | 0.56 |
| (2,281) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:12:ARG:H | 16 | 0.56 |
| (2,1869) | 1:A:65:ARG:HD2 | 1:A:65:ARG:HE | 14 | 0.56 |
| (2,1858) | 1:A:25:LEU:HG | 1:A:21:GLN:HA | 10 | 0.56 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG21 | 12 | 0.56 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG22 | 12 | 0.56 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG23 | 12 | 0.56 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HZ | 1 | 0.56 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HZ | 1 | 0.56 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HZ | 1 | 0.56 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HZ | 8 | 0.56 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HZ | 8 | 0.56 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HZ | 8 | 0.56 |
| (2,1673) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:91:THR:H | 1 | 0.56 |
| (2,1673) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:91:THR:H | 12 | 0.56 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:86:THR:H | 11 | 0.56 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:86:THR:H | 11 | 0.56 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:86:THR:H | 11 | 0.56 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:86:THR:H | 14 | 0.56 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:86:THR:H | 14 | 0.56 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:86:THR:H | 14 | 0.56 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB1 | 12 | 0.56 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB2 | 12 | 0.56 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB3 | 12 | 0.56 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB1 | 14 | 0.56 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB2 | 14 | 0.56 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB3 | 14 | 0.56 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB1 | 1 | 0.56 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB2 | 1 | 0.56 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB3 | 1 | 0.56 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB1 | 2 | 0.56 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB2 | 2 | 0.56 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB3 | 2 | 0.56 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB1 | 5 | 0.56 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB2 | 5 | 0.56 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB3 | 5 | 0.56 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB1 | 6 | 0.56 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB2 | 6 | 0.56 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB3 | 6 | 0.56 |
| (2,1575) | 1:A:84:HIS:HB2 | 1:A:84:HIS:H | 1 | 0.56 |
| (2,1575) | 1:A:84:HIS:HB2 | 1:A:84:HIS:H | 13 | 0.56 |
| (2,1539) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:99:THR:H | 1 | 0.56 |
| (2,1525) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:16:LEU:H | 9 | 0.56 |
| (2,1525) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:16:LEU:H | 10 | 0.56 |
| (2,1521) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:21:GLN:HG2 | 12 | 0.56 |
| (2,1519) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:21:GLN:HG3 | 7 | 0.56 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:68:LEU:HB2 | 2 | 0.56 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:68:LEU:HB2 | 2 | 0.56 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:68:LEU:HB2 | 2 | 0.56 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:68:LEU:HB2 | 6 | 0.56 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:68:LEU:HB2 | 6 | 0.56 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:68:LEU:HB2 | 6 | 0.56 |
| (2,1493) | 1:A:79:THR:HB | 1:A:82:PHE:HB2 | 15 | 0.56 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG21 | 4 | 0.56 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG22 | 4 | 0.56 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG23 | 4 | 0.56 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG21 | 13 | 0.56 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG22 | 13 | 0.56 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG23 | 13 | 0.56 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 2 | 0.56 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 2 | 0.56 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 2 | 0.56 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 2 | 0.56 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 2 | 0.56 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 2 | 0.56 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 2 | 0.56 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 2 | 0.56 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 2 | 0.56 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HG | 16 | 0.56 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HG | 16 | 0.56 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HG | 16 | 0.56 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:34:ALA:HA | 8 | 0.56 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:34:ALA:HA | 8 | 0.56 |
| (2,1401) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:34:ALA:HA | 8 | 0.56 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB1 | 5 | 0.56 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB2 | 5 | 0.56 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB3 | 5 | 0.56 |
| (2,1365) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:94:LEU:H | 9 | 0.56 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:7:THR:H | 6 | 0.56 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:7:THR:H | 6 | 0.56 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:7:THR:H | 6 | 0.56 |
| (2,1332) | 1:A:94:LEU:HG | 1:A:94:LEU:H | 3 | 0.56 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD11 | 9 | 0.56 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD12 | 9 | 0.56 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD13 | 9 | 0.56 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD11 | 14 | 0.56 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD12 | 14 | 0.56 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD13 | 14 | 0.56 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD11 | 16 | 0.56 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD12 | 16 | 0.56 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD13 | 16 | 0.56 |
| (2,1317) | 1:A:68:LEU:HB3 | 1:A:68:LEU:HB2 | 3 | 0.56 |
| (2,1304) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:H | 2 | 0.56 |
| (2,1304) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:H | 10 | 0.56 |
| (2,1296) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:63:GLU:HA | 9 | 0.56 |
| (2,1296) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:63:GLU:HA | 13 | 0.56 |
| (2,1212) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:ASN:HD21 | 5 | 0.56 |
| (2,1193) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:65:ARG:HB2 | 7 | 0.56 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:51:PHE:HB3 | 1 | 0.56 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:51:PHE:HB3 | 1 | 0.56 |
| (2,1122) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:51:PHE:HB3 | 1 | 0.56 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:51:PHE:HB3 | 3 | 0.56 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:51:PHE:HB3 | 3 | 0.56 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:51:PHE:HB3 | 3 | 0.56 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:45:ILE:HG13 | 2 | 0.56 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:45:ILE:HG13 | 2 | 0.56 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:45:ILE:HG13 | 2 | 0.56 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:54:LEU:HA | 7 | 0.56 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:54:LEU:HA | 7 | 0.56 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:54:LEU:HA | 7 | 0.56 |
| (2,1064) | 1:A:53:ASP:HB3 | 1:A:50:ALA:H | 14 | 0.56 |
| (2,1024) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HB2 | 1 | 0.56 |
| (2,1024) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HB2 | 1 | 0.56 |
| (2,1024) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HB2 | 2 | 0.56 |
| (2,1024) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HB2 | 2 | 0.56 |
| (2,1024) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HB2 | 3 | 0.56 |
| (2,1024) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HB2 | 3 | 0.56 |
| (2,1024) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HB2 | 4 | 0.56 |
| (2,1024) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HB2 | 4 | 0.56 |
| (2,1024) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HB2 | 5 | 0.56 |
| (2,1024) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HB2 | 5 | 0.56 |
| (2,1024) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HB2 | 6 | 0.56 |
| (2,1024) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HB2 | 6 | 0.56 |
| (2,1024) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HB2 | 7 | 0.56 |
| (2,1024) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HB2 | 7 | 0.56 |
| (2,1024) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HB2 | 10 | 0.56 |
| (2,1024) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HB2 | 10 | 0.56 |
| (2,1024) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HB2 | 11 | 0.56 |
| (2,1024) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HB2 | 11 | 0.56 |
| (2,1024) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HB2 | 13 | 0.56 |
| (2,1024) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HB2 | 13 | 0.56 |
| (2,1024) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HB2 | 14 | 0.56 |
| (2,1024) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HB2 | 14 | 0.56 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 1 | 0.56 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 1 | 0.56 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 1 | 0.56 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 7 | 0.56 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 7 | 0.56 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 7 | 0.56 |
| (1,558) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:23:GLN:HB3 | 1 | 0.56 |
| (1,558) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:23:GLN:HB3 | 6 | 0.56 |
| (1,558) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:23:GLN:HB3 | 11 | 0.56 |
| (1,558) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:23:GLN:HB3 | 16 | 0.56 |
| (1,557) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:23:GLN:HG3 | 11 | 0.56 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG21 | 9 | 0.56 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG22 | 9 | 0.56 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG23 | 9 | 0.56 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB1 | 7 | 0.56 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB2 | 7 | 0.56 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB3 | 7 | 0.56 |
| (1,279) | 1:A:14:ASN:HD21 | 1:A:14:ASN:HB2 | 8 | 0.56 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD11 | 4 | 0.56 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD12 | 4 | 0.56 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD13 | 4 | 0.56 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD11 | 8 | 0.56 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD12 | 8 | 0.56 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD13 | 8 | 0.56 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD11 | 9 | 0.56 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD12 | 9 | 0.56 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD13 | 9 | 0.56 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD11 | 10 | 0.56 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD12 | 10 | 0.56 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD13 | 10 | 0.56 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD11 | 14 | 0.56 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD12 | 14 | 0.56 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD13 | 14 | 0.56 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD11 | 16 | 0.56 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD12 | 16 | 0.56 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD13 | 16 | 0.56 |
| (1,158) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:4:SER:HA | 13 | 0.56 |
| (2,888) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:41:THR:HA | 2 | 0.55 |
| (2,747) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:36:VAL:H | 6 | 0.55 |
| (2,747) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:36:VAL:H | 9 | 0.55 |
| (2,747) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:36:VAL:H | 11 | 0.55 |
| (2,747) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:36:VAL:H | 15 | 0.55 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HD1 | 15 | 0.55 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HD2 | 15 | 0.55 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HD1 | 15 | 0.55 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HD2 | 15 | 0.55 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HD1 | 15 | 0.55 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HD2 | 15 | 0.55 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:64:LEU:HB3 | 3 | 0.55 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:64:LEU:HB3 | 3 | 0.55 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:64:LEU:HB3 | 3 | 0.55 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD11 | 9 | 0.55 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD12 | 9 | 0.55 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD13 | 9 | 0.55 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD11 | 9 | 0.55 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD12 | 9 | 0.55 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD13 | 9 | 0.55 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD11 | 9 | 0.55 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD12 | 9 | 0.55 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD13 | 9 | 0.55 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD11 | 2 | 0.55 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD12 | 2 | 0.55 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD13 | 2 | 0.55 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD11 | 2 | 0.55 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD12 | 2 | 0.55 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD13 | 2 | 0.55 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD11 | 2 | 0.55 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD12 | 2 | 0.55 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD13 | 2 | 0.55 |
| (2,554) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:25:LEU:HB3 | 1 | 0.55 |
| (2,554) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:25:LEU:HB3 | 2 | 0.55 |
| (2,554) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:25:LEU:HB3 | 3 | 0.55 |
| (2,554) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:25:LEU:HB3 | 4 | 0.55 |
| (2,554) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:25:LEU:HB3 | 5 | 0.55 |
| (2,554) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:25:LEU:HB3 | 6 | 0.55 |
| (2,554) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:25:LEU:HB3 | 7 | 0.55 |
| (2,554) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:25:LEU:HB3 | 8 | 0.55 |
| (2,554) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:25:LEU:HB3 | 9 | 0.55 |
| (2,554) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:25:LEU:HB3 | 10 | 0.55 |
| (2,554) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:25:LEU:HB3 | 11 | 0.55 |
| (2,554) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:25:LEU:HB3 | 12 | 0.55 |
| (2,554) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:25:LEU:HB3 | 13 | 0.55 |
| (2,554) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:25:LEU:HB3 | 14 | 0.55 |
| (2,554) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:25:LEU:HB3 | 15 | 0.55 |
| (2,554) | 1:A:25:LEU:HB2 | 1:A:25:LEU:HB3 | 16 | 0.55 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG21 | 1:A:25:LEU:HB2 | 5 | 0.55 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG22 | 1:A:25:LEU:HB2 | 5 | 0.55 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG23 | 1:A:25:LEU:HB2 | 5 | 0.55 |
| (2,513) | 1:A:23:GLN:HG3 | 1:A:23:GLN:H | 7 | 0.55 |
| (2,471) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HB3 | 1 | 0.55 |
| (2,454) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:17:SER:H | 3 | 0.55 |
| (2,451) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:20:GLN:H | 2 | 0.55 |
| (2,451) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:20:GLN:H | 14 | 0.55 |
| (2,451) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:20:GLN:H | 15 | 0.55 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG21 | 4 | 0.55 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG22 | 4 | 0.55 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG23 | 4 | 0.55 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG21 | 4 | 0.55 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG22 | 4 | 0.55 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG23 | 4 | 0.55 |
| (2,449) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:H | 2 | 0.55 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 16 | 0.55 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 16 | 0.55 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 16 | 0.55 |
| (2,427) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:HG3 | 1 | 0.55 |
| (2,427) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:HG3 | 3 | 0.55 |
| (2,427) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:HG3 | 6 | 0.55 |
| (2,427) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:HG3 | 7 | 0.55 |
| (2,427) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:HG3 | 11 | 0.55 |
| (2,417) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:H | 2 | 0.55 |
| (2,417) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:H | 10 | 0.55 |
| (2,394) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:19:GLN:HA | 1 | 0.55 |
| (2,394) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:19:GLN:HA | 9 | 0.55 |
| (2,394) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:19:GLN:HA | 16 | 0.55 |
| (2,370) | 1:A:17:SER:HB2 | 1:A:20:GLN:HG3 | 9 | 0.55 |
| (2,355) | 1:A:16:LEU:HG | 1:A:20:GLN:HG3 | 9 | 0.55 |
| (2,355) | 1:A:16:LEU:HG | 1:A:20:GLN:HG3 | 15 | 0.55 |
| (2,299) | 1:A:13:LEU:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 8 | 0.55 |
| (2,299) | 1:A:13:LEU:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 10 | 0.55 |
| (2,299) | 1:A:13:LEU:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 13 | 0.55 |
| (2,281) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:12:ARG:H | 7 | 0.55 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD11 | 5 | 0.55 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD12 | 5 | 0.55 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD13 | 5 | 0.55 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD11 | 5 | 0.55 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD12 | 5 | 0.55 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD13 | 5 | 0.55 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD11 | 5 | 0.55 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD12 | 5 | 0.55 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD13 | 5 | 0.55 |
| (2,235) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:52:LYS:HE2 | 12 | 0.55 |
| (2,235) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:52:LYS:HE2 | 12 | 0.55 |
| (2,235) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:52:LYS:HE2 | 12 | 0.55 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD11 | 5 | 0.55 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD12 | 5 | 0.55 |
| (2,1884) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HD13 | 5 | 0.55 |
| (2,1868) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:ASN:H | 13 | 0.55 |
| (2,1866) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:65:ARG:HD2 | 11 | 0.55 |
| (2,1854) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HB2 | 15 | 0.55 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:40:HIS:HB2 | 8 | 0.55 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:40:HIS:HB2 | 8 | 0.55 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:40:HIS:HB2 | 8 | 0.55 |
| (2,1751) | 1:A:95:HIS:HB3 | 1:A:95:HIS:HB2 | 3 | 0.55 |
| (2,1751) | 1:A:95:HIS:HB3 | 1:A:95:HIS:HB2 | 8 | 0.55 |
| (2,1751) | 1:A:95:HIS:HB3 | 1:A:95:HIS:HB2 | 11 | 0.55 |
| (2,1745) | 1:A:94:LEU:HB2 | 1:A:94:LEU:HB3 | 1 | 0.55 |
| (2,1745) | 1:A:94:LEU:HB2 | 1:A:94:LEU:HB3 | 3 | 0.55 |
| (2,1745) | 1:A:94:LEU:HB2 | 1:A:94:LEU:HB3 | 4 | 0.55 |
| (2,1745) | 1:A:94:LEU:HB2 | 1:A:94:LEU:HB3 | 5 | 0.55 |
| (2,1745) | 1:A:94:LEU:HB2 | 1:A:94:LEU:HB3 | 6 | 0.55 |
| (2,1745) | 1:A:94:LEU:HB2 | 1:A:94:LEU:HB3 | 7 | 0.55 |
| (2,1745) | 1:A:94:LEU:HB2 | 1:A:94:LEU:HB3 | 8 | 0.55 |
| (2,1745) | 1:A:94:LEU:HB2 | 1:A:94:LEU:HB3 | 9 | 0.55 |
| (2,1745) | 1:A:94:LEU:HB2 | 1:A:94:LEU:HB3 | 10 | 0.55 |
| (2,1745) | 1:A:94:LEU:HB2 | 1:A:94:LEU:HB3 | 11 | 0.55 |
| (2,1745) | 1:A:94:LEU:HB2 | 1:A:94:LEU:HB3 | 12 | 0.55 |
| (2,1745) | 1:A:94:LEU:HB2 | 1:A:94:LEU:HB3 | 13 | 0.55 |
| (2,1745) | 1:A:94:LEU:HB2 | 1:A:94:LEU:HB3 | 16 | 0.55 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:91:THR:HA | 3 | 0.55 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:91:THR:HA | 3 | 0.55 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:91:THR:HA | 3 | 0.55 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:86:THR:H | 1 | 0.55 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:86:THR:H | 1 | 0.55 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:86:THR:H | 1 | 0.55 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:86:THR:H | 4 | 0.55 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:86:THR:H | 4 | 0.55 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:86:THR:H | 4 | 0.55 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:86:THR:H | 5 | 0.55 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:86:THR:H | 5 | 0.55 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:86:THR:H | 5 | 0.55 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:86:THR:H | 7 | 0.55 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:86:THR:H | 7 | 0.55 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:86:THR:H | 7 | 0.55 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:86:THR:H | 13 | 0.55 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:86:THR:H | 13 | 0.55 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:86:THR:H | 13 | 0.55 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:86:THR:H | 16 | 0.55 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:86:THR:H | 16 | 0.55 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:86:THR:H | 16 | 0.55 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB1 | 15 | 0.55 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB2 | 15 | 0.55 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB3 | 15 | 0.55 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 15 | 0.55 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 15 | 0.55 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 15 | 0.55 |
| (2,1573) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:83:ASP:HB2 | 13 | 0.55 |
| (2,1573) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:83:ASP:HB2 | 15 | 0.55 |
| (2,1538) | 1:A:98:LEU:HB3 | 1:A:99:THR:H | 15 | 0.55 |
| (2,153) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:70:HIS:HB2 | 12 | 0.55 |
| (2,1525) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:16:LEU:H | 1 | 0.55 |
| (2,1525) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:16:LEU:H | 13 | 0.55 |
| (2,1525) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:16:LEU:H | 14 | 0.55 |
| (2,1521) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:21:GLN:HG2 | 7 | 0.55 |
| (2,1521) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:21:GLN:HG2 | 14 | 0.55 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:68:LEU:HB2 | 1 | 0.55 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:68:LEU:HB2 | 1 | 0.55 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:68:LEU:HB2 | 1 | 0.55 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:68:LEU:HB2 | 7 | 0.55 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:68:LEU:HB2 | 7 | 0.55 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:68:LEU:HB2 | 7 | 0.55 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG21 | 6 | 0.55 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG22 | 6 | 0.55 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG23 | 6 | 0.55 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HG | 15 | 0.55 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HG | 15 | 0.55 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HG | 15 | 0.55 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB1 | 1 | 0.55 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB2 | 1 | 0.55 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB3 | 1 | 0.55 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB1 | 3 | 0.55 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB2 | 3 | 0.55 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB3 | 3 | 0.55 |
| (2,1374) | 1:A:97:ARG:HD2 | 1:A:97:ARG:HB3 | 15 | 0.55 |
| (2,1365) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:94:LEU:H | 3 | 0.55 |
| (2,1365) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:94:LEU:H | 13 | 0.55 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:7:THR:H | 4 | 0.55 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:7:THR:H | 4 | 0.55 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:7:THR:H | 4 | 0.55 |
| (2,1317) | 1:A:68:LEU:HB3 | 1:A:68:LEU:HB2 | 1 | 0.55 |
| (2,1317) | 1:A:68:LEU:HB3 | 1:A:68:LEU:HB2 | 2 | 0.55 |
| (2,1317) | 1:A:68:LEU:HB3 | 1:A:68:LEU:HB2 | 4 | 0.55 |
| (2,1317) | 1:A:68:LEU:HB3 | 1:A:68:LEU:HB2 | 5 | 0.55 |
| (2,1317) | 1:A:68:LEU:HB3 | 1:A:68:LEU:HB2 | 6 | 0.55 |
| (2,1317) | 1:A:68:LEU:HB3 | 1:A:68:LEU:HB2 | 7 | 0.55 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1317) | 1:A:68:LEU:HB3 | 1:A:68:LEU:HB2 | 8 | 0.55 |
| (2,1317) | 1:A:68:LEU:HB3 | 1:A:68:LEU:HB2 | 9 | 0.55 |
| (2,1317) | 1:A:68:LEU:HB3 | 1:A:68:LEU:HB2 | 10 | 0.55 |
| (2,1317) | 1:A:68:LEU:HB3 | 1:A:68:LEU:HB2 | 11 | 0.55 |
| (2,1317) | 1:A:68:LEU:HB3 | 1:A:68:LEU:HB2 | 12 | 0.55 |
| (2,1317) | 1:A:68:LEU:HB3 | 1:A:68:LEU:HB2 | 13 | 0.55 |
| (2,1317) | 1:A:68:LEU:HB3 | 1:A:68:LEU:HB2 | 14 | 0.55 |
| (2,1317) | 1:A:68:LEU:HB3 | 1:A:68:LEU:HB2 | 15 | 0.55 |
| (2,1317) | 1:A:68:LEU:HB3 | 1:A:68:LEU:HB2 | 16 | 0.55 |
| (2,1296) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:63:GLU:HA | 4 | 0.55 |
| (2,1296) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:63:GLU:HA | 15 | 0.55 |
| (2,1296) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:63:GLU:HA | 16 | 0.55 |
| (2,1212) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:ASN:HD21 | 16 | 0.55 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:45:ILE:HG13 | 5 | 0.55 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:45:ILE:HG13 | 5 | 0.55 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:45:ILE:HG13 | 5 | 0.55 |
| (2,1024) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HB2 | 12 | 0.55 |
| (2,1024) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HB2 | 12 | 0.55 |
| (2,1024) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HB2 | 15 | 0.55 |
| (2,1024) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HB2 | 15 | 0.55 |
| (2,1024) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HB2 | 16 | 0.55 |
| (2,1024) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HB2 | 16 | 0.55 |
| (2,1011) | 1:A:75:ASP:HA | 1:A:74:LEU:HG | 14 | 0.55 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 4 | 0.55 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 4 | 0.55 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 4 | 0.55 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 13 | 0.55 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 13 | 0.55 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 13 | 0.55 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 14 | 0.55 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 14 | 0.55 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 14 | 0.55 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 15 | 0.55 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 15 | 0.55 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 15 | 0.55 |
| (1,561) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:21:GLN:HB2 | 12 | 0.55 |
| (1,558) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:23:GLN:HB3 | 2 | 0.55 |
| (1,558) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:23:GLN:HB3 | 5 | 0.55 |
| (1,558) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:23:GLN:HB3 | 7 | 0.55 |
| (1,558) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:23:GLN:HB3 | 9 | 0.55 |
| (1,558) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:23:GLN:HB3 | 12 | 0.55 |
| (1,558) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:23:GLN:HB3 | 13 | 0.55 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,558) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:23:GLN:HB3 | 14 | 0.55 |
| (1,557) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:23:GLN:HG3 | 7 | 0.55 |
| (1,526) | 1:A:20:GLN:H | 1:A:20:GLN:HG3 | 2 | 0.55 |
| (1,408) | 1:A:4:SER:H | 1:A:3:ALA:HA | 10 | 0.55 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG21 | 5 | 0.55 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG22 | 5 | 0.55 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG23 | 5 | 0.55 |
| (1,389) | 1:A:65:ARG:HE | 1:A:65:ARG:HG2 | 15 | 0.55 |
| (1,349) | 1:A:17:SER:H | 1:A:20:GLN:HB2 | 2 | 0.55 |
| (1,349) | 1:A:17:SER:H | 1:A:20:GLN:HB2 | 4 | 0.55 |
| (1,279) | 1:A:14:ASN:HD21 | 1:A:14:ASN:HB2 | 5 | 0.55 |
| (1,274) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:80:LEU:H | 13 | 0.55 |
| (1,274) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:80:LEU:H | 14 | 0.55 |
| (1,234) | 1:A:102:HIS:H | 1:A:101:SER:HB2 | 2 | 0.55 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD11 | 2 | 0.55 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD12 | 2 | 0.55 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD13 | 2 | 0.55 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD11 | 15 | 0.55 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD12 | 15 | 0.55 |
| (1,230) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HD13 | 15 | 0.55 |
| (1,17) | 1:A:100:GLN:H | 1:A:99:THR:H | 2 | 0.55 |
| (1,158) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:4:SER:HA | 4 | 0.55 |
| (1,143) | 1:A:49:THR:H | 1:A:50:ALA:H | 12 | 0.55 |
| (2,914) | 1:A:43:GLU:HG2 | 1:A:43:GLU:H | 13 | 0.54 |
| (2,888) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:41:THR:HA | 9 | 0.54 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD11 | 1:A:65:ARG:H | 12 | 0.54 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD12 | 1:A:65:ARG:H | 12 | 0.54 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD13 | 1:A:65:ARG:H | 12 | 0.54 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:71:ASN:HB3 | 12 | 0.54 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:71:ASN:HB3 | 12 | 0.54 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:71:ASN:HB3 | 12 | 0.54 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB1 | 3 | 0.54 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB2 | 3 | 0.54 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB3 | 3 | 0.54 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB1 | 11 | 0.54 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB2 | 11 | 0.54 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB3 | 11 | 0.54 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD11 | 5 | 0.54 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD12 | 5 | 0.54 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD13 | 5 | 0.54 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD11 | 5 | 0.54 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD12 | 5 | 0.54 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD13 | 5 | 0.54 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD11 | 5 | 0.54 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD12 | 5 | 0.54 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD13 | 5 | 0.54 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD11 | 14 | 0.54 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD12 | 14 | 0.54 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD13 | 14 | 0.54 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD11 | 14 | 0.54 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD12 | 14 | 0.54 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD13 | 14 | 0.54 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD11 | 14 | 0.54 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD12 | 14 | 0.54 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD13 | 14 | 0.54 |
| (2,513) | 1:A:23:GLN:HG3 | 1:A:23:GLN:H | 3 | 0.54 |
| (2,451) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:20:GLN:H | 3 | 0.54 |
| (2,451) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:20:GLN:H | 5 | 0.54 |
| (2,451) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:20:GLN:H | 6 | 0.54 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG21 | 6 | 0.54 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG22 | 6 | 0.54 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG23 | 6 | 0.54 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG21 | 6 | 0.54 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG22 | 6 | 0.54 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG23 | 6 | 0.54 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG21 | 16 | 0.54 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG22 | 16 | 0.54 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG23 | 16 | 0.54 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG21 | 16 | 0.54 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG22 | 16 | 0.54 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG23 | 16 | 0.54 |
| (2,417) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:H | 13 | 0.54 |
| (2,417) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:H | 16 | 0.54 |
| (2,394) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:19:GLN:HA | 11 | 0.54 |
| (2,394) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:19:GLN:HA | 13 | 0.54 |
| (2,365) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:17:SER:H | 5 | 0.54 |
| (2,313) | 1:A:85:PRO:HD2 | 1:A:84:HIS:HA | 1 | 0.54 |
| (2,299) | 1:A:13:LEU:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 3 | 0.54 |
| (2,276) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:9:LEU:HD11 | 2 | 0.54 |
| (2,276) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:9:LEU:HD12 | 2 | 0.54 |
| (2,276) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:9:LEU:HD13 | 2 | 0.54 |
| (2,1866) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:65:ARG:HD2 | 1 | 0.54 |
| (2,1866) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:65:ARG:HD2 | 2 | 0.54 |
| (2,1866) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:65:ARG:HD2 | 3 | 0.54 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1866) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:65:ARG:HD2 | 4 | 0.54 |
| (2,1866) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:65:ARG:HD2 | 5 | 0.54 |
| (2,1866) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:65:ARG:HD2 | 6 | 0.54 |
| (2,1866) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:65:ARG:HD2 | 7 | 0.54 |
| (2,1866) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:65:ARG:HD2 | 8 | 0.54 |
| (2,1866) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:65:ARG:HD2 | 9 | 0.54 |
| (2,1866) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:65:ARG:HD2 | 10 | 0.54 |
| (2,1866) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:65:ARG:HD2 | 12 | 0.54 |
| (2,1866) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:65:ARG:HD2 | 13 | 0.54 |
| (2,1866) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:65:ARG:HD2 | 14 | 0.54 |
| (2,1866) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:65:ARG:HD2 | 16 | 0.54 |
| (2,1863) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:65:ARG:HE | 14 | 0.54 |
| (2,1858) | 1:A:25:LEU:HG | 1:A:21:GLN:HA | 13 | 0.54 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:99:THR:H | 11 | 0.54 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:99:THR:H | 11 | 0.54 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:99:THR:H | 11 | 0.54 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG21 | 8 | 0.54 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG22 | 8 | 0.54 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG23 | 8 | 0.54 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG21 | 13 | 0.54 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG22 | 13 | 0.54 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG23 | 13 | 0.54 |
| (2,1751) | 1:A:95:HIS:HB3 | 1:A:95:HIS:HB2 | 1 | 0.54 |
| (2,1751) | 1:A:95:HIS:HB3 | 1:A:95:HIS:HB2 | 2 | 0.54 |
| (2,1751) | 1:A:95:HIS:HB3 | 1:A:95:HIS:HB2 | 4 | 0.54 |
| (2,1751) | 1:A:95:HIS:HB3 | 1:A:95:HIS:HB2 | 5 | 0.54 |
| (2,1751) | 1:A:95:HIS:HB3 | 1:A:95:HIS:HB2 | 6 | 0.54 |
| (2,1751) | 1:A:95:HIS:HB3 | 1:A:95:HIS:HB2 | 7 | 0.54 |
| (2,1751) | 1:A:95:HIS:HB3 | 1:A:95:HIS:HB2 | 9 | 0.54 |
| (2,1751) | 1:A:95:HIS:HB3 | 1:A:95:HIS:HB2 | 10 | 0.54 |
| (2,1751) | 1:A:95:HIS:HB3 | 1:A:95:HIS:HB2 | 12 | 0.54 |
| (2,1751) | 1:A:95:HIS:HB3 | 1:A:95:HIS:HB2 | 13 | 0.54 |
| (2,1751) | 1:A:95:HIS:HB3 | 1:A:95:HIS:HB2 | 14 | 0.54 |
| (2,1751) | 1:A:95:HIS:HB3 | 1:A:95:HIS:HB2 | 15 | 0.54 |
| (2,1751) | 1:A:95:HIS:HB3 | 1:A:95:HIS:HB2 | 16 | 0.54 |
| (2,1745) | 1:A:94:LEU:HB2 | 1:A:94:LEU:HB3 | 2 | 0.54 |
| (2,1745) | 1:A:94:LEU:HB2 | 1:A:94:LEU:HB3 | 14 | 0.54 |
| (2,1745) | 1:A:94:LEU:HB2 | 1:A:94:LEU:HB3 | 15 | 0.54 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:86:THR:H | 3 | 0.54 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:86:THR:H | 3 | 0.54 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:86:THR:H | 3 | 0.54 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:86:THR:H | 6 | 0.54 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:86:THR:H | 6 | 0.54 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:86:THR:H | 6 | 0.54 |
| (2,1641) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:47:PRO:HB3 | 16 | 0.54 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB1 | 1 | 0.54 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB2 | 1 | 0.54 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB3 | 1 | 0.54 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB1 | 3 | 0.54 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB2 | 3 | 0.54 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB3 | 3 | 0.54 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB1 | 4 | 0.54 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB2 | 4 | 0.54 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB3 | 4 | 0.54 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB1 | 7 | 0.54 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB2 | 7 | 0.54 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB3 | 7 | 0.54 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB1 | 15 | 0.54 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB2 | 15 | 0.54 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB3 | 15 | 0.54 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB1 | 16 | 0.54 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB2 | 16 | 0.54 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB3 | 16 | 0.54 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB1 | 7 | 0.54 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB2 | 7 | 0.54 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB3 | 7 | 0.54 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB1 | 16 | 0.54 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB2 | 16 | 0.54 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB3 | 16 | 0.54 |
| (2,1625) | 1:A:87:PRO:HB2 | 1:A:88:HIS:H | 6 | 0.54 |
| (2,1625) | 1:A:87:PRO:HB2 | 1:A:88:HIS:H | 10 | 0.54 |
| (2,1573) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:83:ASP:HB2 | 1 | 0.54 |
| (2,1573) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:83:ASP:HB2 | 2 | 0.54 |
| (2,1573) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:83:ASP:HB2 | 3 | 0.54 |
| (2,1573) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:83:ASP:HB2 | 4 | 0.54 |
| (2,1573) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:83:ASP:HB2 | 5 | 0.54 |
| (2,1573) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:83:ASP:HB2 | 6 | 0.54 |
| (2,1573) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:83:ASP:HB2 | 7 | 0.54 |
| (2,1573) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:83:ASP:HB2 | 8 | 0.54 |
| (2,1573) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:83:ASP:HB2 | 9 | 0.54 |
| (2,1573) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:83:ASP:HB2 | 10 | 0.54 |
| (2,1573) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:83:ASP:HB2 | 11 | 0.54 |
| (2,1573) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:83:ASP:HB2 | 12 | 0.54 |
| (2,1573) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:83:ASP:HB2 | 14 | 0.54 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1573) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:83:ASP:HB2 | 16 | 0.54 |
| (2,1529) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:21:GLN:H | 9 | 0.54 |
| (2,1529) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:21:GLN:H | 11 | 0.54 |
| (2,1519) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:21:GLN:HG3 | 9 | 0.54 |
| (2,1519) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:21:GLN:HG3 | 15 | 0.54 |
| (2,1505) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:71:ASN:HB2 | 13 | 0.54 |
| (2,1505) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:71:ASN:HB2 | 13 | 0.54 |
| (2,1505) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:71:ASN:HB2 | 13 | 0.54 |
| (2,1480) | 1:A:78:PRO:HA | 1:A:79:THR:H | 12 | 0.54 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HG | 8 | 0.54 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HG | 8 | 0.54 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HG | 8 | 0.54 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HG | 13 | 0.54 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HG | 13 | 0.54 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HG | 13 | 0.54 |
| (2,1392) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:81:ILE:H | 11 | 0.54 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB1 | 13 | 0.54 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB2 | 13 | 0.54 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB3 | 13 | 0.54 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB1 | 14 | 0.54 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB2 | 14 | 0.54 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB3 | 14 | 0.54 |
| (2,1374) | 1:A:97:ARG:HD2 | 1:A:97:ARG:HB3 | 11 | 0.54 |
| (2,1365) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:94:LEU:H | 2 | 0.54 |
| (2,1365) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:94:LEU:H | 5 | 0.54 |
| (2,1365) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:94:LEU:H | 12 | 0.54 |
| (2,1365) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:94:LEU:H | 15 | 0.54 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:7:THR:H | 2 | 0.54 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:7:THR:H | 2 | 0.54 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:7:THR:H | 2 | 0.54 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD11 | 2 | 0.54 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD12 | 2 | 0.54 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD13 | 2 | 0.54 |
| (2,1304) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:H | 9 | 0.54 |
| (2,1296) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:63:GLU:HA | 3 | 0.54 |
| (2,1129) | 1:A:57:ASP:HB3 | 1:A:57:ASP:HB2 | 1 | 0.54 |
| (2,1129) | 1:A:57:ASP:HB3 | 1:A:57:ASP:HB2 | 2 | 0.54 |
| (2,1129) | 1:A:57:ASP:HB3 | 1:A:57:ASP:HB2 | 3 | 0.54 |
| (2,1129) | 1:A:57:ASP:HB3 | 1:A:57:ASP:HB2 | 4 | 0.54 |
| (2,1129) | 1:A:57:ASP:HB3 | 1:A:57:ASP:HB2 | 5 | 0.54 |
| (2,1129) | 1:A:57:ASP:HB3 | 1:A:57:ASP:HB2 | 6 | 0.54 |
| (2,1129) | 1:A:57:ASP:HB3 | 1:A:57:ASP:HB2 | 7 | 0.54 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1129) | 1:A:57:ASP:HB3 | 1:A:57:ASP:HB2 | 8 | 0.54 |
| (2,1129) | 1:A:57:ASP:HB3 | 1:A:57:ASP:HB2 | 9 | 0.54 |
| (2,1129) | 1:A:57:ASP:HB3 | 1:A:57:ASP:HB2 | 10 | 0.54 |
| (2,1129) | 1:A:57:ASP:HB3 | 1:A:57:ASP:HB2 | 11 | 0.54 |
| (2,1129) | 1:A:57:ASP:HB3 | 1:A:57:ASP:HB2 | 12 | 0.54 |
| (2,1129) | 1:A:57:ASP:HB3 | 1:A:57:ASP:HB2 | 13 | 0.54 |
| (2,1129) | 1:A:57:ASP:HB3 | 1:A:57:ASP:HB2 | 14 | 0.54 |
| (2,1129) | 1:A:57:ASP:HB3 | 1:A:57:ASP:HB2 | 15 | 0.54 |
| (2,1129) | 1:A:57:ASP:HB3 | 1:A:57:ASP:HB2 | 16 | 0.54 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:45:ILE:HG13 | 12 | 0.54 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:45:ILE:HG13 | 12 | 0.54 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:45:ILE:HG13 | 12 | 0.54 |
| (1,602) | 1:A:57:ASP:H | 1:A:57:ASP:HB3 | 6 | 0.54 |
| (1,558) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:23:GLN:HB3 | 3 | 0.54 |
| (1,558) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:23:GLN:HB3 | 4 | 0.54 |
| (1,557) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:23:GLN:HG3 | 3 | 0.54 |
| (1,526) | 1:A:20:GLN:H | 1:A:20:GLN:HG3 | 1 | 0.54 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG21 | 8 | 0.54 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG22 | 8 | 0.54 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG23 | 8 | 0.54 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG21 | 9 | 0.54 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG22 | 9 | 0.54 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG23 | 9 | 0.54 |
| (1,349) | 1:A:17:SER:H | 1:A:20:GLN:HB2 | 6 | 0.54 |
| (1,349) | 1:A:17:SER:H | 1:A:20:GLN:HB2 | 10 | 0.54 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB1 | 2 | 0.54 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB2 | 2 | 0.54 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB3 | 2 | 0.54 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB1 | 4 | 0.54 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB2 | 4 | 0.54 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB3 | 4 | 0.54 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB1 | 5 | 0.54 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB2 | 5 | 0.54 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB3 | 5 | 0.54 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB1 | 9 | 0.54 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB2 | 9 | 0.54 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB3 | 9 | 0.54 |
| (1,274) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:80:LEU:H | 1 | 0.54 |
| (1,274) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:80:LEU:H | 7 | 0.54 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG21 | 11 | 0.54 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG22 | 11 | 0.54 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG23 | 11 | 0.54 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,143) | 1:A:49:THR:H | 1:A:50:ALA:H | 6 | 0.54 |
| (1,143) | 1:A:49:THR:H | 1:A:50:ALA:H | 16 | 0.54 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD21 | 2 | 0.54 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD22 | 2 | 0.54 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD23 | 2 | 0.54 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB1 | 3 | 0.53 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB2 | 3 | 0.53 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB3 | 3 | 0.53 |
| (2,923) | 1:A:101:SER:HB2 | 1:A:102:HIS:H | 12 | 0.53 |
| (2,911) | 1:A:43:GLU:HB2 | 1:A:43:GLU:H | 5 | 0.53 |
| (2,888) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:41:THR:HA | 8 | 0.53 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:63:GLU:HB2 | 3 | 0.53 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:63:GLU:HB2 | 3 | 0.53 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:63:GLU:HB2 | 3 | 0.53 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:63:GLU:HB2 | 11 | 0.53 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:63:GLU:HB2 | 11 | 0.53 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:63:GLU:HB2 | 11 | 0.53 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG21 | 15 | 0.53 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG22 | 15 | 0.53 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG23 | 15 | 0.53 |
| (2,747) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:36:VAL:H | 3 | 0.53 |
| (2,747) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:36:VAL:H | 16 | 0.53 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HA | 12 | 0.53 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HA | 12 | 0.53 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HA | 12 | 0.53 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD11 | 1:A:65:ARG:H | 3 | 0.53 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD12 | 1:A:65:ARG:H | 3 | 0.53 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD13 | 1:A:65:ARG:H | 3 | 0.53 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD11 | 1:A:65:ARG:H | 11 | 0.53 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD12 | 1:A:65:ARG:H | 11 | 0.53 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD13 | 1:A:65:ARG:H | 11 | 0.53 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HD1 | 1 | 0.53 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HD2 | 1 | 0.53 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HD1 | 1 | 0.53 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HD2 | 1 | 0.53 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HD1 | 1 | 0.53 |
| (2,643) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HD2 | 1 | 0.53 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD11 | 8 | 0.53 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD12 | 8 | 0.53 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD13 | 8 | 0.53 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD11 | 8 | 0.53 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD12 | 8 | 0.53 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD13 | 8 | 0.53 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD11 | 8 | 0.53 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD12 | 8 | 0.53 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD13 | 8 | 0.53 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD11 | 10 | 0.53 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD12 | 10 | 0.53 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD13 | 10 | 0.53 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD11 | 10 | 0.53 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD12 | 10 | 0.53 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD13 | 10 | 0.53 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD11 | 10 | 0.53 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD12 | 10 | 0.53 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD13 | 10 | 0.53 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB1 | 5 | 0.53 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB2 | 5 | 0.53 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB3 | 5 | 0.53 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB1 | 6 | 0.53 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB2 | 6 | 0.53 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB3 | 6 | 0.53 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB1 | 16 | 0.53 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB2 | 16 | 0.53 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB3 | 16 | 0.53 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG21 | 1:A:25:LEU:HB2 | 14 | 0.53 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG22 | 1:A:25:LEU:HB2 | 14 | 0.53 |
| (2,537) | 1:A:24:THR:HG23 | 1:A:25:LEU:HB2 | 14 | 0.53 |
| (2,513) | 1:A:23:GLN:HG3 | 1:A:23:GLN:H | 8 | 0.53 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG21 | 7 | 0.53 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG22 | 7 | 0.53 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG23 | 7 | 0.53 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 7 | 0.53 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 7 | 0.53 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 7 | 0.53 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG21 | 16 | 0.53 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG22 | 16 | 0.53 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:81:ILE:HG23 | 16 | 0.53 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 16 | 0.53 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 16 | 0.53 |
| (2,48) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 16 | 0.53 |
| (2,451) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:20:GLN:H | 8 | 0.53 |
| (2,451) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:20:GLN:H | 9 | 0.53 |
| (2,451) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:20:GLN:H | 13 | 0.53 |
| (2,449) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:H | 6 | 0.53 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 8 | 0.53 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 8 | 0.53 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 8 | 0.53 |
| (2,427) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:HG3 | 2 | 0.53 |
| (2,427) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:HG3 | 5 | 0.53 |
| (2,427) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:HG3 | 8 | 0.53 |
| (2,423) | 1:A:18:PRO:HA | 1:A:21:GLN:HB2 | 4 | 0.53 |
| (2,417) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:H | 4 | 0.53 |
| (2,417) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:H | 12 | 0.53 |
| (2,394) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:19:GLN:HA | 2 | 0.53 |
| (2,394) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:19:GLN:HA | 12 | 0.53 |
| (2,365) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:17:SER:H | 4 | 0.53 |
| (2,355) | 1:A:16:LEU:HG | 1:A:20:GLN:HG3 | 10 | 0.53 |
| (2,299) | 1:A:13:LEU:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 9 | 0.53 |
| (2,1920) | 1:A:76:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 11 | 0.53 |
| (2,1866) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:65:ARG:HD2 | 15 | 0.53 |
| (2,1854) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:74:LEU:HB2 | 11 | 0.53 |
| (2,1768) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:96:THR:HB | 2 | 0.53 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:91:THR:HA | 13 | 0.53 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:91:THR:HA | 13 | 0.53 |
| (2,1684) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:91:THR:HA | 13 | 0.53 |
| (2,1675) | 1:A:90:LEU:HB2 | 1:A:90:LEU:H | 9 | 0.53 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:86:THR:H | 12 | 0.53 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:86:THR:H | 12 | 0.53 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:86:THR:H | 12 | 0.53 |
| (2,1641) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:47:PRO:HB3 | 5 | 0.53 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB1 | 10 | 0.53 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB2 | 10 | 0.53 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB3 | 10 | 0.53 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB1 | 11 | 0.53 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB2 | 11 | 0.53 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB3 | 11 | 0.53 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB1 | 13 | 0.53 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB2 | 13 | 0.53 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB3 | 13 | 0.53 |
| (2,153) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:70:HIS:HB2 | 10 | 0.53 |
| (2,153) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:70:HIS:HB2 | 14 | 0.53 |
| (2,1525) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:16:LEU:H | 3 | 0.53 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:68:LEU:HB2 | 8 | 0.53 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:68:LEU:HB2 | 8 | 0.53 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:68:LEU:HB2 | 8 | 0.53 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:68:LEU:HB2 | 12 | 0.53 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:68:LEU:HB2 | 12 | 0.53 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:68:LEU:HB2 | 12 | 0.53 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:68:LEU:HB2 | 14 | 0.53 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:68:LEU:HB2 | 14 | 0.53 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:68:LEU:HB2 | 14 | 0.53 |
| (2,1480) | 1:A:78:PRO:HA | 1:A:79:THR:H | 4 | 0.53 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 14 | 0.53 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 14 | 0.53 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 14 | 0.53 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 14 | 0.53 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 14 | 0.53 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 14 | 0.53 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 14 | 0.53 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 14 | 0.53 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 14 | 0.53 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HG | 9 | 0.53 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HG | 9 | 0.53 |
| (2,142) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HG | 9 | 0.53 |
| (2,1378) | 1:A:97:ARG:HB3 | 1:A:74:LEU:HD21 | 1 | 0.53 |
| (2,1378) | 1:A:97:ARG:HB3 | 1:A:74:LEU:HD22 | 1 | 0.53 |
| (2,1378) | 1:A:97:ARG:HB3 | 1:A:74:LEU:HD23 | 1 | 0.53 |
| (2,1378) | 1:A:97:ARG:HB3 | 1:A:74:LEU:HD21 | 7 | 0.53 |
| (2,1378) | 1:A:97:ARG:HB3 | 1:A:74:LEU:HD22 | 7 | 0.53 |
| (2,1378) | 1:A:97:ARG:HB3 | 1:A:74:LEU:HD23 | 7 | 0.53 |
| (2,1374) | 1:A:97:ARG:HD2 | 1:A:97:ARG:HB3 | 10 | 0.53 |
| (2,1365) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:94:LEU:H | 4 | 0.53 |
| (2,1365) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:94:LEU:H | 6 | 0.53 |
| (2,1365) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:94:LEU:H | 8 | 0.53 |
| (2,1332) | 1:A:94:LEU:HG | 1:A:94:LEU:H | 8 | 0.53 |
| (2,1332) | 1:A:94:LEU:HG | 1:A:94:LEU:H | 10 | 0.53 |
| (2,1239) | 1:A:64:LEU:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 7 | 0.53 |
| (2,1239) | 1:A:64:LEU:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 10 | 0.53 |
| (2,1239) | 1:A:64:LEU:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 12 | 0.53 |
| (2,117) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:4:SER:HA | 3 | 0.53 |
| (2,117) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:4:SER:HA | 7 | 0.53 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:51:PHE:HB3 | 11 | 0.53 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:51:PHE:HB3 | 11 | 0.53 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:51:PHE:HB3 | 11 | 0.53 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:51:PHE:HB3 | 14 | 0.53 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:51:PHE:HB3 | 14 | 0.53 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:51:PHE:HB3 | 14 | 0.53 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:54:LEU:HA | 6 | 0.53 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:54:LEU:HA | 6 | 0.53 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:54:LEU:HA | 6 | 0.53 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:54:LEU:HA | 8 | 0.53 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:54:LEU:HA | 8 | 0.53 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:54:LEU:HA | 8 | 0.53 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:54:LEU:HA | 13 | 0.53 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:54:LEU:HA | 13 | 0.53 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:54:LEU:HA | 13 | 0.53 |
| (2,1011) | 1:A:75:ASP:HA | 1:A:74:LEU:HG | 2 | 0.53 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 8 | 0.53 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 8 | 0.53 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 8 | 0.53 |
| (1,584) | 1:A:96:THR:H | 1:A:92:GLN:HB2 | 12 | 0.53 |
| (1,561) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:21:GLN:HB2 | 14 | 0.53 |
| (1,557) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:23:GLN:HG3 | 8 | 0.53 |
| (1,527) | 1:A:93:HIS:H | 1:A:92:GLN:HB3 | 13 | 0.53 |
| (1,526) | 1:A:20:GLN:H | 1:A:20:GLN:HG3 | 6 | 0.53 |
| (1,501) | 1:A:100:GLN:H | 1:A:100:GLN:HG3 | 2 | 0.53 |
| (1,45) | 1:A:79:THR:H | 1:A:79:THR:HA | 9 | 0.53 |
| (1,45) | 1:A:79:THR:H | 1:A:79:THR:HA | 11 | 0.53 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG21 | 14 | 0.53 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG22 | 14 | 0.53 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG23 | 14 | 0.53 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB1 | 1 | 0.53 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB2 | 1 | 0.53 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB3 | 1 | 0.53 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB1 | 6 | 0.53 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB2 | 6 | 0.53 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB3 | 6 | 0.53 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB1 | 11 | 0.53 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB2 | 11 | 0.53 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB3 | 11 | 0.53 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB1 | 12 | 0.53 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB2 | 12 | 0.53 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB3 | 12 | 0.53 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB1 | 15 | 0.53 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB2 | 15 | 0.53 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB3 | 15 | 0.53 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB1 | 16 | 0.53 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB2 | 16 | 0.53 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB3 | 16 | 0.53 |
| (1,282) | 1:A:14:ASN:HD21 | 1:A:11:ALA:HA | 12 | 0.53 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 3 | 0.53 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 3 | 0.53 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 3 | 0.53 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 14 | 0.53 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 14 | 0.53 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 14 | 0.53 |
| (1,17) | 1:A:100:GLN:H | 1:A:99:THR:H | 5 | 0.53 |
| (1,143) | 1:A:49:THR:H | 1:A:50:ALA:H | 4 | 0.53 |
| (2,911) | 1:A:43:GLU:HB2 | 1:A:43:GLU:H | 12 | 0.52 |
| (2,911) | 1:A:43:GLU:HB2 | 1:A:43:GLU:H | 16 | 0.52 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:40:HIS:HD2 | 7 | 0.52 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:40:HIS:HD2 | 7 | 0.52 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:40:HIS:HD2 | 7 | 0.52 |
| (2,888) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:41:THR:HA | 11 | 0.52 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:63:GLU:HB2 | 9 | 0.52 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:63:GLU:HB2 | 9 | 0.52 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:63:GLU:HB2 | 9 | 0.52 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HA | 5 | 0.52 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HA | 5 | 0.52 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HA | 5 | 0.52 |
| (2,622) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:25:LEU:HA | 3 | 0.52 |
| (2,622) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:25:LEU:HA | 15 | 0.52 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD11 | 1 | 0.52 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD12 | 1 | 0.52 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD13 | 1 | 0.52 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD11 | 1 | 0.52 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD12 | 1 | 0.52 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD13 | 1 | 0.52 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD11 | 1 | 0.52 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD12 | 1 | 0.52 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD13 | 1 | 0.52 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD21 | 16 | 0.52 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD22 | 16 | 0.52 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG21 | 1:A:28:LEU:HD23 | 16 | 0.52 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD21 | 16 | 0.52 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD22 | 16 | 0.52 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG22 | 1:A:28:LEU:HD23 | 16 | 0.52 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD21 | 16 | 0.52 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD22 | 16 | 0.52 |
| (2,608) | 1:A:67:THR:HG23 | 1:A:28:LEU:HD23 | 16 | 0.52 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB1 | 1 | 0.52 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB2 | 1 | 0.52 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB3 | 1 | 0.52 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB1 | 4 | 0.52 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB2 | 4 | 0.52 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB3 | 4 | 0.52 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB1 | 9 | 0.52 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB2 | 9 | 0.52 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB3 | 9 | 0.52 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD11 | 6 | 0.52 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD12 | 6 | 0.52 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD13 | 6 | 0.52 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD11 | 6 | 0.52 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD12 | 6 | 0.52 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD13 | 6 | 0.52 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD11 | 6 | 0.52 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD12 | 6 | 0.52 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD13 | 6 | 0.52 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:64:LEU:HD11 | 9 | 0.52 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:64:LEU:HD12 | 9 | 0.52 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:64:LEU:HD13 | 9 | 0.52 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:64:LEU:HD11 | 9 | 0.52 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:64:LEU:HD12 | 9 | 0.52 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:64:LEU:HD13 | 9 | 0.52 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:32:ALA:H | 13 | 0.52 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:32:ALA:H | 13 | 0.52 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:32:ALA:H | 13 | 0.52 |
| (2,513) | 1:A:23:GLN:HG3 | 1:A:23:GLN:H | 13 | 0.52 |
| (2,487) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:95:HIS:HB2 | 11 | 0.52 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:20:GLN:HB3 | 8 | 0.52 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:20:GLN:HB3 | 8 | 0.52 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:20:GLN:HB3 | 8 | 0.52 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:20:GLN:HB3 | 13 | 0.52 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:20:GLN:HB3 | 13 | 0.52 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:20:GLN:HB3 | 13 | 0.52 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:20:GLN:HB3 | 15 | 0.52 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:20:GLN:HB3 | 15 | 0.52 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:20:GLN:HB3 | 15 | 0.52 |
| (2,451) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:20:GLN:H | 1 | 0.52 |
| (2,449) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:H | 1 | 0.52 |
| (2,427) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:HG3 | 12 | 0.52 |
| (2,427) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:HG3 | 14 | 0.52 |
| (2,427) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:HG3 | 16 | 0.52 |
| (2,423) | 1:A:18:PRO:HA | 1:A:21:GLN:HB2 | 1 | 0.52 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,423) | 1:A:18:PRO:HA | 1:A:21:GLN:HB2 | 5 | 0.52 |
| (2,417) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:H | 14 | 0.52 |
| (2,299) | 1:A:13:LEU:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 14 | 0.52 |
| (2,240) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD21 | 8 | 0.52 |
| (2,240) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD22 | 8 | 0.52 |
| (2,240) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD23 | 8 | 0.52 |
| (2,240) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD21 | 8 | 0.52 |
| (2,240) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD22 | 8 | 0.52 |
| (2,240) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD23 | 8 | 0.52 |
| (2,240) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD21 | 8 | 0.52 |
| (2,240) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD22 | 8 | 0.52 |
| (2,240) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD23 | 8 | 0.52 |
| (2,1920) | 1:A:76:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 14 | 0.52 |
| (2,179) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:8:ASP:H | 5 | 0.52 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:86:THR:H | 10 | 0.52 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:86:THR:H | 10 | 0.52 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:86:THR:H | 10 | 0.52 |
| (2,1641) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:47:PRO:HB3 | 1 | 0.52 |
| (2,1641) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:47:PRO:HB3 | 12 | 0.52 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB1 | 6 | 0.52 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB2 | 6 | 0.52 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB3 | 6 | 0.52 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB1 | 3 | 0.52 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB2 | 3 | 0.52 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB3 | 3 | 0.52 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB1 | 9 | 0.52 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB2 | 9 | 0.52 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB3 | 9 | 0.52 |
| (2,1625) | 1:A:87:PRO:HB2 | 1:A:88:HIS:H | 7 | 0.52 |
| (2,1531) | 1:A:98:LEU:HB3 | 1:A:98:LEU:HD11 | 9 | 0.52 |
| (2,1531) | 1:A:98:LEU:HB3 | 1:A:98:LEU:HD12 | 9 | 0.52 |
| (2,1531) | 1:A:98:LEU:HB3 | 1:A:98:LEU:HD13 | 9 | 0.52 |
| (2,153) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:70:HIS:HB2 | 2 | 0.52 |
| (2,1525) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:16:LEU:H | 11 | 0.52 |
| (2,1521) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:21:GLN:HG2 | 13 | 0.52 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 4 | 0.52 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 4 | 0.52 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 4 | 0.52 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 4 | 0.52 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 4 | 0.52 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 4 | 0.52 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 4 | 0.52 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 4 | 0.52 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 4 | 0.52 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 16 | 0.52 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 16 | 0.52 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 16 | 0.52 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 16 | 0.52 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 16 | 0.52 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 16 | 0.52 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 16 | 0.52 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 16 | 0.52 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 16 | 0.52 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB1 | 11 | 0.52 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB2 | 11 | 0.52 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB3 | 11 | 0.52 |
| (2,1374) | 1:A:97:ARG:HD2 | 1:A:97:ARG:HB3 | 8 | 0.52 |
| (2,1365) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:94:LEU:H | 7 | 0.52 |
| (2,1365) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:94:LEU:H | 11 | 0.52 |
| (2,1327) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:68:LEU:H | 12 | 0.52 |
| (2,1304) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:H | 1 | 0.52 |
| (2,1296) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:63:GLU:HA | 6 | 0.52 |
| (2,1239) | 1:A:64:LEU:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 1 | 0.52 |
| (2,1239) | 1:A:64:LEU:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 6 | 0.52 |
| (2,1239) | 1:A:64:LEU:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 16 | 0.52 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG11 | 12 | 0.52 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG12 | 12 | 0.52 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG13 | 12 | 0.52 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG21 | 1:A:63:GLU:HB2 | 5 | 0.52 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG22 | 1:A:63:GLU:HB2 | 5 | 0.52 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG23 | 1:A:63:GLU:HB2 | 5 | 0.52 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:51:PHE:HB3 | 6 | 0.52 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:51:PHE:HB3 | 6 | 0.52 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:51:PHE:HB3 | 6 | 0.52 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:51:PHE:HB3 | 8 | 0.52 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:51:PHE:HB3 | 8 | 0.52 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:51:PHE:HB3 | 8 | 0.52 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:51:PHE:HB3 | 13 | 0.52 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:51:PHE:HB3 | 13 | 0.52 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:51:PHE:HB3 | 13 | 0.52 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:54:LEU:HA | 2 | 0.52 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:54:LEU:HA | 2 | 0.52 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:54:LEU:HA | 2 | 0.52 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:54:LEU:HA | 4 | 0.52 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:54:LEU:HA | 4 | 0.52 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:54:LEU:HA | 4 | 0.52 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:54:LEU:HA | 10 | 0.52 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:54:LEU:HA | 10 | 0.52 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:54:LEU:HA | 10 | 0.52 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:54:LEU:HA | 12 | 0.52 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:54:LEU:HA | 12 | 0.52 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:54:LEU:HA | 12 | 0.52 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:54:LEU:HA | 16 | 0.52 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:54:LEU:HA | 16 | 0.52 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:54:LEU:HA | 16 | 0.52 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG21 | 6 | 0.52 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG22 | 6 | 0.52 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG23 | 6 | 0.52 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG21 | 16 | 0.52 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG22 | 16 | 0.52 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG23 | 16 | 0.52 |
| (1,584) | 1:A:96:THR:H | 1:A:92:GLN:HB2 | 16 | 0.52 |
| (1,557) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:23:GLN:HG3 | 13 | 0.52 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG21 | 7 | 0.52 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG22 | 7 | 0.52 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG23 | 7 | 0.52 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB1 | 3 | 0.52 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB2 | 3 | 0.52 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB3 | 3 | 0.52 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB1 | 8 | 0.52 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB2 | 8 | 0.52 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB3 | 8 | 0.52 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB1 | 10 | 0.52 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB2 | 10 | 0.52 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB3 | 10 | 0.52 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB1 | 13 | 0.52 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB2 | 13 | 0.52 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB3 | 13 | 0.52 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB1 | 14 | 0.52 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB2 | 14 | 0.52 |
| (1,337) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:30:ALA:HB3 | 14 | 0.52 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD21 | 5 | 0.52 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD22 | 5 | 0.52 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD23 | 5 | 0.52 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD21 | 8 | 0.52 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD22 | 8 | 0.52 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD23 | 8 | 0.52 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD21 | 14 | 0.52 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD22 | 14 | 0.52 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD23 | 14 | 0.52 |
| (1,304) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HB2 | 6 | 0.52 |
| (1,304) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HB2 | 9 | 0.52 |
| (1,282) | 1:A:14:ASN:HD21 | 1:A:11:ALA:HA | 9 | 0.52 |
| (1,262) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:56:ILE:H | 9 | 0.52 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 1 | 0.52 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 1 | 0.52 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 1 | 0.52 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 2 | 0.52 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 2 | 0.52 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 2 | 0.52 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 10 | 0.52 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 10 | 0.52 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 10 | 0.52 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 12 | 0.52 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 12 | 0.52 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 12 | 0.52 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 15 | 0.52 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 15 | 0.52 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 15 | 0.52 |
| (1,239) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG13 | 4 | 0.52 |
| (1,143) | 1:A:49:THR:H | 1:A:50:ALA:H | 11 | 0.52 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD21 | 6 | 0.52 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD22 | 6 | 0.52 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD23 | 6 | 0.52 |
| (2,984) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HD1 | 16 | 0.51 |
| (2,984) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HD2 | 16 | 0.51 |
| (2,952) | 1:A:47:PRO:HB3 | 1:A:48:ALA:HA | 8 | 0.51 |
| (2,90) | 1:A:4:SER:HA | 1:A:5:ALA:H | 3 | 0.51 |
| (2,838) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:37:LEU:HB2 | 3 | 0.51 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:63:GLU:HB2 | 1 | 0.51 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:63:GLU:HB2 | 1 | 0.51 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:63:GLU:HB2 | 1 | 0.51 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:63:GLU:HB2 | 7 | 0.51 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:63:GLU:HB2 | 7 | 0.51 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:63:GLU:HB2 | 7 | 0.51 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:63:GLU:HB2 | 15 | 0.51 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:63:GLU:HB2 | 15 | 0.51 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:63:GLU:HB2 | 15 | 0.51 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG21 | 13 | 0.51 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG22 | 13 | 0.51 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG23 | 13 | 0.51 |
| (2,747) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:36:VAL:H | 8 | 0.51 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HA | 2 | 0.51 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HA | 2 | 0.51 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HA | 2 | 0.51 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:45:ILE:HB | 3 | 0.51 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:45:ILE:HB | 3 | 0.51 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:45:ILE:HB | 3 | 0.51 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:56:ILE:HG12 | 1 | 0.51 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:56:ILE:HG12 | 1 | 0.51 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:56:ILE:HG12 | 1 | 0.51 |
| (2,622) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:25:LEU:HA | 16 | 0.51 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB1 | 7 | 0.51 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB2 | 7 | 0.51 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB3 | 7 | 0.51 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB1 | 8 | 0.51 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB2 | 8 | 0.51 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB3 | 8 | 0.51 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB1 | 13 | 0.51 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB2 | 13 | 0.51 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB3 | 13 | 0.51 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD11 | 4 | 0.51 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD12 | 4 | 0.51 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD13 | 4 | 0.51 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD11 | 4 | 0.51 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD12 | 4 | 0.51 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD13 | 4 | 0.51 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD11 | 4 | 0.51 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD12 | 4 | 0.51 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD13 | 4 | 0.51 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:32:ALA:H | 11 | 0.51 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:32:ALA:H | 11 | 0.51 |
| (2,557) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:32:ALA:H | 11 | 0.51 |
| (2,513) | 1:A:23:GLN:HG3 | 1:A:23:GLN:H | 2 | 0.51 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:20:GLN:HB3 | 6 | 0.51 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:20:GLN:HB3 | 6 | 0.51 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:20:GLN:HB3 | 6 | 0.51 |
| (2,451) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:20:GLN:H | 10 | 0.51 |
| (2,451) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:20:GLN:H | 12 | 0.51 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG21 | 13 | 0.51 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG22 | 13 | 0.51 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG23 | 13 | 0.51 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG21 | 13 | 0.51 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG22 | 13 | 0.51 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG23 | 13 | 0.51 |
| (2,434) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:21:GLN:HA | 14 | 0.51 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 3 | 0.51 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 3 | 0.51 |
| (2,429) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 3 | 0.51 |
| (2,427) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:HG3 | 15 | 0.51 |
| (2,423) | 1:A:18:PRO:HA | 1:A:21:GLN:HB2 | 2 | 0.51 |
| (2,423) | 1:A:18:PRO:HA | 1:A:21:GLN:HB2 | 7 | 0.51 |
| (2,423) | 1:A:18:PRO:HA | 1:A:21:GLN:HB2 | 12 | 0.51 |
| (2,417) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:H | 15 | 0.51 |
| (2,414) | 1:A:9:LEU:HA | 1:A:8:ASP:HB2 | 11 | 0.51 |
| (2,40) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HD1 | 1 | 0.51 |
| (2,40) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HD2 | 1 | 0.51 |
| (2,394) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:19:GLN:HA | 6 | 0.51 |
| (2,394) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:19:GLN:HA | 8 | 0.51 |
| (2,370) | 1:A:17:SER:HB2 | 1:A:20:GLN:HG3 | 3 | 0.51 |
| (2,299) | 1:A:13:LEU:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 11 | 0.51 |
| (2,273) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:12:ARG:HD3 | 2 | 0.51 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:H | 1 | 0.51 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:H | 1 | 0.51 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:H | 1 | 0.51 |
| (2,1863) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:65:ARG:HE | 6 | 0.51 |
| (2,1858) | 1:A:25:LEU:HG | 1:A:21:GLN:HA | 2 | 0.51 |
| (2,1858) | 1:A:25:LEU:HG | 1:A:21:GLN:HA | 3 | 0.51 |
| (2,1858) | 1:A:25:LEU:HG | 1:A:21:GLN:HA | 16 | 0.51 |
| (2,1793) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:99:THR:HG21 | 6 | 0.51 |
| (2,1793) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:99:THR:HG22 | 6 | 0.51 |
| (2,1793) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:99:THR:HG23 | 6 | 0.51 |
| (2,179) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:8:ASP:H | 9 | 0.51 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG21 | 15 | 0.51 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG22 | 15 | 0.51 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG23 | 15 | 0.51 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HZ | 4 | 0.51 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HZ | 4 | 0.51 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HZ | 4 | 0.51 |
| (2,1641) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:47:PRO:HB3 | 11 | 0.51 |
| (2,1641) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:47:PRO:HB3 | 14 | 0.51 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB1 | 2 | 0.51 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB2 | 2 | 0.51 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB3 | 2 | 0.51 |
| (2,1625) | 1:A:87:PRO:HB2 | 1:A:88:HIS:H | 9 | 0.51 |
| (2,1625) | 1:A:87:PRO:HB2 | 1:A:88:HIS:H | 12 | 0.51 |
| (2,1625) | 1:A:87:PRO:HB2 | 1:A:88:HIS:H | 14 | 0.51 |
| (2,1529) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:21:GLN:H | 3 | 0.51 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:68:LEU:HB2 | 4 | 0.51 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:68:LEU:HB2 | 4 | 0.51 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:68:LEU:HB2 | 4 | 0.51 |
| (2,1493) | 1:A:79:THR:HB | 1:A:82:PHE:HB2 | 7 | 0.51 |
| (2,1429) | 1:A:102:HIS:HD2 | 1:A:101:SER:HB2 | 8 | 0.51 |
| (2,1423) | 1:A:93:HIS:HD2 | 1:A:93:HIS:HB3 | 3 | 0.51 |
| (2,1378) | 1:A:97:ARG:HB3 | 1:A:74:LEU:HD21 | 5 | 0.51 |
| (2,1378) | 1:A:97:ARG:HB3 | 1:A:74:LEU:HD22 | 5 | 0.51 |
| (2,1378) | 1:A:97:ARG:HB3 | 1:A:74:LEU:HD23 | 5 | 0.51 |
| (2,1332) | 1:A:94:LEU:HG | 1:A:94:LEU:H | 11 | 0.51 |
| (2,1304) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:H | 3 | 0.51 |
| (2,1296) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:63:GLU:HA | 1 | 0.51 |
| (2,1296) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:63:GLU:HA | 5 | 0.51 |
| (2,1296) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:63:GLU:HA | 14 | 0.51 |
| (2,1239) | 1:A:64:LEU:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 2 | 0.51 |
| (2,1239) | 1:A:64:LEU:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 4 | 0.51 |
| (2,1239) | 1:A:64:LEU:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 5 | 0.51 |
| (2,1239) | 1:A:64:LEU:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 8 | 0.51 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG21 | 1:A:63:GLU:HB2 | 15 | 0.51 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG22 | 1:A:63:GLU:HB2 | 15 | 0.51 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG23 | 1:A:63:GLU:HB2 | 15 | 0.51 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:51:PHE:HB3 | 2 | 0.51 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:51:PHE:HB3 | 2 | 0.51 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:51:PHE:HB3 | 2 | 0.51 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:51:PHE:HB3 | 7 | 0.51 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:51:PHE:HB3 | 7 | 0.51 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:51:PHE:HB3 | 7 | 0.51 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:51:PHE:HB3 | 10 | 0.51 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:51:PHE:HB3 | 10 | 0.51 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:51:PHE:HB3 | 10 | 0.51 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:51:PHE:HB3 | 12 | 0.51 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:51:PHE:HB3 | 12 | 0.51 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:51:PHE:HB3 | 12 | 0.51 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:51:PHE:HB3 | 15 | 0.51 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:51:PHE:HB3 | 15 | 0.51 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:51:PHE:HB3 | 15 | 0.51 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:45:ILE:HG13 | 14 | 0.51 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:45:ILE:HG13 | 14 | 0.51 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:45:ILE:HG13 | 14 | 0.51 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:54:LEU:HA | 5 | 0.51 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:54:LEU:HA | 5 | 0.51 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:54:LEU:HA | 5 | 0.51 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:54:LEU:HA | 14 | 0.51 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:54:LEU:HA | 14 | 0.51 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:54:LEU:HA | 14 | 0.51 |
| (2,1011) | 1:A:75:ASP:HA | 1:A:74:LEU:HG | 6 | 0.51 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 10 | 0.51 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 10 | 0.51 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 10 | 0.51 |
| (1,584) | 1:A:96:THR:H | 1:A:92:GLN:HB2 | 5 | 0.51 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 7 | 0.51 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 7 | 0.51 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 7 | 0.51 |
| (1,557) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:23:GLN:HG3 | 2 | 0.51 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 5 | 0.51 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 5 | 0.51 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 5 | 0.51 |
| (1,45) | 1:A:79:THR:H | 1:A:79:THR:HA | 2 | 0.51 |
| (1,45) | 1:A:79:THR:H | 1:A:79:THR:HA | 4 | 0.51 |
| (1,45) | 1:A:79:THR:H | 1:A:79:THR:HA | 8 | 0.51 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG21 | 3 | 0.51 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG22 | 3 | 0.51 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG23 | 3 | 0.51 |
| (1,349) | 1:A:17:SER:H | 1:A:20:GLN:HB2 | 13 | 0.51 |
| (1,318) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HG | 5 | 0.51 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD21 | 7 | 0.51 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD22 | 7 | 0.51 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD23 | 7 | 0.51 |
| (1,304) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HB2 | 2 | 0.51 |
| (1,282) | 1:A:14:ASN:HD21 | 1:A:11:ALA:HA | 3 | 0.51 |
| (1,270) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:81:ILE:HG12 | 14 | 0.51 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 6 | 0.51 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 6 | 0.51 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 6 | 0.51 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 8 | 0.51 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 8 | 0.51 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 8 | 0.51 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 13 | 0.51 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 13 | 0.51 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 13 | 0.51 |
| (1,191) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:65:ARG:HB2 | 15 | 0.51 |
| (1,143) | 1:A:49:THR:H | 1:A:50:ALA:H | 7 | 0.51 |
| (2,952) | 1:A:47:PRO:HB3 | 1:A:48:ALA:HA | 15 | 0.5 |
| (2,917) | 1:A:44:SER:HA | 1:A:41:THR:HG21 | 3 | 0.5 |
| (2,917) | 1:A:44:SER:HA | 1:A:41:THR:HG22 | 3 | 0.5 |
| (2,917) | 1:A:44:SER:HA | 1:A:41:THR:HG23 | 3 | 0.5 |
| (2,917) | 1:A:44:SER:HA | 1:A:41:THR:HG21 | 9 | 0.5 |
| (2,917) | 1:A:44:SER:HA | 1:A:41:THR:HG22 | 9 | 0.5 |
| (2,917) | 1:A:44:SER:HA | 1:A:41:THR:HG23 | 9 | 0.5 |
| (2,917) | 1:A:44:SER:HA | 1:A:41:THR:HG21 | 11 | 0.5 |
| (2,917) | 1:A:44:SER:HA | 1:A:41:THR:HG22 | 11 | 0.5 |
| (2,917) | 1:A:44:SER:HA | 1:A:41:THR:HG23 | 11 | 0.5 |
| (2,911) | 1:A:43:GLU:HB2 | 1:A:43:GLU:H | 1 | 0.5 |
| (2,911) | 1:A:43:GLU:HB2 | 1:A:43:GLU:H | 6 | 0.5 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:40:HIS:HD2 | 11 | 0.5 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:40:HIS:HD2 | 11 | 0.5 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:40:HIS:HD2 | 11 | 0.5 |
| (2,888) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:41:THR:HA | 14 | 0.5 |
| (2,838) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:37:LEU:HB2 | 2 | 0.5 |
| (2,838) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:37:LEU:HB2 | 4 | 0.5 |
| (2,838) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:37:LEU:HB2 | 5 | 0.5 |
| (2,838) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:37:LEU:HB2 | 6 | 0.5 |
| (2,838) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:37:LEU:HB2 | 8 | 0.5 |
| (2,838) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:37:LEU:HB2 | 9 | 0.5 |
| (2,838) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:37:LEU:HB2 | 14 | 0.5 |
| (2,838) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:37:LEU:HB2 | 15 | 0.5 |
| (2,838) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:37:LEU:HB2 | 16 | 0.5 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:63:GLU:HB2 | 4 | 0.5 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:63:GLU:HB2 | 4 | 0.5 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:63:GLU:HB2 | 4 | 0.5 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:63:GLU:HB2 | 5 | 0.5 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:63:GLU:HB2 | 5 | 0.5 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:63:GLU:HB2 | 5 | 0.5 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:63:GLU:HB2 | 16 | 0.5 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:63:GLU:HB2 | 16 | 0.5 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:63:GLU:HB2 | 16 | 0.5 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG21 | 5 | 0.5 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG22 | 5 | 0.5 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG23 | 5 | 0.5 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HA | 3 | 0.5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HA | 3 | 0.5 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HA | 3 | 0.5 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HA | 11 | 0.5 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HA | 11 | 0.5 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HA | 11 | 0.5 |
| (2,622) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:25:LEU:HA | 2 | 0.5 |
| (2,622) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:25:LEU:HA | 4 | 0.5 |
| (2,622) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:25:LEU:HA | 13 | 0.5 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB1 | 2 | 0.5 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB2 | 2 | 0.5 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB3 | 2 | 0.5 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB1 | 10 | 0.5 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB2 | 10 | 0.5 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB3 | 10 | 0.5 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB1 | 14 | 0.5 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB2 | 14 | 0.5 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB3 | 14 | 0.5 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB1 | 15 | 0.5 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB2 | 15 | 0.5 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB3 | 15 | 0.5 |
| (2,513) | 1:A:23:GLN:HG3 | 1:A:23:GLN:H | 12 | 0.5 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:20:GLN:HB3 | 5 | 0.5 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:20:GLN:HB3 | 5 | 0.5 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:20:GLN:HB3 | 5 | 0.5 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:20:GLN:HB3 | 14 | 0.5 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:20:GLN:HB3 | 14 | 0.5 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:20:GLN:HB3 | 14 | 0.5 |
| (2,458) | 1:A:20:GLN:HB3 | 1:A:16:LEU:HB3 | 7 | 0.5 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG21 | 3 | 0.5 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG22 | 3 | 0.5 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG23 | 3 | 0.5 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG21 | 3 | 0.5 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG22 | 3 | 0.5 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG23 | 3 | 0.5 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG21 | 5 | 0.5 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG22 | 5 | 0.5 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG23 | 5 | 0.5 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG21 | 5 | 0.5 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG22 | 5 | 0.5 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG23 | 5 | 0.5 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG21 | 8 | 0.5 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG22 | 8 | 0.5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG23 | 8 | 0.5 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG21 | 8 | 0.5 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG22 | 8 | 0.5 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG23 | 8 | 0.5 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG21 | 10 | 0.5 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG22 | 10 | 0.5 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG23 | 10 | 0.5 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG21 | 10 | 0.5 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG22 | 10 | 0.5 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG23 | 10 | 0.5 |
| (2,449) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:H | 10 | 0.5 |
| (2,449) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:H | 12 | 0.5 |
| (2,434) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:21:GLN:HA | 2 | 0.5 |
| (2,434) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:21:GLN:HA | 12 | 0.5 |
| (2,427) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:HG3 | 13 | 0.5 |
| (2,423) | 1:A:18:PRO:HA | 1:A:21:GLN:HB2 | 10 | 0.5 |
| (2,423) | 1:A:18:PRO:HA | 1:A:21:GLN:HB2 | 15 | 0.5 |
| (2,394) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:19:GLN:HA | 3 | 0.5 |
| (2,299) | 1:A:13:LEU:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 5 | 0.5 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HB2 | 14 | 0.5 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HB2 | 14 | 0.5 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HB2 | 14 | 0.5 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HG12 | 7 | 0.5 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HG12 | 7 | 0.5 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HG12 | 7 | 0.5 |
| (2,1869) | 1:A:65:ARG:HD2 | 1:A:65:ARG:HE | 9 | 0.5 |
| (2,1863) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:65:ARG:HE | 2 | 0.5 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG21 | 1 | 0.5 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG22 | 1 | 0.5 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG23 | 1 | 0.5 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG21 | 10 | 0.5 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG22 | 10 | 0.5 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG23 | 10 | 0.5 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HZ | 6 | 0.5 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HZ | 6 | 0.5 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HZ | 6 | 0.5 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HZ | 14 | 0.5 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HZ | 14 | 0.5 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HZ | 14 | 0.5 |
| (2,1675) | 1:A:90:LEU:HB2 | 1:A:90:LEU:H | 8 | 0.5 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB1 | 8 | 0.5 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB2 | 8 | 0.5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB3 | 8 | 0.5 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 1 | 0.5 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 1 | 0.5 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 1 | 0.5 |
| (2,1620) | 1:A:87:PRO:HA | 1:A:90:LEU:HB3 | 9 | 0.5 |
| (2,1539) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:99:THR:H | 10 | 0.5 |
| (2,1538) | 1:A:98:LEU:HB3 | 1:A:99:THR:H | 14 | 0.5 |
| (2,1525) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:16:LEU:H | 12 | 0.5 |
| (2,1521) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:21:GLN:HG2 | 16 | 0.5 |
| (2,1493) | 1:A:79:THR:HB | 1:A:82:PHE:HB2 | 10 | 0.5 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG21 | 8 | 0.5 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG22 | 8 | 0.5 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG23 | 8 | 0.5 |
| (2,1480) | 1:A:78:PRO:HA | 1:A:79:THR:H | 9 | 0.5 |
| (2,1446) | 1:A:95:HIS:HB3 | 1:A:96:THR:H | 14 | 0.5 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 12 | 0.5 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 12 | 0.5 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 12 | 0.5 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 12 | 0.5 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 12 | 0.5 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 12 | 0.5 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 12 | 0.5 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 12 | 0.5 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 12 | 0.5 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 13 | 0.5 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 13 | 0.5 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 13 | 0.5 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 13 | 0.5 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 13 | 0.5 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 13 | 0.5 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 13 | 0.5 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 13 | 0.5 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 13 | 0.5 |
| (2,1423) | 1:A:93:HIS:HD2 | 1:A:93:HIS:HB3 | 2 | 0.5 |
| (2,1423) | 1:A:93:HIS:HD2 | 1:A:93:HIS:HB3 | 5 | 0.5 |
| (2,1423) | 1:A:93:HIS:HD2 | 1:A:93:HIS:HB3 | 13 | 0.5 |
| (2,1423) | 1:A:93:HIS:HD2 | 1:A:93:HIS:HB3 | 16 | 0.5 |
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:39:HIS:HB2 | 6 | 0.5 |
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:39:HIS:HB2 | 6 | 0.5 |
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:39:HIS:HB2 | 6 | 0.5 |
| (2,1392) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:81:ILE:H | 9 | 0.5 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:7:THR:H | 13 | 0.5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:7:THR:H | 13 | 0.5 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:7:THR:H | 13 | 0.5 |
| (2,1332) | 1:A:94:LEU:HG | 1:A:94:LEU:H | 16 | 0.5 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD11 | 10 | 0.5 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD12 | 10 | 0.5 |
| (2,1324) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:81:ILE:HD13 | 10 | 0.5 |
| (2,1239) | 1:A:64:LEU:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 3 | 0.5 |
| (2,1239) | 1:A:64:LEU:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 9 | 0.5 |
| (2,1239) | 1:A:64:LEU:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 13 | 0.5 |
| (2,1239) | 1:A:64:LEU:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 14 | 0.5 |
| (2,1239) | 1:A:64:LEU:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 15 | 0.5 |
| (2,1212) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:ASN:HD21 | 11 | 0.5 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG21 | 1:A:63:GLU:HB2 | 2 | 0.5 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG22 | 1:A:63:GLU:HB2 | 2 | 0.5 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG23 | 1:A:63:GLU:HB2 | 2 | 0.5 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG21 | 1:A:63:GLU:HB2 | 13 | 0.5 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG22 | 1:A:63:GLU:HB2 | 13 | 0.5 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG23 | 1:A:63:GLU:HB2 | 13 | 0.5 |
| (2,1192) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:65:ARG:HB2 | 8 | 0.5 |
| (2,1173) | 1:A:61:ALA:HB1 | 1:A:58:SER:HA | 1 | 0.5 |
| (2,1173) | 1:A:61:ALA:HB2 | 1:A:58:SER:HA | 1 | 0.5 |
| (2,1173) | 1:A:61:ALA:HB3 | 1:A:58:SER:HA | 1 | 0.5 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:54:LEU:HA | 3 | 0.5 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:54:LEU:HA | 3 | 0.5 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:54:LEU:HA | 3 | 0.5 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:54:LEU:HA | 11 | 0.5 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:54:LEU:HA | 11 | 0.5 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:54:LEU:HA | 11 | 0.5 |
| (2,1011) | 1:A:75:ASP:HA | 1:A:74:LEU:HG | 4 | 0.5 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG21 | 8 | 0.5 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG22 | 8 | 0.5 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG23 | 8 | 0.5 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG21 | 9 | 0.5 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG22 | 9 | 0.5 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG23 | 9 | 0.5 |
| (1,557) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:23:GLN:HG3 | 12 | 0.5 |
| (1,527) | 1:A:93:HIS:H | 1:A:92:GLN:HB3 | 2 | 0.5 |
| (1,45) | 1:A:79:THR:H | 1:A:79:THR:HA | 3 | 0.5 |
| (1,45) | 1:A:79:THR:H | 1:A:79:THR:HA | 5 | 0.5 |
| (1,45) | 1:A:79:THR:H | 1:A:79:THR:HA | 6 | 0.5 |
| (1,45) | 1:A:79:THR:H | 1:A:79:THR:HA | 12 | 0.5 |
| (1,45) | 1:A:79:THR:H | 1:A:79:THR:HA | 13 | 0.5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,45) | 1:A:79:THR:H | 1:A:79:THR:HA | 16 | 0.5 |
| (1,40) | 1:A:16:LEU:H | 1:A:15:GLY:H | 3 | 0.5 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG21 | 10 | 0.5 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG22 | 10 | 0.5 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG23 | 10 | 0.5 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG21 | 12 | 0.5 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG22 | 12 | 0.5 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG23 | 12 | 0.5 |
| (1,318) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HG | 6 | 0.5 |
| (1,318) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HG | 7 | 0.5 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD21 | 6 | 0.5 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD22 | 6 | 0.5 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD23 | 6 | 0.5 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD21 | 9 | 0.5 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD22 | 9 | 0.5 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD23 | 9 | 0.5 |
| (1,304) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HB2 | 12 | 0.5 |
| (1,262) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:56:ILE:H | 11 | 0.5 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 4 | 0.5 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 4 | 0.5 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 4 | 0.5 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 5 | 0.5 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 5 | 0.5 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 5 | 0.5 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 9 | 0.5 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 9 | 0.5 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 9 | 0.5 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 11 | 0.5 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 11 | 0.5 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 11 | 0.5 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 16 | 0.5 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 16 | 0.5 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 16 | 0.5 |
| (1,158) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:4:SER:HA | 11 | 0.5 |
| (1,143) | 1:A:49:THR:H | 1:A:50:ALA:H | 3 | 0.5 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD21 | 9 | 0.5 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD22 | 9 | 0.5 |
| (1,129) | 1:A:69:THR:H | 1:A:94:LEU:HD23 | 9 | 0.5 |
| (1,128) | 1:A:69:THR:H | 1:A:69:THR:HG21 | 16 | 0.5 |
| (1,128) | 1:A:69:THR:H | 1:A:69:THR:HG22 | 16 | 0.5 |
| (1,128) | 1:A:69:THR:H | 1:A:69:THR:HG23 | 16 | 0.5 |
| (2,984) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HD1 | 4 | 0.49 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,984) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HD2 | 4 | 0.49 |
| (2,984) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HD1 | 15 | 0.49 |
| (2,984) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HD2 | 15 | 0.49 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB1 | 4 | 0.49 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB2 | 4 | 0.49 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB3 | 4 | 0.49 |
| (2,952) | 1:A:47:PRO:HB3 | 1:A:48:ALA:HA | 12 | 0.49 |
| (2,952) | 1:A:47:PRO:HB3 | 1:A:48:ALA:HA | 13 | 0.49 |
| (2,911) | 1:A:43:GLU:HB2 | 1:A:43:GLU:H | 7 | 0.49 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:40:HIS:HD2 | 5 | 0.49 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:40:HIS:HD2 | 5 | 0.49 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:40:HIS:HD2 | 5 | 0.49 |
| (2,888) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:41:THR:HA | 15 | 0.49 |
| (2,838) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:37:LEU:HB2 | 1 | 0.49 |
| (2,838) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:37:LEU:HB2 | 11 | 0.49 |
| (2,838) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:37:LEU:HB2 | 12 | 0.49 |
| (2,838) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:37:LEU:HB2 | 13 | 0.49 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:63:GLU:HB2 | 13 | 0.49 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:63:GLU:HB2 | 13 | 0.49 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:63:GLU:HB2 | 13 | 0.49 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:63:GLU:HB2 | 14 | 0.49 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:63:GLU:HB2 | 14 | 0.49 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:63:GLU:HB2 | 14 | 0.49 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG21 | 11 | 0.49 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG22 | 11 | 0.49 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG23 | 11 | 0.49 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HA | 6 | 0.49 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HA | 6 | 0.49 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HA | 6 | 0.49 |
| (2,682) | 1:A:62:LEU:HD11 | 1:A:78:PRO:HB2 | 9 | 0.49 |
| (2,682) | 1:A:62:LEU:HD12 | 1:A:78:PRO:HB2 | 9 | 0.49 |
| (2,682) | 1:A:62:LEU:HD13 | 1:A:78:PRO:HB2 | 9 | 0.49 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:64:LEU:HB3 | 15 | 0.49 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:64:LEU:HB3 | 15 | 0.49 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:64:LEU:HB3 | 15 | 0.49 |
| (2,622) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:25:LEU:HA | 5 | 0.49 |
| (2,622) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:25:LEU:HA | 7 | 0.49 |
| (2,622) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:25:LEU:HA | 8 | 0.49 |
| (2,622) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:25:LEU:HA | 12 | 0.49 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD11 | 4 | 0.49 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD12 | 4 | 0.49 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD13 | 4 | 0.49 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD11 | 4 | 0.49 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD12 | 4 | 0.49 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD13 | 4 | 0.49 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD11 | 4 | 0.49 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD12 | 4 | 0.49 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD13 | 4 | 0.49 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD11 | 13 | 0.49 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD12 | 13 | 0.49 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD13 | 13 | 0.49 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD11 | 13 | 0.49 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD12 | 13 | 0.49 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD13 | 13 | 0.49 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD11 | 13 | 0.49 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD12 | 13 | 0.49 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD13 | 13 | 0.49 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD11 | 15 | 0.49 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD12 | 15 | 0.49 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD13 | 15 | 0.49 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD11 | 15 | 0.49 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD12 | 15 | 0.49 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD13 | 15 | 0.49 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD11 | 15 | 0.49 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD12 | 15 | 0.49 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD13 | 15 | 0.49 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB1 | 12 | 0.49 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB2 | 12 | 0.49 |
| (2,586) | 1:A:29:VAL:HB | 1:A:26:ALA:HB3 | 12 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:28:LEU:HG | 1 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:28:LEU:HG | 1 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:28:LEU:HG | 1 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:28:LEU:HG | 2 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:28:LEU:HG | 2 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:28:LEU:HG | 2 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:28:LEU:HG | 3 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:28:LEU:HG | 3 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:28:LEU:HG | 3 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:28:LEU:HG | 4 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:28:LEU:HG | 4 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:28:LEU:HG | 4 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:28:LEU:HG | 5 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:28:LEU:HG | 5 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:28:LEU:HG | 5 | 0.49 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:28:LEU:HG | 6 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:28:LEU:HG | 6 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:28:LEU:HG | 6 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:28:LEU:HG | 7 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:28:LEU:HG | 7 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:28:LEU:HG | 7 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:28:LEU:HG | 8 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:28:LEU:HG | 8 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:28:LEU:HG | 8 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:28:LEU:HG | 9 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:28:LEU:HG | 9 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:28:LEU:HG | 9 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:28:LEU:HG | 10 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:28:LEU:HG | 10 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:28:LEU:HG | 10 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:28:LEU:HG | 11 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:28:LEU:HG | 11 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:28:LEU:HG | 11 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:28:LEU:HG | 12 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:28:LEU:HG | 12 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:28:LEU:HG | 12 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:28:LEU:HG | 13 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:28:LEU:HG | 13 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:28:LEU:HG | 13 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:28:LEU:HG | 14 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:28:LEU:HG | 14 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:28:LEU:HG | 14 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:28:LEU:HG | 15 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:28:LEU:HG | 15 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:28:LEU:HG | 15 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:28:LEU:HG | 16 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:28:LEU:HG | 16 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:28:LEU:HG | 16 | 0.49 |
| (2,449) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:H | 5 | 0.49 |
| (2,434) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:21:GLN:HA | 4 | 0.49 |
| (2,434) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:21:GLN:HA | 6 | 0.49 |
| (2,434) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:21:GLN:HA | 13 | 0.49 |
| (2,434) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:21:GLN:HA | 15 | 0.49 |
| (2,434) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:21:GLN:HA | 16 | 0.49 |
| (2,427) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:HG3 | 9 | 0.49 |
| (2,427) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:HG3 | 10 | 0.49 |
| (2,423) | 1:A:18:PRO:HA | 1:A:21:GLN:HB2 | 11 | 0.49 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,418) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 5 | 0.49 |
| (2,418) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 16 | 0.49 |
| (2,414) | 1:A:9:LEU:HA | 1:A:8:ASP:HB2 | 1 | 0.49 |
| (2,355) | 1:A:16:LEU:HG | 1:A:20:GLN:HG3 | 12 | 0.49 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB1 | 6 | 0.49 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB2 | 6 | 0.49 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB3 | 6 | 0.49 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB1 | 10 | 0.49 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB2 | 10 | 0.49 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB3 | 10 | 0.49 |
| (2,1881) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HG | 11 | 0.49 |
| (2,1881) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HG | 13 | 0.49 |
| (2,1869) | 1:A:65:ARG:HD2 | 1:A:65:ARG:HE | 11 | 0.49 |
| (2,1863) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:65:ARG:HE | 16 | 0.49 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG21 | 15 | 0.49 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG22 | 15 | 0.49 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG23 | 15 | 0.49 |
| (2,179) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:8:ASP:H | 6 | 0.49 |
| (2,179) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:8:ASP:H | 7 | 0.49 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HZ | 15 | 0.49 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HZ | 15 | 0.49 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HZ | 15 | 0.49 |
| (2,1641) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:47:PRO:HB3 | 8 | 0.49 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB1 | 10 | 0.49 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB2 | 10 | 0.49 |
| (2,1628) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:48:ALA:HB3 | 10 | 0.49 |
| (2,1625) | 1:A:87:PRO:HB2 | 1:A:88:HIS:H | 3 | 0.49 |
| (2,1625) | 1:A:87:PRO:HB2 | 1:A:88:HIS:H | 15 | 0.49 |
| (2,1540) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:95:HIS:HA | 5 | 0.49 |
| (2,1531) | 1:A:98:LEU:HB3 | 1:A:98:LEU:HD11 | 1 | 0.49 |
| (2,1531) | 1:A:98:LEU:HB3 | 1:A:98:LEU:HD12 | 1 | 0.49 |
| (2,1531) | 1:A:98:LEU:HB3 | 1:A:98:LEU:HD13 | 1 | 0.49 |
| (2,1531) | 1:A:98:LEU:HB3 | 1:A:98:LEU:HD11 | 7 | 0.49 |
| (2,1531) | 1:A:98:LEU:HB3 | 1:A:98:LEU:HD12 | 7 | 0.49 |
| (2,1531) | 1:A:98:LEU:HB3 | 1:A:98:LEU:HD13 | 7 | 0.49 |
| (2,1519) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:21:GLN:HG3 | 13 | 0.49 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:68:LEU:HB2 | 5 | 0.49 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:68:LEU:HB2 | 5 | 0.49 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:68:LEU:HB2 | 5 | 0.49 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:68:LEU:HB2 | 16 | 0.49 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:68:LEU:HB2 | 16 | 0.49 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:68:LEU:HB2 | 16 | 0.49 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1480) | 1:A:78:PRO:HA | 1:A:79:THR:H | 6 | 0.49 |
| (2,1480) | 1:A:78:PRO:HA | 1:A:79:THR:H | 10 | 0.49 |
| (2,1468) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:75:ASP:H | 10 | 0.49 |
| (2,1468) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:75:ASP:H | 16 | 0.49 |
| (2,1433) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:70:HIS:HD2 | 8 | 0.49 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 3 | 0.49 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 3 | 0.49 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 3 | 0.49 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 3 | 0.49 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 3 | 0.49 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 3 | 0.49 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 3 | 0.49 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 3 | 0.49 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 3 | 0.49 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 5 | 0.49 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 5 | 0.49 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 5 | 0.49 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 5 | 0.49 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 5 | 0.49 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 5 | 0.49 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 5 | 0.49 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 5 | 0.49 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 5 | 0.49 |
| (2,1423) | 1:A:93:HIS:HD2 | 1:A:93:HIS:HB3 | 14 | 0.49 |
| (2,1423) | 1:A:93:HIS:HD2 | 1:A:93:HIS:HB3 | 15 | 0.49 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:7:THR:H | 3 | 0.49 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:7:THR:H | 3 | 0.49 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:7:THR:H | 3 | 0.49 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:7:THR:H | 16 | 0.49 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:7:THR:H | 16 | 0.49 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:7:THR:H | 16 | 0.49 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD11 | 13 | 0.49 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD12 | 13 | 0.49 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD13 | 13 | 0.49 |
| (2,1212) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:ASN:HD21 | 7 | 0.49 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG21 | 1:A:63:GLU:HB2 | 11 | 0.49 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG22 | 1:A:63:GLU:HB2 | 11 | 0.49 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG23 | 1:A:63:GLU:HB2 | 11 | 0.49 |
| (2,117) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:4:SER:HA | 5 | 0.49 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:51:PHE:HB3 | 1 | 0.49 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:51:PHE:HB3 | 1 | 0.49 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:51:PHE:HB3 | 1 | 0.49 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:51:PHE:HB3 | 5 | 0.49 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:51:PHE:HB3 | 5 | 0.49 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:51:PHE:HB3 | 5 | 0.49 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:54:LEU:HA | 9 | 0.49 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:54:LEU:HA | 9 | 0.49 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:54:LEU:HA | 9 | 0.49 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 16 | 0.49 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 16 | 0.49 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 16 | 0.49 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG21 | 4 | 0.49 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG22 | 4 | 0.49 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG23 | 4 | 0.49 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 11 | 0.49 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 11 | 0.49 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 11 | 0.49 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 15 | 0.49 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 15 | 0.49 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 15 | 0.49 |
| (1,45) | 1:A:79:THR:H | 1:A:79:THR:HA | 10 | 0.49 |
| (1,45) | 1:A:79:THR:H | 1:A:79:THR:HA | 14 | 0.49 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG21 | 2 | 0.49 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG22 | 2 | 0.49 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG23 | 2 | 0.49 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG21 | 16 | 0.49 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG22 | 16 | 0.49 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG23 | 16 | 0.49 |
| (1,318) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HG | 2 | 0.49 |
| (1,318) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HG | 4 | 0.49 |
| (1,318) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HG | 8 | 0.49 |
| (1,318) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HG | 9 | 0.49 |
| (1,318) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HG | 10 | 0.49 |
| (1,318) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HG | 14 | 0.49 |
| (1,318) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HG | 16 | 0.49 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD21 | 2 | 0.49 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD22 | 2 | 0.49 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD23 | 2 | 0.49 |
| (1,304) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HB2 | 14 | 0.49 |
| (1,282) | 1:A:14:ASN:HD21 | 1:A:11:ALA:HA | 7 | 0.49 |
| (1,270) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:81:ILE:HG12 | 2 | 0.49 |
| (1,262) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:56:ILE:H | 7 | 0.49 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 7 | 0.49 |
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 7 | 0.49 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,260) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 7 | 0.49 |
| (1,191) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:65:ARG:HB2 | 1 | 0.49 |
| (1,191) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:65:ARG:HB2 | 7 | 0.49 |
| (1,162) | 1:A:46:SER:H | 1:A:46:SER:HB3 | 11 | 0.49 |
| (1,143) | 1:A:49:THR:H | 1:A:50:ALA:H | 2 | 0.49 |
| (1,143) | 1:A:49:THR:H | 1:A:50:ALA:H | 8 | 0.49 |
| (1,113) | 1:A:88:HIS:H | 1:A:87:PRO:HD2 | 5 | 0.49 |
| (2,984) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HD1 | 1 | 0.48 |
| (2,984) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HD2 | 1 | 0.48 |
| (2,984) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HD1 | 11 | 0.48 |
| (2,984) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HD2 | 11 | 0.48 |
| (2,984) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HD1 | 13 | 0.48 |
| (2,984) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HD2 | 13 | 0.48 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB1 | 1 | 0.48 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB2 | 1 | 0.48 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB3 | 1 | 0.48 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB1 | 13 | 0.48 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB2 | 13 | 0.48 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB3 | 13 | 0.48 |
| (2,952) | 1:A:47:PRO:HB3 | 1:A:48:ALA:HA | 3 | 0.48 |
| (2,952) | 1:A:47:PRO:HB3 | 1:A:48:ALA:HA | 4 | 0.48 |
| (2,952) | 1:A:47:PRO:HB3 | 1:A:48:ALA:HA | 9 | 0.48 |
| (2,952) | 1:A:47:PRO:HB3 | 1:A:48:ALA:HA | 10 | 0.48 |
| (2,952) | 1:A:47:PRO:HB3 | 1:A:48:ALA:HA | 14 | 0.48 |
| (2,952) | 1:A:47:PRO:HB3 | 1:A:48:ALA:HA | 16 | 0.48 |
| (2,911) | 1:A:43:GLU:HB2 | 1:A:43:GLU:H | 4 | 0.48 |
| (2,851) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:ASP:H | 13 | 0.48 |
| (2,851) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:ASP:H | 13 | 0.48 |
| (2,851) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:ASP:H | 13 | 0.48 |
| (2,838) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:37:LEU:HB2 | 7 | 0.48 |
| (2,838) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:37:LEU:HB2 | 10 | 0.48 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:63:GLU:HB2 | 2 | 0.48 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:63:GLU:HB2 | 2 | 0.48 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:63:GLU:HB2 | 2 | 0.48 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:63:GLU:HB2 | 6 | 0.48 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:63:GLU:HB2 | 6 | 0.48 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:63:GLU:HB2 | 6 | 0.48 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:45:ILE:HB | 8 | 0.48 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:45:ILE:HB | 8 | 0.48 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:45:ILE:HB | 8 | 0.48 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD11 | 1:A:65:ARG:H | 8 | 0.48 |
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD12 | 1:A:65:ARG:H | 8 | 0.48 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,689) | 1:A:62:LEU:HD13 | 1:A:65:ARG:H | 8 | 0.48 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:56:ILE:HG12 | 7 | 0.48 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:56:ILE:HG12 | 7 | 0.48 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:56:ILE:HG12 | 7 | 0.48 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:64:LEU:HB3 | 7 | 0.48 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:64:LEU:HB3 | 7 | 0.48 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:64:LEU:HB3 | 7 | 0.48 |
| (2,622) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:25:LEU:HA | 6 | 0.48 |
| (2,622) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:25:LEU:HA | 10 | 0.48 |
| (2,622) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:25:LEU:HA | 11 | 0.48 |
| (2,622) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:25:LEU:HA | 14 | 0.48 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD11 | 5 | 0.48 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD12 | 5 | 0.48 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD13 | 5 | 0.48 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD11 | 5 | 0.48 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD12 | 5 | 0.48 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD13 | 5 | 0.48 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD11 | 5 | 0.48 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD12 | 5 | 0.48 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD13 | 5 | 0.48 |
| (2,547) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:29:VAL:H | 2 | 0.48 |
| (2,513) | 1:A:23:GLN:HG3 | 1:A:23:GLN:H | 4 | 0.48 |
| (2,513) | 1:A:23:GLN:HG3 | 1:A:23:GLN:H | 9 | 0.48 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:20:GLN:HB3 | 4 | 0.48 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:20:GLN:HB3 | 4 | 0.48 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:20:GLN:HB3 | 4 | 0.48 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:20:GLN:HB3 | 16 | 0.48 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:20:GLN:HB3 | 16 | 0.48 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:20:GLN:HB3 | 16 | 0.48 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG21 | 14 | 0.48 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG22 | 14 | 0.48 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG23 | 14 | 0.48 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG21 | 14 | 0.48 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG22 | 14 | 0.48 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG23 | 14 | 0.48 |
| (2,449) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:H | 4 | 0.48 |
| (2,449) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:H | 9 | 0.48 |
| (2,449) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:H | 13 | 0.48 |
| (2,434) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:21:GLN:HA | 5 | 0.48 |
| (2,434) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:21:GLN:HA | 8 | 0.48 |
| (2,434) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:21:GLN:HA | 9 | 0.48 |
| (2,434) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:21:GLN:HA | 10 | 0.48 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,427) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:21:GLN:HG3 | 4 | 0.48 |
| (2,423) | 1:A:18:PRO:HA | 1:A:21:GLN:HB2 | 13 | 0.48 |
| (2,418) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 4 | 0.48 |
| (2,364) | 1:A:17:SER:HB2 | 1:A:17:SER:H | 16 | 0.48 |
| (2,276) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:9:LEU:HD11 | 5 | 0.48 |
| (2,276) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:9:LEU:HD12 | 5 | 0.48 |
| (2,276) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:9:LEU:HD13 | 5 | 0.48 |
| (2,273) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:12:ARG:HD3 | 5 | 0.48 |
| (2,273) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:12:ARG:HD3 | 6 | 0.48 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB1 | 7 | 0.48 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB2 | 7 | 0.48 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB3 | 7 | 0.48 |
| (2,1873) | 1:A:98:LEU:HD21 | 1:A:10:ALA:HA | 8 | 0.48 |
| (2,1873) | 1:A:98:LEU:HD22 | 1:A:10:ALA:HA | 8 | 0.48 |
| (2,1873) | 1:A:98:LEU:HD23 | 1:A:10:ALA:HA | 8 | 0.48 |
| (2,1863) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:65:ARG:HE | 4 | 0.48 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:40:HIS:HB2 | 16 | 0.48 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:40:HIS:HB2 | 16 | 0.48 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:40:HIS:HB2 | 16 | 0.48 |
| (2,1721) | 1:A:92:GLN:HG2 | 1:A:92:GLN:H | 9 | 0.48 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HZ | 5 | 0.48 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HZ | 5 | 0.48 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HZ | 5 | 0.48 |
| (2,1641) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:47:PRO:HB3 | 10 | 0.48 |
| (2,1531) | 1:A:98:LEU:HB3 | 1:A:98:LEU:HD11 | 5 | 0.48 |
| (2,1531) | 1:A:98:LEU:HB3 | 1:A:98:LEU:HD12 | 5 | 0.48 |
| (2,1531) | 1:A:98:LEU:HB3 | 1:A:98:LEU:HD13 | 5 | 0.48 |
| (2,1521) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:21:GLN:HG2 | 9 | 0.48 |
| (2,1519) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:21:GLN:HG3 | 1 | 0.48 |
| (2,1519) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:21:GLN:HG3 | 10 | 0.48 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:68:LEU:HB2 | 10 | 0.48 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:68:LEU:HB2 | 10 | 0.48 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:68:LEU:HB2 | 10 | 0.48 |
| (2,1493) | 1:A:79:THR:HB | 1:A:82:PHE:HB2 | 4 | 0.48 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG21 | 9 | 0.48 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG22 | 9 | 0.48 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG23 | 9 | 0.48 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG21 | 14 | 0.48 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG22 | 14 | 0.48 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG23 | 14 | 0.48 |
| (2,1468) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:75:ASP:H | 3 | 0.48 |
| (2,1423) | 1:A:93:HIS:HD2 | 1:A:93:HIS:HB3 | 1 | 0.48 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1423) | 1:A:93:HIS:HD2 | 1:A:93:HIS:HB3 | 4 | 0.48 |
| (2,1423) | 1:A:93:HIS:HD2 | 1:A:93:HIS:HB3 | 12 | 0.48 |
| (2,139) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:4:SER:HB3 | 5 | 0.48 |
| (2,139) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:4:SER:HB3 | 5 | 0.48 |
| (2,139) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:4:SER:HB3 | 5 | 0.48 |
| (2,139) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:4:SER:HB3 | 15 | 0.48 |
| (2,139) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:4:SER:HB3 | 15 | 0.48 |
| (2,139) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:4:SER:HB3 | 15 | 0.48 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:7:THR:H | 11 | 0.48 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:7:THR:H | 11 | 0.48 |
| (2,135) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:7:THR:H | 11 | 0.48 |
| (2,1332) | 1:A:94:LEU:HG | 1:A:94:LEU:H | 13 | 0.48 |
| (2,1296) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:63:GLU:HA | 2 | 0.48 |
| (2,1296) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:63:GLU:HA | 8 | 0.48 |
| (2,1212) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:ASN:HD21 | 4 | 0.48 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG21 | 1:A:63:GLU:HB2 | 9 | 0.48 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG22 | 1:A:63:GLU:HB2 | 9 | 0.48 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG23 | 1:A:63:GLU:HB2 | 9 | 0.48 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG21 | 1:A:63:GLU:HB2 | 16 | 0.48 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG22 | 1:A:63:GLU:HB2 | 16 | 0.48 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG23 | 1:A:63:GLU:HB2 | 16 | 0.48 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:51:PHE:HB3 | 16 | 0.48 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:51:PHE:HB3 | 16 | 0.48 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:51:PHE:HB3 | 16 | 0.48 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:54:LEU:HA | 1 | 0.48 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:54:LEU:HA | 1 | 0.48 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:54:LEU:HA | 1 | 0.48 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:54:LEU:HA | 15 | 0.48 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:54:LEU:HA | 15 | 0.48 |
| (2,1074) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:54:LEU:HA | 15 | 0.48 |
| (2,1016) | 1:A:50:ALA:HA | 1:A:50:ALA:H | 2 | 0.48 |
| (2,1016) | 1:A:50:ALA:HA | 1:A:50:ALA:H | 4 | 0.48 |
| (2,1016) | 1:A:50:ALA:HA | 1:A:50:ALA:H | 6 | 0.48 |
| (2,1016) | 1:A:50:ALA:HA | 1:A:50:ALA:H | 7 | 0.48 |
| (2,1016) | 1:A:50:ALA:HA | 1:A:50:ALA:H | 8 | 0.48 |
| (2,1016) | 1:A:50:ALA:HA | 1:A:50:ALA:H | 11 | 0.48 |
| (2,1016) | 1:A:50:ALA:HA | 1:A:50:ALA:H | 12 | 0.48 |
| (2,1016) | 1:A:50:ALA:HA | 1:A:50:ALA:H | 13 | 0.48 |
| (2,1016) | 1:A:50:ALA:HA | 1:A:50:ALA:H | 14 | 0.48 |
| (2,1016) | 1:A:50:ALA:HA | 1:A:50:ALA:H | 15 | 0.48 |
| (2,1011) | 1:A:75:ASP:HA | 1:A:74:LEU:HG | 1 | 0.48 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 3 | 0.48 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 3 | 0.48 |
| (2,1003) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 3 | 0.48 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 4 | 0.48 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 4 | 0.48 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 4 | 0.48 |
| (1,557) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:23:GLN:HG3 | 4 | 0.48 |
| (1,557) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:23:GLN:HG3 | 9 | 0.48 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 6 | 0.48 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 6 | 0.48 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 6 | 0.48 |
| (1,51) | 1:A:15:GLY:H | 1:A:14:ASN:HA | 1 | 0.48 |
| (1,51) | 1:A:15:GLY:H | 1:A:14:ASN:HA | 3 | 0.48 |
| (1,51) | 1:A:15:GLY:H | 1:A:14:ASN:HA | 6 | 0.48 |
| (1,51) | 1:A:15:GLY:H | 1:A:14:ASN:HA | 9 | 0.48 |
| (1,51) | 1:A:15:GLY:H | 1:A:14:ASN:HA | 15 | 0.48 |
| (1,451) | 1:A:10:ALA:H | 1:A:9:LEU:HB3 | 13 | 0.48 |
| (1,40) | 1:A:16:LEU:H | 1:A:15:GLY:H | 11 | 0.48 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG21 | 1 | 0.48 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG22 | 1 | 0.48 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG23 | 1 | 0.48 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG21 | 15 | 0.48 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG22 | 15 | 0.48 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG23 | 15 | 0.48 |
| (1,318) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HG | 11 | 0.48 |
| (1,318) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HG | 12 | 0.48 |
| (1,318) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HG | 13 | 0.48 |
| (1,318) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HG | 15 | 0.48 |
| (1,282) | 1:A:14:ASN:HD21 | 1:A:11:ALA:HA | 14 | 0.48 |
| (1,270) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:81:ILE:HG12 | 13 | 0.48 |
| (1,262) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:56:ILE:H | 3 | 0.48 |
| (1,208) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:47:PRO:HG3 | 15 | 0.48 |
| (1,162) | 1:A:46:SER:H | 1:A:46:SER:HB3 | 10 | 0.48 |
| (1,158) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:4:SER:HA | 2 | 0.48 |
| (1,143) | 1:A:49:THR:H | 1:A:50:ALA:H | 5 | 0.48 |
| (1,113) | 1:A:88:HIS:H | 1:A:87:PRO:HD2 | 9 | 0.48 |
| (1,11) | 1:A:96:THR:H | 1:A:95:HIS:H | 7 | 0.48 |
| (2,984) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HD1 | 5 | 0.47 |
| (2,984) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HD2 | 5 | 0.47 |
| (2,984) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HD1 | 12 | 0.47 |
| (2,984) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HD2 | 12 | 0.47 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB1 | 2 | 0.47 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB2 | 2 | 0.47 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB3 | 2 | 0.47 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB1 | 5 | 0.47 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB2 | 5 | 0.47 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB3 | 5 | 0.47 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB1 | 8 | 0.47 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB2 | 8 | 0.47 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB3 | 8 | 0.47 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB1 | 9 | 0.47 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB2 | 9 | 0.47 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB3 | 9 | 0.47 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB1 | 11 | 0.47 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB2 | 11 | 0.47 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB3 | 11 | 0.47 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB1 | 12 | 0.47 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB2 | 12 | 0.47 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB3 | 12 | 0.47 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB1 | 15 | 0.47 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB2 | 15 | 0.47 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB3 | 15 | 0.47 |
| (2,952) | 1:A:47:PRO:HB3 | 1:A:48:ALA:HA | 1 | 0.47 |
| (2,952) | 1:A:47:PRO:HB3 | 1:A:48:ALA:HA | 2 | 0.47 |
| (2,952) | 1:A:47:PRO:HB3 | 1:A:48:ALA:HA | 6 | 0.47 |
| (2,952) | 1:A:47:PRO:HB3 | 1:A:48:ALA:HA | 11 | 0.47 |
| (2,911) | 1:A:43:GLU:HB2 | 1:A:43:GLU:H | 2 | 0.47 |
| (2,911) | 1:A:43:GLU:HB2 | 1:A:43:GLU:H | 14 | 0.47 |
| (2,894) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:43:GLU:HB2 | 3 | 0.47 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:71:ASN:HB3 | 6 | 0.47 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:71:ASN:HB3 | 6 | 0.47 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:71:ASN:HB3 | 6 | 0.47 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:64:LEU:HB3 | 13 | 0.47 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:64:LEU:HB3 | 13 | 0.47 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:64:LEU:HB3 | 13 | 0.47 |
| (2,622) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:25:LEU:HA | 9 | 0.47 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD11 | 3 | 0.47 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD12 | 3 | 0.47 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD13 | 3 | 0.47 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD11 | 3 | 0.47 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD12 | 3 | 0.47 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD13 | 3 | 0.47 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD11 | 3 | 0.47 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD12 | 3 | 0.47 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD13 | 3 | 0.47 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD11 | 7 | 0.47 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD12 | 7 | 0.47 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD13 | 7 | 0.47 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD11 | 7 | 0.47 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD12 | 7 | 0.47 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD13 | 7 | 0.47 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD11 | 7 | 0.47 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD12 | 7 | 0.47 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD13 | 7 | 0.47 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD11 | 11 | 0.47 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD12 | 11 | 0.47 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD13 | 11 | 0.47 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD11 | 11 | 0.47 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD12 | 11 | 0.47 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD13 | 11 | 0.47 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD11 | 11 | 0.47 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD12 | 11 | 0.47 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD13 | 11 | 0.47 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD11 | 16 | 0.47 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD12 | 16 | 0.47 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD13 | 16 | 0.47 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD11 | 16 | 0.47 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD12 | 16 | 0.47 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD13 | 16 | 0.47 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD11 | 16 | 0.47 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD12 | 16 | 0.47 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD13 | 16 | 0.47 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD11 | 8 | 0.47 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD12 | 8 | 0.47 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:81:ILE:HD13 | 8 | 0.47 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD11 | 8 | 0.47 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD12 | 8 | 0.47 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:81:ILE:HD13 | 8 | 0.47 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD11 | 8 | 0.47 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD12 | 8 | 0.47 |
| (2,58) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:81:ILE:HD13 | 8 | 0.47 |
| (2,513) | 1:A:23:GLN:HG3 | 1:A:23:GLN:H | 5 | 0.47 |
| (2,513) | 1:A:23:GLN:HG3 | 1:A:23:GLN:H | 16 | 0.47 |
| (2,508) | 1:A:23:GLN:HB3 | 1:A:20:GLN:HA | 16 | 0.47 |
| (2,492) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:19:GLN:HA | 13 | 0.47 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG21 | 12 | 0.47 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG22 | 12 | 0.47 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG23 | 12 | 0.47 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG21 | 12 | 0.47 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG22 | 12 | 0.47 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG23 | 12 | 0.47 |
| (2,449) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:H | 3 | 0.47 |
| (2,434) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:21:GLN:HA | 1 | 0.47 |
| (2,434) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:21:GLN:HA | 3 | 0.47 |
| (2,423) | 1:A:18:PRO:HA | 1:A:21:GLN:HB2 | 9 | 0.47 |
| (2,418) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 2 | 0.47 |
| (2,412) | 1:A:19:GLN:HB2 | 1:A:19:GLN:H | 13 | 0.47 |
| (2,40) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HD1 | 7 | 0.47 |
| (2,40) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HD2 | 7 | 0.47 |
| (2,365) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:17:SER:H | 15 | 0.47 |
| (2,355) | 1:A:16:LEU:HG | 1:A:20:GLN:HG3 | 13 | 0.47 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD21 | 8 | 0.47 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD22 | 8 | 0.47 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD23 | 8 | 0.47 |
| (2,292) | 1:A:68:LEU:HB2 | 1:A:65:ARG:HA | 7 | 0.47 |
| (2,292) | 1:A:68:LEU:HB2 | 1:A:65:ARG:HA | 10 | 0.47 |
| (2,240) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD21 | 11 | 0.47 |
| (2,240) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD22 | 11 | 0.47 |
| (2,240) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD23 | 11 | 0.47 |
| (2,240) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD21 | 11 | 0.47 |
| (2,240) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD22 | 11 | 0.47 |
| (2,240) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD23 | 11 | 0.47 |
| (2,240) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD21 | 11 | 0.47 |
| (2,240) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD22 | 11 | 0.47 |
| (2,240) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD23 | 11 | 0.47 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB1 | 1 | 0.47 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB2 | 1 | 0.47 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB3 | 1 | 0.47 |
| (2,1873) | 1:A:98:LEU:HD21 | 1:A:10:ALA:HA | 11 | 0.47 |
| (2,1873) | 1:A:98:LEU:HD22 | 1:A:10:ALA:HA | 11 | 0.47 |
| (2,1873) | 1:A:98:LEU:HD23 | 1:A:10:ALA:HA | 11 | 0.47 |
| (2,1863) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:65:ARG:HE | 3 | 0.47 |
| (2,179) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:8:ASP:H | 15 | 0.47 |
| (2,1697) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:94:LEU:HB3 | 7 | 0.47 |
| (2,1697) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:94:LEU:HB3 | 16 | 0.47 |
| (2,1641) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:47:PRO:HB3 | 3 | 0.47 |
| (2,1641) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:47:PRO:HB3 | 13 | 0.47 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB1 | 13 | 0.47 |
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB2 | 13 | 0.47 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,164) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:11:ALA:HB3 | 13 | 0.47 |
| (2,1625) | 1:A:87:PRO:HB2 | 1:A:88:HIS:H | 13 | 0.47 |
| (2,1505) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:71:ASN:HB2 | 11 | 0.47 |
| (2,1505) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:71:ASN:HB2 | 11 | 0.47 |
| (2,1505) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:71:ASN:HB2 | 11 | 0.47 |
| (2,1493) | 1:A:79:THR:HB | 1:A:82:PHE:HB2 | 11 | 0.47 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG21 | 2 | 0.47 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG22 | 2 | 0.47 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG23 | 2 | 0.47 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG21 | 11 | 0.47 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG22 | 11 | 0.47 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG23 | 11 | 0.47 |
| (2,1468) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:75:ASP:H | 11 | 0.47 |
| (2,1468) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:75:ASP:H | 13 | 0.47 |
| (2,1433) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:70:HIS:HD2 | 6 | 0.47 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 11 | 0.47 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 11 | 0.47 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 11 | 0.47 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 11 | 0.47 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 11 | 0.47 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 11 | 0.47 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 11 | 0.47 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 11 | 0.47 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 11 | 0.47 |
| (2,1423) | 1:A:93:HIS:HD2 | 1:A:93:HIS:HB3 | 6 | 0.47 |
| (2,1423) | 1:A:93:HIS:HD2 | 1:A:93:HIS:HB3 | 8 | 0.47 |
| (2,1423) | 1:A:93:HIS:HD2 | 1:A:93:HIS:HB3 | 9 | 0.47 |
| (2,1423) | 1:A:93:HIS:HD2 | 1:A:93:HIS:HB3 | 11 | 0.47 |
| (2,1378) | 1:A:97:ARG:HB3 | 1:A:74:LEU:HD21 | 8 | 0.47 |
| (2,1378) | 1:A:97:ARG:HB3 | 1:A:74:LEU:HD22 | 8 | 0.47 |
| (2,1378) | 1:A:97:ARG:HB3 | 1:A:74:LEU:HD23 | 8 | 0.47 |
| (2,1332) | 1:A:94:LEU:HG | 1:A:94:LEU:H | 1 | 0.47 |
| (2,1332) | 1:A:94:LEU:HG | 1:A:94:LEU:H | 2 | 0.47 |
| (2,1332) | 1:A:94:LEU:HG | 1:A:94:LEU:H | 4 | 0.47 |
| (2,1332) | 1:A:94:LEU:HG | 1:A:94:LEU:H | 14 | 0.47 |
| (2,1332) | 1:A:94:LEU:HG | 1:A:94:LEU:H | 15 | 0.47 |
| (2,1239) | 1:A:64:LEU:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 11 | 0.47 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG21 | 1:A:63:GLU:HB2 | 3 | 0.47 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG22 | 1:A:63:GLU:HB2 | 3 | 0.47 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG23 | 1:A:63:GLU:HB2 | 3 | 0.47 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG21 | 1:A:63:GLU:HB2 | 6 | 0.47 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG22 | 1:A:63:GLU:HB2 | 6 | 0.47 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG23 | 1:A:63:GLU:HB2 | 6 | 0.47 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG21 | 1:A:63:GLU:HB2 | 10 | 0.47 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG22 | 1:A:63:GLU:HB2 | 10 | 0.47 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG23 | 1:A:63:GLU:HB2 | 10 | 0.47 |
| (2,1192) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:65:ARG:HB2 | 1 | 0.47 |
| (2,1192) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:65:ARG:HB2 | 15 | 0.47 |
| (2,1192) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:65:ARG:HB2 | 16 | 0.47 |
| (2,1173) | 1:A:61:ALA:HB1 | 1:A:58:SER:HA | 7 | 0.47 |
| (2,1173) | 1:A:61:ALA:HB2 | 1:A:58:SER:HA | 7 | 0.47 |
| (2,1173) | 1:A:61:ALA:HB3 | 1:A:58:SER:HA | 7 | 0.47 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:51:PHE:HB3 | 4 | 0.47 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:51:PHE:HB3 | 4 | 0.47 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:51:PHE:HB3 | 4 | 0.47 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:45:ILE:HG13 | 4 | 0.47 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:45:ILE:HG13 | 4 | 0.47 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:45:ILE:HG13 | 4 | 0.47 |
| (2,1016) | 1:A:50:ALA:HA | 1:A:50:ALA:H | 1 | 0.47 |
| (2,1016) | 1:A:50:ALA:HA | 1:A:50:ALA:H | 3 | 0.47 |
| (2,1016) | 1:A:50:ALA:HA | 1:A:50:ALA:H | 5 | 0.47 |
| (2,1016) | 1:A:50:ALA:HA | 1:A:50:ALA:H | 9 | 0.47 |
| (2,1016) | 1:A:50:ALA:HA | 1:A:50:ALA:H | 10 | 0.47 |
| (2,1016) | 1:A:50:ALA:HA | 1:A:50:ALA:H | 16 | 0.47 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG21 | 5 | 0.47 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG22 | 5 | 0.47 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG23 | 5 | 0.47 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG21 | 12 | 0.47 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG22 | 12 | 0.47 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG23 | 12 | 0.47 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG21 | 14 | 0.47 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG22 | 14 | 0.47 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG23 | 14 | 0.47 |
| (1,561) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:21:GLN:HB2 | 6 | 0.47 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 15 | 0.47 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 15 | 0.47 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 15 | 0.47 |
| (1,557) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:23:GLN:HG3 | 5 | 0.47 |
| (1,557) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:23:GLN:HG3 | 16 | 0.47 |
| (1,527) | 1:A:93:HIS:H | 1:A:92:GLN:HB3 | 10 | 0.47 |
| (1,527) | 1:A:93:HIS:H | 1:A:92:GLN:HB3 | 14 | 0.47 |
| (1,527) | 1:A:93:HIS:H | 1:A:92:GLN:HB3 | 15 | 0.47 |
| (1,51) | 1:A:15:GLY:H | 1:A:14:ASN:HA | 2 | 0.47 |
| (1,51) | 1:A:15:GLY:H | 1:A:14:ASN:HA | 4 | 0.47 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,51) | 1:A:15:GLY:H | 1:A:14:ASN:HA | 5 | 0.47 |
| (1,51) | 1:A:15:GLY:H | 1:A:14:ASN:HA | 7 | 0.47 |
| (1,51) | 1:A:15:GLY:H | 1:A:14:ASN:HA | 8 | 0.47 |
| (1,51) | 1:A:15:GLY:H | 1:A:14:ASN:HA | 10 | 0.47 |
| (1,51) | 1:A:15:GLY:H | 1:A:14:ASN:HA | 11 | 0.47 |
| (1,51) | 1:A:15:GLY:H | 1:A:14:ASN:HA | 14 | 0.47 |
| (1,51) | 1:A:15:GLY:H | 1:A:14:ASN:HA | 16 | 0.47 |
| (1,479) | 1:A:68:LEU:H | 1:A:68:LEU:HG | 13 | 0.47 |
| (1,382) | 1:A:14:ASN:HD22 | 1:A:11:ALA:HB1 | 2 | 0.47 |
| (1,382) | 1:A:14:ASN:HD22 | 1:A:11:ALA:HB2 | 2 | 0.47 |
| (1,382) | 1:A:14:ASN:HD22 | 1:A:11:ALA:HB3 | 2 | 0.47 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG21 | 10 | 0.47 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG22 | 10 | 0.47 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG23 | 10 | 0.47 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG21 | 14 | 0.47 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG22 | 14 | 0.47 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG23 | 14 | 0.47 |
| (1,33) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:55:GLY:H | 6 | 0.47 |
| (1,318) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HG | 1 | 0.47 |
| (1,304) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HB2 | 7 | 0.47 |
| (1,282) | 1:A:14:ASN:HD21 | 1:A:11:ALA:HA | 10 | 0.47 |
| (1,282) | 1:A:14:ASN:HD21 | 1:A:11:ALA:HA | 11 | 0.47 |
| (1,282) | 1:A:14:ASN:HD21 | 1:A:11:ALA:HA | 13 | 0.47 |
| (1,262) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:56:ILE:H | 13 | 0.47 |
| (1,233) | 1:A:102:HIS:H | 1:A:102:HIS:HB2 | 11 | 0.47 |
| (1,208) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:47:PRO:HG3 | 13 | 0.47 |
| (1,162) | 1:A:46:SER:H | 1:A:46:SER:HB3 | 1 | 0.47 |
| (1,158) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:4:SER:HA | 15 | 0.47 |
| (1,143) | 1:A:49:THR:H | 1:A:50:ALA:H | 13 | 0.47 |
| (1,113) | 1:A:88:HIS:H | 1:A:87:PRO:HD2 | 4 | 0.47 |
| (1,113) | 1:A:88:HIS:H | 1:A:87:PRO:HD2 | 16 | 0.47 |
| (1,11) | 1:A:96:THR:H | 1:A:95:HIS:H | 8 | 0.47 |
| (2,984) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HD1 | 3 | 0.46 |
| (2,984) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HD2 | 3 | 0.46 |
| (2,984) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HD1 | 7 | 0.46 |
| (2,984) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HD2 | 7 | 0.46 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB1 | 3 | 0.46 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB2 | 3 | 0.46 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB3 | 3 | 0.46 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB1 | 6 | 0.46 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB2 | 6 | 0.46 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB3 | 6 | 0.46 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB1 | 7 | 0.46 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB2 | 7 | 0.46 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB3 | 7 | 0.46 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB1 | 10 | 0.46 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB2 | 10 | 0.46 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB3 | 10 | 0.46 |
| (2,952) | 1:A:47:PRO:HB3 | 1:A:48:ALA:HA | 5 | 0.46 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:45:ILE:HB | 7 | 0.46 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:45:ILE:HB | 7 | 0.46 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:45:ILE:HB | 7 | 0.46 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:45:ILE:HB | 10 | 0.46 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:45:ILE:HB | 10 | 0.46 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:45:ILE:HB | 10 | 0.46 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:45:ILE:HB | 11 | 0.46 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:45:ILE:HB | 11 | 0.46 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:45:ILE:HB | 11 | 0.46 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:45:ILE:HB | 14 | 0.46 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:45:ILE:HB | 14 | 0.46 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:45:ILE:HB | 14 | 0.46 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:45:ILE:HB | 15 | 0.46 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:45:ILE:HB | 15 | 0.46 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:45:ILE:HB | 15 | 0.46 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG21 | 14 | 0.46 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG22 | 14 | 0.46 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG23 | 14 | 0.46 |
| (2,682) | 1:A:62:LEU:HD11 | 1:A:78:PRO:HB2 | 3 | 0.46 |
| (2,682) | 1:A:62:LEU:HD12 | 1:A:78:PRO:HB2 | 3 | 0.46 |
| (2,682) | 1:A:62:LEU:HD13 | 1:A:78:PRO:HB2 | 3 | 0.46 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:71:ASN:HB3 | 7 | 0.46 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:71:ASN:HB3 | 7 | 0.46 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:71:ASN:HB3 | 7 | 0.46 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:71:ASN:HB3 | 16 | 0.46 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:71:ASN:HB3 | 16 | 0.46 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:71:ASN:HB3 | 16 | 0.46 |
| (2,622) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:25:LEU:HA | 1 | 0.46 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD11 | 2 | 0.46 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD12 | 2 | 0.46 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD13 | 2 | 0.46 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD11 | 2 | 0.46 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD12 | 2 | 0.46 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD13 | 2 | 0.46 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD11 | 2 | 0.46 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD12 | 2 | 0.46 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD13 | 2 | 0.46 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD11 | 6 | 0.46 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD12 | 6 | 0.46 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD13 | 6 | 0.46 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD11 | 6 | 0.46 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD12 | 6 | 0.46 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD13 | 6 | 0.46 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD11 | 6 | 0.46 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD12 | 6 | 0.46 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD13 | 6 | 0.46 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD11 | 12 | 0.46 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD12 | 12 | 0.46 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD13 | 12 | 0.46 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD11 | 12 | 0.46 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD12 | 12 | 0.46 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD13 | 12 | 0.46 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD11 | 12 | 0.46 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD12 | 12 | 0.46 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD13 | 12 | 0.46 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD11 | 14 | 0.46 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD12 | 14 | 0.46 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:90:LEU:HD13 | 14 | 0.46 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD11 | 14 | 0.46 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD12 | 14 | 0.46 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:90:LEU:HD13 | 14 | 0.46 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD11 | 14 | 0.46 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD12 | 14 | 0.46 |
| (2,62) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:90:LEU:HD13 | 14 | 0.46 |
| (2,547) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:29:VAL:H | 13 | 0.46 |
| (2,513) | 1:A:23:GLN:HG3 | 1:A:23:GLN:H | 6 | 0.46 |
| (2,508) | 1:A:23:GLN:HB3 | 1:A:20:GLN:HA | 13 | 0.46 |
| (2,508) | 1:A:23:GLN:HB3 | 1:A:20:GLN:HA | 14 | 0.46 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB1 | 5 | 0.46 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB2 | 5 | 0.46 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB3 | 5 | 0.46 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB1 | 7 | 0.46 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB2 | 7 | 0.46 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB3 | 7 | 0.46 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:20:GLN:HB3 | 1 | 0.46 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:20:GLN:HB3 | 1 | 0.46 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:20:GLN:HB3 | 1 | 0.46 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:20:GLN:HB3 | 2 | 0.46 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:20:GLN:HB3 | 2 | 0.46 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:20:GLN:HB3 | 2 | 0.46 |
| (2,449) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:H | 15 | 0.46 |
| (2,449) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:H | 16 | 0.46 |
| (2,434) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:21:GLN:HA | 7 | 0.46 |
| (2,434) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:21:GLN:HA | 11 | 0.46 |
| (2,370) | 1:A:17:SER:HB2 | 1:A:20:GLN:HG3 | 5 | 0.46 |
| (2,335) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 16 | 0.46 |
| (2,302) | 1:A:13:LEU:HB2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 4 | 0.46 |
| (2,292) | 1:A:68:LEU:HB2 | 1:A:65:ARG:HA | 12 | 0.46 |
| (2,273) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:12:ARG:HD3 | 14 | 0.46 |
| (2,229) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:14:ASN:HD22 | 2 | 0.46 |
| (2,229) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:14:ASN:HD22 | 2 | 0.46 |
| (2,229) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:14:ASN:HD22 | 2 | 0.46 |
| (2,1881) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HG | 3 | 0.46 |
| (2,1881) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HG | 8 | 0.46 |
| (2,1863) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:65:ARG:HE | 1 | 0.46 |
| (2,1863) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:65:ARG:HE | 7 | 0.46 |
| (2,1863) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:65:ARG:HE | 10 | 0.46 |
| (2,1863) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:65:ARG:HE | 12 | 0.46 |
| (2,179) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:8:ASP:H | 1 | 0.46 |
| (2,179) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:8:ASP:H | 8 | 0.46 |
| (2,1722) | 1:A:92:GLN:HG3 | 1:A:92:GLN:H | 12 | 0.46 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HZ | 13 | 0.46 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HZ | 13 | 0.46 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HZ | 13 | 0.46 |
| (2,1641) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:47:PRO:HB3 | 6 | 0.46 |
| (2,1625) | 1:A:87:PRO:HB2 | 1:A:88:HIS:H | 1 | 0.46 |
| (2,1625) | 1:A:87:PRO:HB2 | 1:A:88:HIS:H | 11 | 0.46 |
| (2,1539) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:99:THR:H | 15 | 0.46 |
| (2,1530) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HB3 | 1 | 0.46 |
| (2,1530) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HB3 | 3 | 0.46 |
| (2,1530) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HB3 | 4 | 0.46 |
| (2,1530) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HB3 | 5 | 0.46 |
| (2,1530) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HB3 | 6 | 0.46 |
| (2,1530) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HB3 | 9 | 0.46 |
| (2,1530) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HB3 | 10 | 0.46 |
| (2,1530) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HB3 | 12 | 0.46 |
| (2,1530) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HB3 | 13 | 0.46 |
| (2,1530) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HB3 | 14 | 0.46 |
| (2,1530) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HB3 | 15 | 0.46 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1530) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HB3 | 16 | 0.46 |
| (2,1521) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:21:GLN:HG2 | 8 | 0.46 |
| (2,1493) | 1:A:79:THR:HB | 1:A:82:PHE:HB2 | 5 | 0.46 |
| (2,1480) | 1:A:78:PRO:HA | 1:A:79:THR:H | 5 | 0.46 |
| (2,1480) | 1:A:78:PRO:HA | 1:A:79:THR:H | 8 | 0.46 |
| (2,1468) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:75:ASP:H | 5 | 0.46 |
| (2,1431) | 1:A:67:THR:HB | 1:A:71:ASN:HD21 | 13 | 0.46 |
| (2,1429) | 1:A:102:HIS:HD2 | 1:A:101:SER:HB2 | 13 | 0.46 |
| (2,1423) | 1:A:93:HIS:HD2 | 1:A:93:HIS:HB3 | 10 | 0.46 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HB | 7 | 0.46 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HB | 7 | 0.46 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HB | 7 | 0.46 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:54:LEU:H | 1 | 0.46 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:54:LEU:H | 1 | 0.46 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:54:LEU:H | 1 | 0.46 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB1 | 9 | 0.46 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB2 | 9 | 0.46 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB3 | 9 | 0.46 |
| (2,1332) | 1:A:94:LEU:HG | 1:A:94:LEU:H | 6 | 0.46 |
| (2,1332) | 1:A:94:LEU:HG | 1:A:94:LEU:H | 9 | 0.46 |
| (2,1332) | 1:A:94:LEU:HG | 1:A:94:LEU:H | 12 | 0.46 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD11 | 16 | 0.46 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD12 | 16 | 0.46 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD13 | 16 | 0.46 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG21 | 1:A:63:GLU:HB2 | 4 | 0.46 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG22 | 1:A:63:GLU:HB2 | 4 | 0.46 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG23 | 1:A:63:GLU:HB2 | 4 | 0.46 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG21 | 1:A:63:GLU:HB2 | 12 | 0.46 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG22 | 1:A:63:GLU:HB2 | 12 | 0.46 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG23 | 1:A:63:GLU:HB2 | 12 | 0.46 |
| (2,1094) | 1:A:56:ILE:HG12 | 1:A:56:ILE:HB | 9 | 0.46 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:45:ILE:HG13 | 13 | 0.46 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:45:ILE:HG13 | 13 | 0.46 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:45:ILE:HG13 | 13 | 0.46 |
| (1,584) | 1:A:96:THR:H | 1:A:92:GLN:HB2 | 9 | 0.46 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 2 | 0.46 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 2 | 0.46 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 2 | 0.46 |
| (1,557) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:23:GLN:HG3 | 6 | 0.46 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 4 | 0.46 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 4 | 0.46 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 4 | 0.46 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,451) | 1:A:10:ALA:H | 1:A:9:LEU:HB3 | 16 | 0.46 |
| (1,40) | 1:A:16:LEU:H | 1:A:15:GLY:H | 14 | 0.46 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG21 | 6 | 0.46 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG22 | 6 | 0.46 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG23 | 6 | 0.46 |
| (1,389) | 1:A:65:ARG:HE | 1:A:65:ARG:HG2 | 9 | 0.46 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG21 | 5 | 0.46 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG22 | 5 | 0.46 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG23 | 5 | 0.46 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG21 | 6 | 0.46 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG22 | 6 | 0.46 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG23 | 6 | 0.46 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG21 | 8 | 0.46 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG22 | 8 | 0.46 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG23 | 8 | 0.46 |
| (1,349) | 1:A:17:SER:H | 1:A:20:GLN:HB2 | 9 | 0.46 |
| (1,336) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HB2 | 12 | 0.46 |
| (1,336) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HB2 | 13 | 0.46 |
| (1,318) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HG | 3 | 0.46 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD21 | 12 | 0.46 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD22 | 12 | 0.46 |
| (1,305) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD23 | 12 | 0.46 |
| (1,262) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:56:ILE:H | 2 | 0.46 |
| (1,262) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:56:ILE:H | 10 | 0.46 |
| (1,262) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:56:ILE:H | 15 | 0.46 |
| (1,262) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:56:ILE:H | 16 | 0.46 |
| (1,208) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:47:PRO:HG3 | 9 | 0.46 |
| (1,208) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:47:PRO:HG3 | 12 | 0.46 |
| (1,162) | 1:A:46:SER:H | 1:A:46:SER:HB3 | 5 | 0.46 |
| (1,162) | 1:A:46:SER:H | 1:A:46:SER:HB3 | 6 | 0.46 |
| (1,162) | 1:A:46:SER:H | 1:A:46:SER:HB3 | 7 | 0.46 |
| (1,127) | 1:A:69:THR:H | 1:A:68:LEU:HB2 | 7 | 0.46 |
| (2,984) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HD1 | 6 | 0.45 |
| (2,984) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HD2 | 6 | 0.45 |
| (2,984) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HD1 | 9 | 0.45 |
| (2,984) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HD2 | 9 | 0.45 |
| (2,984) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HD1 | 10 | 0.45 |
| (2,984) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HD2 | 10 | 0.45 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB1 | 14 | 0.45 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB2 | 14 | 0.45 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB3 | 14 | 0.45 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB1 | 16 | 0.45 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB2 | 16 | 0.45 |
| (2,968) | 1:A:47:PRO:HG2 | 1:A:48:ALA:HB3 | 16 | 0.45 |
| (2,96) | 1:A:4:SER:HB3 | 1:A:7:THR:HB | 3 | 0.45 |
| (2,952) | 1:A:47:PRO:HB3 | 1:A:48:ALA:HA | 7 | 0.45 |
| (2,932) | 1:A:45:ILE:HG13 | 1:A:42:PRO:HA | 16 | 0.45 |
| (2,923) | 1:A:101:SER:HB2 | 1:A:102:HIS:H | 6 | 0.45 |
| (2,917) | 1:A:44:SER:HA | 1:A:41:THR:HG21 | 2 | 0.45 |
| (2,917) | 1:A:44:SER:HA | 1:A:41:THR:HG22 | 2 | 0.45 |
| (2,917) | 1:A:44:SER:HA | 1:A:41:THR:HG23 | 2 | 0.45 |
| (2,917) | 1:A:44:SER:HA | 1:A:41:THR:HG21 | 14 | 0.45 |
| (2,917) | 1:A:44:SER:HA | 1:A:41:THR:HG22 | 14 | 0.45 |
| (2,917) | 1:A:44:SER:HA | 1:A:41:THR:HG23 | 14 | 0.45 |
| (2,865) | 1:A:38:GLY:HA2 | 1:A:38:GLY:HA3 | 4 | 0.45 |
| (2,865) | 1:A:38:GLY:HA2 | 1:A:38:GLY:HA3 | 7 | 0.45 |
| (2,865) | 1:A:38:GLY:HA2 | 1:A:38:GLY:HA3 | 9 | 0.45 |
| (2,865) | 1:A:38:GLY:HA2 | 1:A:38:GLY:HA3 | 12 | 0.45 |
| (2,865) | 1:A:38:GLY:HA2 | 1:A:38:GLY:HA3 | 13 | 0.45 |
| (2,865) | 1:A:38:GLY:HA2 | 1:A:38:GLY:HA3 | 14 | 0.45 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:63:GLU:HB2 | 10 | 0.45 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:63:GLU:HB2 | 10 | 0.45 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:63:GLU:HB2 | 10 | 0.45 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:63:GLU:HB2 | 12 | 0.45 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:63:GLU:HB2 | 12 | 0.45 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:63:GLU:HB2 | 12 | 0.45 |
| (2,745) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HA | 4 | 0.45 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HA | 1 | 0.45 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HA | 1 | 0.45 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HA | 1 | 0.45 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:45:ILE:HB | 1 | 0.45 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:45:ILE:HB | 1 | 0.45 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:45:ILE:HB | 1 | 0.45 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:45:ILE:HB | 2 | 0.45 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:45:ILE:HB | 2 | 0.45 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:45:ILE:HB | 2 | 0.45 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:45:ILE:HB | 12 | 0.45 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:45:ILE:HB | 12 | 0.45 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:45:ILE:HB | 12 | 0.45 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG21 | 4 | 0.45 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG22 | 4 | 0.45 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG23 | 4 | 0.45 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG21 | 13 | 0.45 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG22 | 13 | 0.45 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG23 | 13 | 0.45 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:56:ILE:HG12 | 9 | 0.45 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:56:ILE:HG12 | 9 | 0.45 |
| (2,65) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:56:ILE:HG12 | 9 | 0.45 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:71:ASN:HB3 | 10 | 0.45 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:71:ASN:HB3 | 10 | 0.45 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:71:ASN:HB3 | 10 | 0.45 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD11 | 9 | 0.45 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD12 | 9 | 0.45 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD13 | 9 | 0.45 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD11 | 9 | 0.45 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD12 | 9 | 0.45 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD13 | 9 | 0.45 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD11 | 9 | 0.45 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD12 | 9 | 0.45 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD13 | 9 | 0.45 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:10:ALA:H | 15 | 0.45 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:10:ALA:H | 15 | 0.45 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:10:ALA:H | 15 | 0.45 |
| (2,547) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:29:VAL:H | 6 | 0.45 |
| (2,547) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:29:VAL:H | 14 | 0.45 |
| (2,547) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:29:VAL:H | 15 | 0.45 |
| (2,547) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:29:VAL:H | 16 | 0.45 |
| (2,513) | 1:A:23:GLN:HG3 | 1:A:23:GLN:H | 14 | 0.45 |
| (2,508) | 1:A:23:GLN:HB3 | 1:A:20:GLN:HA | 4 | 0.45 |
| (2,494) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:23:GLN:H | 11 | 0.45 |
| (2,487) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:95:HIS:HB2 | 10 | 0.45 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG21 | 7 | 0.45 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG22 | 7 | 0.45 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG23 | 7 | 0.45 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG21 | 7 | 0.45 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG22 | 7 | 0.45 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG23 | 7 | 0.45 |
| (2,412) | 1:A:19:GLN:HB2 | 1:A:19:GLN:H | 14 | 0.45 |
| (2,40) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HD1 | 15 | 0.45 |
| (2,40) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HD2 | 15 | 0.45 |
| (2,370) | 1:A:17:SER:HB2 | 1:A:20:GLN:HG3 | 4 | 0.45 |
| (2,347) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:LEU:HD21 | 10 | 0.45 |
| (2,347) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:LEU:HD22 | 10 | 0.45 |
| (2,347) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:LEU:HD23 | 10 | 0.45 |
| (2,337) | 1:A:11:ALA:HA | 1:A:14:ASN:HB2 | 7 | 0.45 |
| (2,335) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 6 | 0.45 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,302) | 1:A:13:LEU:HB2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 1 | 0.45 |
| (2,302) | 1:A:13:LEU:HB2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 2 | 0.45 |
| (2,302) | 1:A:13:LEU:HB2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 3 | 0.45 |
| (2,302) | 1:A:13:LEU:HB2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 5 | 0.45 |
| (2,302) | 1:A:13:LEU:HB2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 6 | 0.45 |
| (2,302) | 1:A:13:LEU:HB2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 7 | 0.45 |
| (2,302) | 1:A:13:LEU:HB2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 8 | 0.45 |
| (2,302) | 1:A:13:LEU:HB2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 9 | 0.45 |
| (2,302) | 1:A:13:LEU:HB2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 10 | 0.45 |
| (2,302) | 1:A:13:LEU:HB2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 11 | 0.45 |
| (2,302) | 1:A:13:LEU:HB2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 12 | 0.45 |
| (2,302) | 1:A:13:LEU:HB2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 13 | 0.45 |
| (2,302) | 1:A:13:LEU:HB2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 14 | 0.45 |
| (2,302) | 1:A:13:LEU:HB2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 15 | 0.45 |
| (2,302) | 1:A:13:LEU:HB2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 16 | 0.45 |
| (2,295) | 1:A:59:LEU:HB2 | 1:A:60:THR:H | 10 | 0.45 |
| (2,199) | 1:A:9:LEU:HB3 | 1:A:9:LEU:HB2 | 1 | 0.45 |
| (2,199) | 1:A:9:LEU:HB3 | 1:A:9:LEU:HB2 | 2 | 0.45 |
| (2,199) | 1:A:9:LEU:HB3 | 1:A:9:LEU:HB2 | 3 | 0.45 |
| (2,199) | 1:A:9:LEU:HB3 | 1:A:9:LEU:HB2 | 4 | 0.45 |
| (2,199) | 1:A:9:LEU:HB3 | 1:A:9:LEU:HB2 | 5 | 0.45 |
| (2,199) | 1:A:9:LEU:HB3 | 1:A:9:LEU:HB2 | 6 | 0.45 |
| (2,199) | 1:A:9:LEU:HB3 | 1:A:9:LEU:HB2 | 7 | 0.45 |
| (2,199) | 1:A:9:LEU:HB3 | 1:A:9:LEU:HB2 | 8 | 0.45 |
| (2,199) | 1:A:9:LEU:HB3 | 1:A:9:LEU:HB2 | 9 | 0.45 |
| (2,199) | 1:A:9:LEU:HB3 | 1:A:9:LEU:HB2 | 10 | 0.45 |
| (2,199) | 1:A:9:LEU:HB3 | 1:A:9:LEU:HB2 | 11 | 0.45 |
| (2,199) | 1:A:9:LEU:HB3 | 1:A:9:LEU:HB2 | 12 | 0.45 |
| (2,199) | 1:A:9:LEU:HB3 | 1:A:9:LEU:HB2 | 13 | 0.45 |
| (2,199) | 1:A:9:LEU:HB3 | 1:A:9:LEU:HB2 | 14 | 0.45 |
| (2,199) | 1:A:9:LEU:HB3 | 1:A:9:LEU:HB2 | 15 | 0.45 |
| (2,199) | 1:A:9:LEU:HB3 | 1:A:9:LEU:HB2 | 16 | 0.45 |
| (2,1920) | 1:A:76:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 10 | 0.45 |
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HB3 | 5 | 0.45 |
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HB3 | 5 | 0.45 |
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HB3 | 5 | 0.45 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HG12 | 9 | 0.45 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HG12 | 9 | 0.45 |
| (2,1893) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HG12 | 9 | 0.45 |
| (2,1881) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HG | 1 | 0.45 |
| (2,1881) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HG | 14 | 0.45 |
| (2,1868) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:ASN:H | 16 | 0.45 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1864) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:ASN:HA | 7 | 0.45 |
| (2,1863) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:65:ARG:HE | 5 | 0.45 |
| (2,1863) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:65:ARG:HE | 8 | 0.45 |
| (2,1863) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:65:ARG:HE | 13 | 0.45 |
| (2,1863) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:65:ARG:HE | 15 | 0.45 |
| (2,1858) | 1:A:25:LEU:HG | 1:A:21:GLN:HA | 14 | 0.45 |
| (2,1801) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:96:THR:HG21 | 7 | 0.45 |
| (2,1801) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:96:THR:HG22 | 7 | 0.45 |
| (2,1801) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:96:THR:HG23 | 7 | 0.45 |
| (2,179) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:8:ASP:H | 3 | 0.45 |
| (2,179) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:8:ASP:H | 10 | 0.45 |
| (2,179) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:8:ASP:H | 14 | 0.45 |
| (2,1697) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:94:LEU:HB3 | 3 | 0.45 |
| (2,1697) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:94:LEU:HB3 | 10 | 0.45 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HZ | 16 | 0.45 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HZ | 16 | 0.45 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HZ | 16 | 0.45 |
| (2,1641) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:47:PRO:HB3 | 4 | 0.45 |
| (2,1641) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:47:PRO:HB3 | 7 | 0.45 |
| (2,1625) | 1:A:87:PRO:HB2 | 1:A:88:HIS:H | 4 | 0.45 |
| (2,1625) | 1:A:87:PRO:HB2 | 1:A:88:HIS:H | 8 | 0.45 |
| (2,1564) | 1:A:82:PHE:HB3 | 1:A:82:PHE:HB2 | 1 | 0.45 |
| (2,1564) | 1:A:82:PHE:HB3 | 1:A:82:PHE:HB2 | 2 | 0.45 |
| (2,1564) | 1:A:82:PHE:HB3 | 1:A:82:PHE:HB2 | 10 | 0.45 |
| (2,1530) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HB3 | 2 | 0.45 |
| (2,1530) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HB3 | 7 | 0.45 |
| (2,1530) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HB3 | 11 | 0.45 |
| (2,1529) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:21:GLN:H | 8 | 0.45 |
| (2,1519) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:21:GLN:HG3 | 5 | 0.45 |
| (2,1493) | 1:A:79:THR:HB | 1:A:82:PHE:HB2 | 1 | 0.45 |
| (2,1463) | 1:A:73:GLY:HA2 | 1:A:73:GLY:HA3 | 1 | 0.45 |
| (2,1463) | 1:A:73:GLY:HA2 | 1:A:73:GLY:HA3 | 2 | 0.45 |
| (2,1463) | 1:A:73:GLY:HA2 | 1:A:73:GLY:HA3 | 3 | 0.45 |
| (2,1463) | 1:A:73:GLY:HA2 | 1:A:73:GLY:HA3 | 4 | 0.45 |
| (2,1463) | 1:A:73:GLY:HA2 | 1:A:73:GLY:HA3 | 5 | 0.45 |
| (2,1463) | 1:A:73:GLY:HA2 | 1:A:73:GLY:HA3 | 6 | 0.45 |
| (2,1463) | 1:A:73:GLY:HA2 | 1:A:73:GLY:HA3 | 7 | 0.45 |
| (2,1463) | 1:A:73:GLY:HA2 | 1:A:73:GLY:HA3 | 8 | 0.45 |
| (2,1463) | 1:A:73:GLY:HA2 | 1:A:73:GLY:HA3 | 9 | 0.45 |
| (2,1463) | 1:A:73:GLY:HA2 | 1:A:73:GLY:HA3 | 10 | 0.45 |
| (2,1463) | 1:A:73:GLY:HA2 | 1:A:73:GLY:HA3 | 11 | 0.45 |
| (2,1463) | 1:A:73:GLY:HA2 | 1:A:73:GLY:HA3 | 12 | 0.45 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1463) | 1:A:73:GLY:HA2 | 1:A:73:GLY:HA3 | 13 | 0.45 |
| (2,1463) | 1:A:73:GLY:HA2 | 1:A:73:GLY:HA3 | 14 | 0.45 |
| (2,1463) | 1:A:73:GLY:HA2 | 1:A:73:GLY:HA3 | 15 | 0.45 |
| (2,1463) | 1:A:73:GLY:HA2 | 1:A:73:GLY:HA3 | 16 | 0.45 |
| (2,1433) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:70:HIS:HD2 | 14 | 0.45 |
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:39:HIS:HB2 | 5 | 0.45 |
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:39:HIS:HB2 | 5 | 0.45 |
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:39:HIS:HB2 | 5 | 0.45 |
| (2,1386) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG12 | 1 | 0.45 |
| (2,1386) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG12 | 2 | 0.45 |
| (2,1386) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG12 | 3 | 0.45 |
| (2,1386) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG12 | 4 | 0.45 |
| (2,1386) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG12 | 5 | 0.45 |
| (2,1386) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG12 | 6 | 0.45 |
| (2,1386) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG12 | 7 | 0.45 |
| (2,1386) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG12 | 8 | 0.45 |
| (2,1386) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG12 | 10 | 0.45 |
| (2,1386) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG12 | 11 | 0.45 |
| (2,1386) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG12 | 12 | 0.45 |
| (2,1386) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG12 | 13 | 0.45 |
| (2,1386) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG12 | 14 | 0.45 |
| (2,1386) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG12 | 16 | 0.45 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG21 | 9 | 0.45 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG22 | 9 | 0.45 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG23 | 9 | 0.45 |
| (2,1332) | 1:A:94:LEU:HG | 1:A:94:LEU:H | 5 | 0.45 |
| (2,1332) | 1:A:94:LEU:HG | 1:A:94:LEU:H | 7 | 0.45 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD11 | 15 | 0.45 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD12 | 15 | 0.45 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD13 | 15 | 0.45 |
| (2,1294) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:HB3 | 1 | 0.45 |
| (2,1294) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:HB3 | 2 | 0.45 |
| (2,1294) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:HB3 | 3 | 0.45 |
| (2,1294) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:HB3 | 4 | 0.45 |
| (2,1294) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:HB3 | 5 | 0.45 |
| (2,1294) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:HB3 | 7 | 0.45 |
| (2,1294) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:HB3 | 8 | 0.45 |
| (2,1294) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:HB3 | 10 | 0.45 |
| (2,1294) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:HB3 | 14 | 0.45 |
| (2,1294) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:HB3 | 16 | 0.45 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD21 | 5 | 0.45 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD22 | 5 | 0.45 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD23 | 5 | 0.45 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD21 | 9 | 0.45 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD22 | 9 | 0.45 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD23 | 9 | 0.45 |
| (2,114) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:7:THR:H | 15 | 0.45 |
| (2,114) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:7:THR:H | 15 | 0.45 |
| (2,114) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:7:THR:H | 15 | 0.45 |
| (2,1094) | 1:A:56:ILE:HG12 | 1:A:56:ILE:HB | 1 | 0.45 |
| (2,1094) | 1:A:56:ILE:HG12 | 1:A:56:ILE:HB | 4 | 0.45 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:45:ILE:HG13 | 15 | 0.45 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:45:ILE:HG13 | 15 | 0.45 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:45:ILE:HG13 | 15 | 0.45 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:45:ILE:HG13 | 16 | 0.45 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:45:ILE:HG13 | 16 | 0.45 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:45:ILE:HG13 | 16 | 0.45 |
| (2,1011) | 1:A:75:ASP:HA | 1:A:74:LEU:HG | 7 | 0.45 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG21 | 15 | 0.45 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG22 | 15 | 0.45 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG23 | 15 | 0.45 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 10 | 0.45 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 10 | 0.45 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 10 | 0.45 |
| (1,557) | 1:A:23:GLN:H | 1:A:23:GLN:HG3 | 14 | 0.45 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 3 | 0.45 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 3 | 0.45 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 3 | 0.45 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 16 | 0.45 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 16 | 0.45 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 16 | 0.45 |
| (1,527) | 1:A:93:HIS:H | 1:A:92:GLN:HB3 | 4 | 0.45 |
| (1,527) | 1:A:93:HIS:H | 1:A:92:GLN:HB3 | 8 | 0.45 |
| (1,51) | 1:A:15:GLY:H | 1:A:14:ASN:HA | 13 | 0.45 |
| (1,451) | 1:A:10:ALA:H | 1:A:9:LEU:HB3 | 6 | 0.45 |
| (1,409) | 1:A:4:SER:H | 1:A:4:SER:HB2 | 12 | 0.45 |
| (1,40) | 1:A:16:LEU:H | 1:A:15:GLY:H | 4 | 0.45 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG21 | 4 | 0.45 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG22 | 4 | 0.45 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG23 | 4 | 0.45 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG21 | 4 | 0.45 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG22 | 4 | 0.45 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG23 | 4 | 0.45 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG21 | 11 | 0.45 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG22 | 11 | 0.45 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG23 | 11 | 0.45 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG21 | 15 | 0.45 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG22 | 15 | 0.45 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG23 | 15 | 0.45 |
| (1,349) | 1:A:17:SER:H | 1:A:20:GLN:HB2 | 12 | 0.45 |
| (1,349) | 1:A:17:SER:H | 1:A:20:GLN:HB2 | 14 | 0.45 |
| (1,336) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HB2 | 3 | 0.45 |
| (1,336) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HB2 | 5 | 0.45 |
| (1,336) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HB2 | 6 | 0.45 |
| (1,336) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HB2 | 9 | 0.45 |
| (1,336) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HB2 | 11 | 0.45 |
| (1,329) | 1:A:64:LEU:H | 1:A:63:GLU:HB2 | 14 | 0.45 |
| (1,286) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HB2 | 8 | 0.45 |
| (1,286) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HB2 | 10 | 0.45 |
| (1,286) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HB2 | 13 | 0.45 |
| (1,270) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:81:ILE:HG12 | 3 | 0.45 |
| (1,270) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:81:ILE:HG12 | 6 | 0.45 |
| (1,262) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:56:ILE:H | 4 | 0.45 |
| (1,262) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:56:ILE:H | 5 | 0.45 |
| (1,262) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:56:ILE:H | 6 | 0.45 |
| (1,208) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:47:PRO:HG3 | 5 | 0.45 |
| (1,162) | 1:A:46:SER:H | 1:A:46:SER:HB3 | 16 | 0.45 |
| (1,143) | 1:A:49:THR:H | 1:A:50:ALA:H | 9 | 0.45 |
| (1,113) | 1:A:88:HIS:H | 1:A:87:PRO:HD2 | 2 | 0.45 |
| (1,113) | 1:A:88:HIS:H | 1:A:87:PRO:HD2 | 10 | 0.45 |
| (1,113) | 1:A:88:HIS:H | 1:A:87:PRO:HD2 | 15 | 0.45 |
| (2,984) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HD1 | 2 | 0.44 |
| (2,984) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HD2 | 2 | 0.44 |
| (2,984) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HD1 | 14 | 0.44 |
| (2,984) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HD2 | 14 | 0.44 |
| (2,96) | 1:A:4:SER:HB3 | 1:A:7:THR:HB | 8 | 0.44 |
| (2,932) | 1:A:45:ILE:HG13 | 1:A:42:PRO:HA | 13 | 0.44 |
| (2,865) | 1:A:38:GLY:HA2 | 1:A:38:GLY:HA3 | 1 | 0.44 |
| (2,865) | 1:A:38:GLY:HA2 | 1:A:38:GLY:HA3 | 2 | 0.44 |
| (2,865) | 1:A:38:GLY:HA2 | 1:A:38:GLY:HA3 | 3 | 0.44 |
| (2,865) | 1:A:38:GLY:HA2 | 1:A:38:GLY:HA3 | 5 | 0.44 |
| (2,865) | 1:A:38:GLY:HA2 | 1:A:38:GLY:HA3 | 6 | 0.44 |
| (2,865) | 1:A:38:GLY:HA2 | 1:A:38:GLY:HA3 | 8 | 0.44 |
| (2,865) | 1:A:38:GLY:HA2 | 1:A:38:GLY:HA3 | 10 | 0.44 |
| (2,865) | 1:A:38:GLY:HA2 | 1:A:38:GLY:HA3 | 11 | 0.44 |
| (2,865) | 1:A:38:GLY:HA2 | 1:A:38:GLY:HA3 | 15 | 0.44 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,865) | 1:A:38:GLY:HA2 | 1:A:38:GLY:HA3 | 16 | 0.44 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:64:LEU:H | 8 | 0.44 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:64:LEU:H | 8 | 0.44 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:64:LEU:H | 8 | 0.44 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HA | 9 | 0.44 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HA | 9 | 0.44 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HA | 9 | 0.44 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HA | 10 | 0.44 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HA | 10 | 0.44 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HA | 10 | 0.44 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HA | 13 | 0.44 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HA | 13 | 0.44 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HA | 13 | 0.44 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HA | 15 | 0.44 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HA | 15 | 0.44 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HA | 15 | 0.44 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:45:ILE:HB | 5 | 0.44 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:45:ILE:HB | 5 | 0.44 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:45:ILE:HB | 5 | 0.44 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:45:ILE:HB | 9 | 0.44 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:45:ILE:HB | 9 | 0.44 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:45:ILE:HB | 9 | 0.44 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:45:ILE:HB | 16 | 0.44 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:45:ILE:HB | 16 | 0.44 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:45:ILE:HB | 16 | 0.44 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG21 | 2 | 0.44 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG22 | 2 | 0.44 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG23 | 2 | 0.44 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG21 | 5 | 0.44 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG22 | 5 | 0.44 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG23 | 5 | 0.44 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG21 | 10 | 0.44 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG22 | 10 | 0.44 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG23 | 10 | 0.44 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:71:ASN:HB3 | 2 | 0.44 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:71:ASN:HB3 | 2 | 0.44 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:71:ASN:HB3 | 2 | 0.44 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:71:ASN:HB3 | 4 | 0.44 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:71:ASN:HB3 | 4 | 0.44 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:71:ASN:HB3 | 4 | 0.44 |
| (2,638) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:45:ILE:HG13 | 1 | 0.44 |
| (2,638) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:45:ILE:HG13 | 2 | 0.44 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,638) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:45:ILE:HG13 | 3 | 0.44 |
| (2,638) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:45:ILE:HG13 | 4 | 0.44 |
| (2,638) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:45:ILE:HG13 | 5 | 0.44 |
| (2,638) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:45:ILE:HG13 | 6 | 0.44 |
| (2,638) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:45:ILE:HG13 | 7 | 0.44 |
| (2,638) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:45:ILE:HG13 | 8 | 0.44 |
| (2,638) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:45:ILE:HG13 | 9 | 0.44 |
| (2,638) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:45:ILE:HG13 | 10 | 0.44 |
| (2,638) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:45:ILE:HG13 | 11 | 0.44 |
| (2,638) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:45:ILE:HG13 | 12 | 0.44 |
| (2,638) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:45:ILE:HG13 | 13 | 0.44 |
| (2,638) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:45:ILE:HG13 | 14 | 0.44 |
| (2,638) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:45:ILE:HG13 | 15 | 0.44 |
| (2,638) | 1:A:45:ILE:HG12 | 1:A:45:ILE:HG13 | 16 | 0.44 |
| (2,508) | 1:A:23:GLN:HB3 | 1:A:20:GLN:HA | 8 | 0.44 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB1 | 1 | 0.44 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB2 | 1 | 0.44 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB3 | 1 | 0.44 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB1 | 2 | 0.44 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB2 | 2 | 0.44 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB3 | 2 | 0.44 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB1 | 4 | 0.44 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB2 | 4 | 0.44 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB3 | 4 | 0.44 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB1 | 8 | 0.44 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB2 | 8 | 0.44 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB3 | 8 | 0.44 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB1 | 13 | 0.44 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB2 | 13 | 0.44 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB3 | 13 | 0.44 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB1 | 15 | 0.44 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB2 | 15 | 0.44 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB3 | 15 | 0.44 |
| (2,471) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HB3 | 5 | 0.44 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:20:GLN:HB3 | 11 | 0.44 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:20:GLN:HB3 | 11 | 0.44 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:20:GLN:HB3 | 11 | 0.44 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG21 | 1 | 0.44 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG22 | 1 | 0.44 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG23 | 1 | 0.44 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG21 | 1 | 0.44 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG22 | 1 | 0.44 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG23 | 1 | 0.44 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG21 | 11 | 0.44 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG22 | 11 | 0.44 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG23 | 11 | 0.44 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG21 | 11 | 0.44 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG22 | 11 | 0.44 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG23 | 11 | 0.44 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG21 | 15 | 0.44 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG22 | 15 | 0.44 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG23 | 15 | 0.44 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG21 | 15 | 0.44 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG22 | 15 | 0.44 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG23 | 15 | 0.44 |
| (2,418) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 11 | 0.44 |
| (2,414) | 1:A:9:LEU:HA | 1:A:8:ASP:HB2 | 13 | 0.44 |
| (2,412) | 1:A:19:GLN:HB2 | 1:A:19:GLN:H | 8 | 0.44 |
| (2,412) | 1:A:19:GLN:HB2 | 1:A:19:GLN:H | 11 | 0.44 |
| (2,41) | 1:A:82:PHE:HD1 | 1:A:82:PHE:HB3 | 4 | 0.44 |
| (2,41) | 1:A:82:PHE:HD2 | 1:A:82:PHE:HB3 | 4 | 0.44 |
| (2,41) | 1:A:82:PHE:HD1 | 1:A:82:PHE:HB3 | 10 | 0.44 |
| (2,41) | 1:A:82:PHE:HD2 | 1:A:82:PHE:HB3 | 10 | 0.44 |
| (2,41) | 1:A:82:PHE:HD1 | 1:A:82:PHE:HB3 | 12 | 0.44 |
| (2,41) | 1:A:82:PHE:HD2 | 1:A:82:PHE:HB3 | 12 | 0.44 |
| (2,382) | 1:A:18:PRO:HG2 | 1:A:18:PRO:HG3 | 6 | 0.44 |
| (2,382) | 1:A:18:PRO:HG2 | 1:A:18:PRO:HG3 | 11 | 0.44 |
| (2,368) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:18:PRO:HB3 | 6 | 0.44 |
| (2,368) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:18:PRO:HB3 | 11 | 0.44 |
| (2,364) | 1:A:17:SER:HB2 | 1:A:17:SER:H | 8 | 0.44 |
| (2,364) | 1:A:17:SER:HB2 | 1:A:17:SER:H | 14 | 0.44 |
| (2,347) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:LEU:HD21 | 9 | 0.44 |
| (2,347) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:LEU:HD22 | 9 | 0.44 |
| (2,347) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:LEU:HD23 | 9 | 0.44 |
| (2,295) | 1:A:59:LEU:HB2 | 1:A:60:THR:H | 14 | 0.44 |
| (2,273) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:12:ARG:HD3 | 3 | 0.44 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB1 | 2 | 0.44 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB2 | 2 | 0.44 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB3 | 2 | 0.44 |
| (2,1881) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HG | 15 | 0.44 |
| (2,179) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:8:ASP:H | 16 | 0.44 |
| (2,1765) | 1:A:97:ARG:HD3 | 1:A:97:ARG:HA | 11 | 0.44 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG21 | 4 | 0.44 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG22 | 4 | 0.44 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG23 | 4 | 0.44 |
| (2,1729) | 1:A:93:HIS:HA | 1:A:90:LEU:HA | 10 | 0.44 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:86:THR:H | 8 | 0.44 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:86:THR:H | 8 | 0.44 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:86:THR:H | 8 | 0.44 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:86:THR:H | 9 | 0.44 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:86:THR:H | 9 | 0.44 |
| (2,1654) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:86:THR:H | 9 | 0.44 |
| (2,1641) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:47:PRO:HB3 | 2 | 0.44 |
| (2,1641) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:47:PRO:HB3 | 9 | 0.44 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 11 | 0.44 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 11 | 0.44 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 11 | 0.44 |
| (2,1625) | 1:A:87:PRO:HB2 | 1:A:88:HIS:H | 16 | 0.44 |
| (2,1564) | 1:A:82:PHE:HB3 | 1:A:82:PHE:HB2 | 3 | 0.44 |
| (2,1564) | 1:A:82:PHE:HB3 | 1:A:82:PHE:HB2 | 4 | 0.44 |
| (2,1564) | 1:A:82:PHE:HB3 | 1:A:82:PHE:HB2 | 5 | 0.44 |
| (2,1564) | 1:A:82:PHE:HB3 | 1:A:82:PHE:HB2 | 6 | 0.44 |
| (2,1564) | 1:A:82:PHE:HB3 | 1:A:82:PHE:HB2 | 7 | 0.44 |
| (2,1564) | 1:A:82:PHE:HB3 | 1:A:82:PHE:HB2 | 8 | 0.44 |
| (2,1564) | 1:A:82:PHE:HB3 | 1:A:82:PHE:HB2 | 9 | 0.44 |
| (2,1564) | 1:A:82:PHE:HB3 | 1:A:82:PHE:HB2 | 11 | 0.44 |
| (2,1564) | 1:A:82:PHE:HB3 | 1:A:82:PHE:HB2 | 12 | 0.44 |
| (2,1564) | 1:A:82:PHE:HB3 | 1:A:82:PHE:HB2 | 13 | 0.44 |
| (2,1564) | 1:A:82:PHE:HB3 | 1:A:82:PHE:HB2 | 14 | 0.44 |
| (2,1564) | 1:A:82:PHE:HB3 | 1:A:82:PHE:HB2 | 15 | 0.44 |
| (2,1564) | 1:A:82:PHE:HB3 | 1:A:82:PHE:HB2 | 16 | 0.44 |
| (2,1539) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:99:THR:H | 4 | 0.44 |
| (2,1530) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HB3 | 8 | 0.44 |
| (2,1521) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:21:GLN:HG2 | 5 | 0.44 |
| (2,1493) | 1:A:79:THR:HB | 1:A:82:PHE:HB2 | 2 | 0.44 |
| (2,1493) | 1:A:79:THR:HB | 1:A:82:PHE:HB2 | 6 | 0.44 |
| (2,1431) | 1:A:67:THR:HB | 1:A:71:ASN:HD21 | 11 | 0.44 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:54:LEU:H | 8 | 0.44 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:54:LEU:H | 8 | 0.44 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:54:LEU:H | 8 | 0.44 |
| (2,1402) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:44:SER:HB3 | 5 | 0.44 |
| (2,1402) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:44:SER:HB3 | 5 | 0.44 |
| (2,1402) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:44:SER:HB3 | 5 | 0.44 |
| (2,1386) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG12 | 9 | 0.44 |
| (2,1386) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG12 | 15 | 0.44 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB1 | 15 | 0.44 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB2 | 15 | 0.44 |
| (2,1385) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:61:ALA:HB3 | 15 | 0.44 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG21 | 8 | 0.44 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG22 | 8 | 0.44 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG23 | 8 | 0.44 |
| (2,1378) | 1:A:97:ARG:HB3 | 1:A:74:LEU:HD21 | 13 | 0.44 |
| (2,1378) | 1:A:97:ARG:HB3 | 1:A:74:LEU:HD22 | 13 | 0.44 |
| (2,1378) | 1:A:97:ARG:HB3 | 1:A:74:LEU:HD23 | 13 | 0.44 |
| (2,1377) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:74:LEU:HD21 | 10 | 0.44 |
| (2,1377) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:74:LEU:HD22 | 10 | 0.44 |
| (2,1377) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:74:LEU:HD23 | 10 | 0.44 |
| (2,1294) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:HB3 | 6 | 0.44 |
| (2,1294) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:HB3 | 9 | 0.44 |
| (2,1294) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:HB3 | 11 | 0.44 |
| (2,1294) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:HB3 | 12 | 0.44 |
| (2,1294) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:HB3 | 13 | 0.44 |
| (2,1294) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:66:ASN:HB3 | 15 | 0.44 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG21 | 1:A:63:GLU:HB2 | 7 | 0.44 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG22 | 1:A:63:GLU:HB2 | 7 | 0.44 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG23 | 1:A:63:GLU:HB2 | 7 | 0.44 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD21 | 2 | 0.44 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD22 | 2 | 0.44 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD23 | 2 | 0.44 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD21 | 11 | 0.44 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD22 | 11 | 0.44 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD23 | 11 | 0.44 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD21 | 13 | 0.44 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD22 | 13 | 0.44 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD23 | 13 | 0.44 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:51:PHE:HB3 | 9 | 0.44 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:51:PHE:HB3 | 9 | 0.44 |
| (2,1103) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:51:PHE:HB3 | 9 | 0.44 |
| (2,1094) | 1:A:56:ILE:HG12 | 1:A:56:ILE:HB | 5 | 0.44 |
| (2,1094) | 1:A:56:ILE:HG12 | 1:A:56:ILE:HB | 7 | 0.44 |
| (2,1094) | 1:A:56:ILE:HG12 | 1:A:56:ILE:HB | 8 | 0.44 |
| (2,1094) | 1:A:56:ILE:HG12 | 1:A:56:ILE:HB | 11 | 0.44 |
| (2,1094) | 1:A:56:ILE:HG12 | 1:A:56:ILE:HB | 13 | 0.44 |
| (2,1094) | 1:A:56:ILE:HG12 | 1:A:56:ILE:HB | 15 | 0.44 |
| (2,1094) | 1:A:56:ILE:HG12 | 1:A:56:ILE:HB | 16 | 0.44 |
| (2,1044) | 1:A:52:LYS:HB2 | 1:A:52:LYS:HE2 | 10 | 0.44 |
| (1,82) | 1:A:86:THR:H | 1:A:84:HIS:HB2 | 9 | 0.44 |
| (1,527) | 1:A:93:HIS:H | 1:A:92:GLN:HB3 | 7 | 0.44 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,479) | 1:A:68:LEU:H | 1:A:68:LEU:HG | 15 | 0.44 |
| (1,451) | 1:A:10:ALA:H | 1:A:9:LEU:HB3 | 3 | 0.44 |
| (1,451) | 1:A:10:ALA:H | 1:A:9:LEU:HB3 | 8 | 0.44 |
| (1,451) | 1:A:10:ALA:H | 1:A:9:LEU:HB3 | 10 | 0.44 |
| (1,451) | 1:A:10:ALA:H | 1:A:9:LEU:HB3 | 11 | 0.44 |
| (1,451) | 1:A:10:ALA:H | 1:A:9:LEU:HB3 | 12 | 0.44 |
| (1,409) | 1:A:4:SER:H | 1:A:4:SER:HB2 | 13 | 0.44 |
| (1,40) | 1:A:16:LEU:H | 1:A:15:GLY:H | 10 | 0.44 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG21 | 2 | 0.44 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG22 | 2 | 0.44 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG23 | 2 | 0.44 |
| (1,390) | 1:A:65:ARG:HE | 1:A:65:ARG:HD3 | 9 | 0.44 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG21 | 13 | 0.44 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG22 | 13 | 0.44 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG23 | 13 | 0.44 |
| (1,336) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HB2 | 1 | 0.44 |
| (1,336) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HB2 | 7 | 0.44 |
| (1,336) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HB2 | 8 | 0.44 |
| (1,336) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HB2 | 10 | 0.44 |
| (1,336) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HB2 | 14 | 0.44 |
| (1,329) | 1:A:64:LEU:H | 1:A:63:GLU:HB2 | 4 | 0.44 |
| (1,329) | 1:A:64:LEU:H | 1:A:63:GLU:HB2 | 6 | 0.44 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 15 | 0.44 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 15 | 0.44 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 15 | 0.44 |
| (1,286) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HB2 | 3 | 0.44 |
| (1,262) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:56:ILE:H | 12 | 0.44 |
| (1,262) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:56:ILE:H | 14 | 0.44 |
| (1,17) | 1:A:100:GLN:H | 1:A:99:THR:H | 8 | 0.44 |
| (1,162) | 1:A:46:SER:H | 1:A:46:SER:HB3 | 2 | 0.44 |
| (1,143) | 1:A:49:THR:H | 1:A:50:ALA:H | 1 | 0.44 |
| (1,113) | 1:A:88:HIS:H | 1:A:87:PRO:HD2 | 1 | 0.44 |
| (1,113) | 1:A:88:HIS:H | 1:A:87:PRO:HD2 | 3 | 0.44 |
| (1,113) | 1:A:88:HIS:H | 1:A:87:PRO:HD2 | 12 | 0.44 |
| (1,11) | 1:A:96:THR:H | 1:A:95:HIS:H | 4 | 0.44 |
| (1,11) | 1:A:96:THR:H | 1:A:95:HIS:H | 11 | 0.44 |
| (2,913) | 1:A:43:GLU:HG2 | 1:A:42:PRO:HA | 10 | 0.43 |
| (2,911) | 1:A:43:GLU:HB2 | 1:A:43:GLU:H | 8 | 0.43 |
| (2,911) | 1:A:43:GLU:HB2 | 1:A:43:GLU:H | 9 | 0.43 |
| (2,911) | 1:A:43:GLU:HB2 | 1:A:43:GLU:H | 11 | 0.43 |
| (2,894) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:43:GLU:HB2 | 9 | 0.43 |
| (2,890) | 1:A:41:THR:HA | 1:A:41:THR:HG21 | 7 | 0.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,890) | 1:A:41:THR:HA | 1:A:41:THR:HG22 | 7 | 0.43 |
| (2,890) | 1:A:41:THR:HA | 1:A:41:THR:HG23 | 7 | 0.43 |
| (2,888) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:41:THR:HA | 10 | 0.43 |
| (2,881) | 1:A:42:PRO:HD3 | 1:A:42:PRO:HD2 | 1 | 0.43 |
| (2,881) | 1:A:42:PRO:HD3 | 1:A:42:PRO:HD2 | 4 | 0.43 |
| (2,881) | 1:A:42:PRO:HD3 | 1:A:42:PRO:HD2 | 6 | 0.43 |
| (2,881) | 1:A:42:PRO:HD3 | 1:A:42:PRO:HD2 | 7 | 0.43 |
| (2,881) | 1:A:42:PRO:HD3 | 1:A:42:PRO:HD2 | 10 | 0.43 |
| (2,881) | 1:A:42:PRO:HD3 | 1:A:42:PRO:HD2 | 11 | 0.43 |
| (2,881) | 1:A:42:PRO:HD3 | 1:A:42:PRO:HD2 | 12 | 0.43 |
| (2,881) | 1:A:42:PRO:HD3 | 1:A:42:PRO:HD2 | 13 | 0.43 |
| (2,881) | 1:A:42:PRO:HD3 | 1:A:42:PRO:HD2 | 14 | 0.43 |
| (2,881) | 1:A:42:PRO:HD3 | 1:A:42:PRO:HD2 | 16 | 0.43 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG21 | 10 | 0.43 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG22 | 10 | 0.43 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG23 | 10 | 0.43 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HA | 14 | 0.43 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HA | 14 | 0.43 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HA | 14 | 0.43 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:45:ILE:HB | 6 | 0.43 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:45:ILE:HB | 6 | 0.43 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:45:ILE:HB | 6 | 0.43 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG21 | 12 | 0.43 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG22 | 12 | 0.43 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG23 | 12 | 0.43 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG21 | 16 | 0.43 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG22 | 16 | 0.43 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG23 | 16 | 0.43 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:10:ALA:H | 4 | 0.43 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:10:ALA:H | 4 | 0.43 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:10:ALA:H | 4 | 0.43 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:10:ALA:H | 10 | 0.43 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:10:ALA:H | 10 | 0.43 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:10:ALA:H | 10 | 0.43 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HE1 | 8 | 0.43 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HE2 | 8 | 0.43 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HE1 | 8 | 0.43 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HE2 | 8 | 0.43 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HE1 | 9 | 0.43 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HE2 | 9 | 0.43 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HE1 | 9 | 0.43 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HE2 | 9 | 0.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB1 | 11 | 0.43 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB2 | 11 | 0.43 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB3 | 11 | 0.43 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB1 | 12 | 0.43 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB2 | 12 | 0.43 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB3 | 12 | 0.43 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB1 | 14 | 0.43 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB2 | 14 | 0.43 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB3 | 14 | 0.43 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB1 | 16 | 0.43 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB2 | 16 | 0.43 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB3 | 16 | 0.43 |
| (2,494) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:23:GLN:H | 13 | 0.43 |
| (2,412) | 1:A:19:GLN:HB2 | 1:A:19:GLN:H | 6 | 0.43 |
| (2,41) | 1:A:82:PHE:HD1 | 1:A:82:PHE:HB3 | 2 | 0.43 |
| (2,41) | 1:A:82:PHE:HD2 | 1:A:82:PHE:HB3 | 2 | 0.43 |
| (2,41) | 1:A:82:PHE:HD1 | 1:A:82:PHE:HB3 | 8 | 0.43 |
| (2,41) | 1:A:82:PHE:HD2 | 1:A:82:PHE:HB3 | 8 | 0.43 |
| (2,41) | 1:A:82:PHE:HD1 | 1:A:82:PHE:HB3 | 11 | 0.43 |
| (2,41) | 1:A:82:PHE:HD2 | 1:A:82:PHE:HB3 | 11 | 0.43 |
| (2,41) | 1:A:82:PHE:HD1 | 1:A:82:PHE:HB3 | 13 | 0.43 |
| (2,41) | 1:A:82:PHE:HD2 | 1:A:82:PHE:HB3 | 13 | 0.43 |
| (2,41) | 1:A:82:PHE:HD1 | 1:A:82:PHE:HB3 | 14 | 0.43 |
| (2,41) | 1:A:82:PHE:HD2 | 1:A:82:PHE:HB3 | 14 | 0.43 |
| (2,41) | 1:A:82:PHE:HD1 | 1:A:82:PHE:HB3 | 16 | 0.43 |
| (2,41) | 1:A:82:PHE:HD2 | 1:A:82:PHE:HB3 | 16 | 0.43 |
| (2,382) | 1:A:18:PRO:HG2 | 1:A:18:PRO:HG3 | 3 | 0.43 |
| (2,382) | 1:A:18:PRO:HG2 | 1:A:18:PRO:HG3 | 4 | 0.43 |
| (2,382) | 1:A:18:PRO:HG2 | 1:A:18:PRO:HG3 | 5 | 0.43 |
| (2,382) | 1:A:18:PRO:HG2 | 1:A:18:PRO:HG3 | 8 | 0.43 |
| (2,382) | 1:A:18:PRO:HG2 | 1:A:18:PRO:HG3 | 9 | 0.43 |
| (2,382) | 1:A:18:PRO:HG2 | 1:A:18:PRO:HG3 | 12 | 0.43 |
| (2,382) | 1:A:18:PRO:HG2 | 1:A:18:PRO:HG3 | 13 | 0.43 |
| (2,382) | 1:A:18:PRO:HG2 | 1:A:18:PRO:HG3 | 14 | 0.43 |
| (2,382) | 1:A:18:PRO:HG2 | 1:A:18:PRO:HG3 | 15 | 0.43 |
| (2,382) | 1:A:18:PRO:HG2 | 1:A:18:PRO:HG3 | 16 | 0.43 |
| (2,364) | 1:A:17:SER:HB2 | 1:A:17:SER:H | 11 | 0.43 |
| (2,356) | 1:A:16:LEU:HG | 1:A:16:LEU:HB3 | 1 | 0.43 |
| (2,347) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:LEU:HD21 | 12 | 0.43 |
| (2,347) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:LEU:HD22 | 12 | 0.43 |
| (2,347) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:LEU:HD23 | 12 | 0.43 |
| (2,347) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:LEU:HD21 | 14 | 0.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,347) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:LEU:HD22 | 14 | 0.43 |
| (2,347) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:LEU:HD23 | 14 | 0.43 |
| (2,337) | 1:A:11:ALA:HA | 1:A:14:ASN:HB2 | 16 | 0.43 |
| (2,335) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 2 | 0.43 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD21 | 16 | 0.43 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD22 | 16 | 0.43 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD23 | 16 | 0.43 |
| (2,311) | 1:A:85:PRO:HD2 | 1:A:85:PRO:HD3 | 1 | 0.43 |
| (2,311) | 1:A:85:PRO:HD2 | 1:A:85:PRO:HD3 | 2 | 0.43 |
| (2,311) | 1:A:85:PRO:HD2 | 1:A:85:PRO:HD3 | 4 | 0.43 |
| (2,311) | 1:A:85:PRO:HD2 | 1:A:85:PRO:HD3 | 5 | 0.43 |
| (2,311) | 1:A:85:PRO:HD2 | 1:A:85:PRO:HD3 | 6 | 0.43 |
| (2,311) | 1:A:85:PRO:HD2 | 1:A:85:PRO:HD3 | 7 | 0.43 |
| (2,311) | 1:A:85:PRO:HD2 | 1:A:85:PRO:HD3 | 8 | 0.43 |
| (2,311) | 1:A:85:PRO:HD2 | 1:A:85:PRO:HD3 | 9 | 0.43 |
| (2,311) | 1:A:85:PRO:HD2 | 1:A:85:PRO:HD3 | 10 | 0.43 |
| (2,311) | 1:A:85:PRO:HD2 | 1:A:85:PRO:HD3 | 11 | 0.43 |
| (2,311) | 1:A:85:PRO:HD2 | 1:A:85:PRO:HD3 | 12 | 0.43 |
| (2,311) | 1:A:85:PRO:HD2 | 1:A:85:PRO:HD3 | 13 | 0.43 |
| (2,311) | 1:A:85:PRO:HD2 | 1:A:85:PRO:HD3 | 14 | 0.43 |
| (2,311) | 1:A:85:PRO:HD2 | 1:A:85:PRO:HD3 | 15 | 0.43 |
| (2,311) | 1:A:85:PRO:HD2 | 1:A:85:PRO:HD3 | 16 | 0.43 |
| (2,19) | 1:A:102:HIS:HB3 | 1:A:102:HIS:HD2 | 8 | 0.43 |
| (2,1858) | 1:A:25:LEU:HG | 1:A:21:GLN:HA | 4 | 0.43 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:9:LEU:HA | 3 | 0.43 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:9:LEU:HA | 3 | 0.43 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:9:LEU:HA | 3 | 0.43 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:9:LEU:HA | 4 | 0.43 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:9:LEU:HA | 4 | 0.43 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:9:LEU:HA | 4 | 0.43 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:9:LEU:HA | 15 | 0.43 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:9:LEU:HA | 15 | 0.43 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:9:LEU:HA | 15 | 0.43 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:9:LEU:HA | 16 | 0.43 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:9:LEU:HA | 16 | 0.43 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:9:LEU:HA | 16 | 0.43 |
| (2,179) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:8:ASP:H | 11 | 0.43 |
| (2,179) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:8:ASP:H | 12 | 0.43 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG21 | 11 | 0.43 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG22 | 11 | 0.43 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG23 | 11 | 0.43 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HZ | 2 | 0.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HZ | 2 | 0.43 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HZ | 2 | 0.43 |
| (2,1524) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:16:LEU:HA | 11 | 0.43 |
| (2,1521) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:21:GLN:HG2 | 10 | 0.43 |
| (2,1519) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:21:GLN:HG3 | 6 | 0.43 |
| (2,1493) | 1:A:79:THR:HB | 1:A:82:PHE:HB2 | 16 | 0.43 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 8 | 0.43 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 8 | 0.43 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 8 | 0.43 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 8 | 0.43 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 8 | 0.43 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 8 | 0.43 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 8 | 0.43 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 8 | 0.43 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 8 | 0.43 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:54:LEU:H | 9 | 0.43 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:54:LEU:H | 9 | 0.43 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:54:LEU:H | 9 | 0.43 |
| (2,1327) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:68:LEU:H | 7 | 0.43 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 7 | 0.43 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 7 | 0.43 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 7 | 0.43 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG21 | 1:A:63:GLU:HB2 | 1 | 0.43 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG22 | 1:A:63:GLU:HB2 | 1 | 0.43 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG23 | 1:A:63:GLU:HB2 | 1 | 0.43 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD21 | 1 | 0.43 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD22 | 1 | 0.43 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD23 | 1 | 0.43 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD21 | 12 | 0.43 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD22 | 12 | 0.43 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD23 | 12 | 0.43 |
| (2,1094) | 1:A:56:ILE:HG12 | 1:A:56:ILE:HB | 3 | 0.43 |
| (2,1094) | 1:A:56:ILE:HG12 | 1:A:56:ILE:HB | 6 | 0.43 |
| (2,1094) | 1:A:56:ILE:HG12 | 1:A:56:ILE:HB | 10 | 0.43 |
| (2,1094) | 1:A:56:ILE:HG12 | 1:A:56:ILE:HB | 12 | 0.43 |
| (2,1094) | 1:A:56:ILE:HG12 | 1:A:56:ILE:HB | 14 | 0.43 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:45:ILE:HG13 | 1 | 0.43 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:45:ILE:HG13 | 1 | 0.43 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:45:ILE:HG13 | 1 | 0.43 |
| (1,82) | 1:A:86:THR:H | 1:A:84:HIS:HB2 | 8 | 0.43 |
| (1,602) | 1:A:57:ASP:H | 1:A:57:ASP:HB3 | 7 | 0.43 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 8 | 0.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 8 | 0.43 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 8 | 0.43 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 1 | 0.43 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 1 | 0.43 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 1 | 0.43 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 12 | 0.43 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 12 | 0.43 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 12 | 0.43 |
| (1,527) | 1:A:93:HIS:H | 1:A:92:GLN:HB3 | 6 | 0.43 |
| (1,451) | 1:A:10:ALA:H | 1:A:9:LEU:HB3 | 2 | 0.43 |
| (1,451) | 1:A:10:ALA:H | 1:A:9:LEU:HB3 | 4 | 0.43 |
| (1,368) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:93:HIS:HB3 | 14 | 0.43 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG21 | 12 | 0.43 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG22 | 12 | 0.43 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG23 | 12 | 0.43 |
| (1,349) | 1:A:17:SER:H | 1:A:20:GLN:HB2 | 8 | 0.43 |
| (1,349) | 1:A:17:SER:H | 1:A:20:GLN:HB2 | 16 | 0.43 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD21 | 3 | 0.43 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD22 | 3 | 0.43 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD23 | 3 | 0.43 |
| (1,336) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HB2 | 2 | 0.43 |
| (1,336) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HB2 | 4 | 0.43 |
| (1,336) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HB2 | 15 | 0.43 |
| (1,336) | 1:A:29:VAL:H | 1:A:28:LEU:HB2 | 16 | 0.43 |
| (1,33) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:55:GLY:H | 5 | 0.43 |
| (1,329) | 1:A:64:LEU:H | 1:A:63:GLU:HB2 | 2 | 0.43 |
| (1,329) | 1:A:64:LEU:H | 1:A:63:GLU:HB2 | 5 | 0.43 |
| (1,329) | 1:A:64:LEU:H | 1:A:63:GLU:HB2 | 9 | 0.43 |
| (1,304) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HB2 | 4 | 0.43 |
| (1,304) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HB2 | 8 | 0.43 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 7 | 0.43 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 7 | 0.43 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 7 | 0.43 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 16 | 0.43 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 16 | 0.43 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 16 | 0.43 |
| (1,286) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HB2 | 9 | 0.43 |
| (1,282) | 1:A:14:ASN:HD21 | 1:A:11:ALA:HA | 8 | 0.43 |
| (1,270) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:81:ILE:HG12 | 5 | 0.43 |
| (1,270) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:81:ILE:HG12 | 7 | 0.43 |
| (1,270) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:81:ILE:HG12 | 10 | 0.43 |
| (1,22) | 1:A:43:GLU:H | 1:A:44:SER:H | 7 | 0.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,113) | 1:A:88:HIS:H | 1:A:87:PRO:HD2 | 7 | 0.43 |
| (1,113) | 1:A:88:HIS:H | 1:A:87:PRO:HD2 | 11 | 0.43 |
| (1,113) | 1:A:88:HIS:H | 1:A:87:PRO:HD2 | 13 | 0.43 |
| (1,11) | 1:A:96:THR:H | 1:A:95:HIS:H | 2 | 0.43 |
| (2,996) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:53:ASP:HB3 | 1 | 0.42 |
| (2,996) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:53:ASP:HB3 | 1 | 0.42 |
| (2,996) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:53:ASP:HB3 | 1 | 0.42 |
| (2,980) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:54:LEU:HG | 9 | 0.42 |
| (2,957) | 1:A:47:PRO:HD3 | 1:A:47:PRO:HD2 | 1 | 0.42 |
| (2,957) | 1:A:47:PRO:HD3 | 1:A:47:PRO:HD2 | 2 | 0.42 |
| (2,957) | 1:A:47:PRO:HD3 | 1:A:47:PRO:HD2 | 3 | 0.42 |
| (2,957) | 1:A:47:PRO:HD3 | 1:A:47:PRO:HD2 | 4 | 0.42 |
| (2,957) | 1:A:47:PRO:HD3 | 1:A:47:PRO:HD2 | 5 | 0.42 |
| (2,957) | 1:A:47:PRO:HD3 | 1:A:47:PRO:HD2 | 6 | 0.42 |
| (2,957) | 1:A:47:PRO:HD3 | 1:A:47:PRO:HD2 | 7 | 0.42 |
| (2,957) | 1:A:47:PRO:HD3 | 1:A:47:PRO:HD2 | 8 | 0.42 |
| (2,957) | 1:A:47:PRO:HD3 | 1:A:47:PRO:HD2 | 9 | 0.42 |
| (2,957) | 1:A:47:PRO:HD3 | 1:A:47:PRO:HD2 | 10 | 0.42 |
| (2,957) | 1:A:47:PRO:HD3 | 1:A:47:PRO:HD2 | 11 | 0.42 |
| (2,957) | 1:A:47:PRO:HD3 | 1:A:47:PRO:HD2 | 12 | 0.42 |
| (2,957) | 1:A:47:PRO:HD3 | 1:A:47:PRO:HD2 | 13 | 0.42 |
| (2,957) | 1:A:47:PRO:HD3 | 1:A:47:PRO:HD2 | 14 | 0.42 |
| (2,957) | 1:A:47:PRO:HD3 | 1:A:47:PRO:HD2 | 15 | 0.42 |
| (2,957) | 1:A:47:PRO:HD3 | 1:A:47:PRO:HD2 | 16 | 0.42 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB1 | 16 | 0.42 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB2 | 16 | 0.42 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB3 | 16 | 0.42 |
| (2,946) | 1:A:47:PRO:HD3 | 1:A:46:SER:HA | 8 | 0.42 |
| (2,946) | 1:A:47:PRO:HD3 | 1:A:46:SER:HA | 11 | 0.42 |
| (2,923) | 1:A:101:SER:HB2 | 1:A:102:HIS:H | 5 | 0.42 |
| (2,911) | 1:A:43:GLU:HB2 | 1:A:43:GLU:H | 15 | 0.42 |
| (2,881) | 1:A:42:PRO:HD3 | 1:A:42:PRO:HD2 | 2 | 0.42 |
| (2,881) | 1:A:42:PRO:HD3 | 1:A:42:PRO:HD2 | 3 | 0.42 |
| (2,881) | 1:A:42:PRO:HD3 | 1:A:42:PRO:HD2 | 5 | 0.42 |
| (2,881) | 1:A:42:PRO:HD3 | 1:A:42:PRO:HD2 | 8 | 0.42 |
| (2,881) | 1:A:42:PRO:HD3 | 1:A:42:PRO:HD2 | 9 | 0.42 |
| (2,881) | 1:A:42:PRO:HD3 | 1:A:42:PRO:HD2 | 15 | 0.42 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:45:ILE:HB | 4 | 0.42 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:45:ILE:HB | 4 | 0.42 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:45:ILE:HB | 4 | 0.42 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:45:ILE:HB | 13 | 0.42 |
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:45:ILE:HB | 13 | 0.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,715) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:45:ILE:HB | 13 | 0.42 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG21 | 3 | 0.42 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG22 | 3 | 0.42 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG23 | 3 | 0.42 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG21 | 6 | 0.42 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG22 | 6 | 0.42 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG23 | 6 | 0.42 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG21 | 9 | 0.42 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG22 | 9 | 0.42 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG23 | 9 | 0.42 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:33:THR:HG1 | 14 | 0.42 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:33:THR:HG1 | 14 | 0.42 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:33:THR:HG1 | 14 | 0.42 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:71:ASN:HB3 | 1 | 0.42 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:71:ASN:HB3 | 1 | 0.42 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:71:ASN:HB3 | 1 | 0.42 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:71:ASN:HB3 | 5 | 0.42 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:71:ASN:HB3 | 5 | 0.42 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:71:ASN:HB3 | 5 | 0.42 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:10:ALA:H | 2 | 0.42 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:10:ALA:H | 2 | 0.42 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:10:ALA:H | 2 | 0.42 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:10:ALA:H | 14 | 0.42 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:10:ALA:H | 14 | 0.42 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:10:ALA:H | 14 | 0.42 |
| (2,571) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:ALA:H | 8 | 0.42 |
| (2,547) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:29:VAL:H | 4 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HE1 | 1 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HE2 | 1 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HE1 | 1 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HE2 | 1 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HE1 | 2 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HE2 | 2 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HE1 | 2 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HE2 | 2 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HE1 | 3 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HE2 | 3 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HE1 | 3 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HE2 | 3 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HE1 | 4 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HE2 | 4 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HE1 | 4 | 0.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HE2 | 4 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HE1 | 5 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HE2 | 5 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HE1 | 5 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HE2 | 5 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HE1 | 6 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HE2 | 6 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HE1 | 6 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HE2 | 6 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HE1 | 7 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HE2 | 7 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HE1 | 7 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HE2 | 7 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HE1 | 10 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HE2 | 10 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HE1 | 10 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HE2 | 10 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HE1 | 11 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HE2 | 11 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HE1 | 11 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HE2 | 11 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HE1 | 12 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HE2 | 12 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HE1 | 12 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HE2 | 12 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HE1 | 13 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HE2 | 13 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HE1 | 13 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HE2 | 13 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HE1 | 14 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HE2 | 14 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HE1 | 14 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HE2 | 14 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HE1 | 15 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HE2 | 15 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HE1 | 15 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HE2 | 15 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HE1 | 16 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HE2 | 16 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HE1 | 16 | 0.42 |
| (2,53) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HE2 | 16 | 0.42 |
| (2,508) | 1:A:23:GLN:HB3 | 1:A:20:GLN:HA | 5 | 0.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB1 | 3 | 0.42 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB2 | 3 | 0.42 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB3 | 3 | 0.42 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB1 | 6 | 0.42 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB2 | 6 | 0.42 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB3 | 6 | 0.42 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB1 | 10 | 0.42 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB2 | 10 | 0.42 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB3 | 10 | 0.42 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD21 | 6 | 0.42 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD22 | 6 | 0.42 |
| (2,463) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:16:LEU:HD23 | 6 | 0.42 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:20:GLN:HB3 | 12 | 0.42 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:20:GLN:HB3 | 12 | 0.42 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:20:GLN:HB3 | 12 | 0.42 |
| (2,449) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:H | 7 | 0.42 |
| (2,414) | 1:A:9:LEU:HA | 1:A:8:ASP:HB2 | 16 | 0.42 |
| (2,412) | 1:A:19:GLN:HB2 | 1:A:19:GLN:H | 2 | 0.42 |
| (2,412) | 1:A:19:GLN:HB2 | 1:A:19:GLN:H | 9 | 0.42 |
| (2,41) | 1:A:82:PHE:HD1 | 1:A:82:PHE:HB3 | 3 | 0.42 |
| (2,41) | 1:A:82:PHE:HD2 | 1:A:82:PHE:HB3 | 3 | 0.42 |
| (2,41) | 1:A:82:PHE:HD1 | 1:A:82:PHE:HB3 | 5 | 0.42 |
| (2,41) | 1:A:82:PHE:HD2 | 1:A:82:PHE:HB3 | 5 | 0.42 |
| (2,41) | 1:A:82:PHE:HD1 | 1:A:82:PHE:HB3 | 7 | 0.42 |
| (2,41) | 1:A:82:PHE:HD2 | 1:A:82:PHE:HB3 | 7 | 0.42 |
| (2,41) | 1:A:82:PHE:HD1 | 1:A:82:PHE:HB3 | 15 | 0.42 |
| (2,41) | 1:A:82:PHE:HD2 | 1:A:82:PHE:HB3 | 15 | 0.42 |
| (2,382) | 1:A:18:PRO:HG2 | 1:A:18:PRO:HG3 | 1 | 0.42 |
| (2,382) | 1:A:18:PRO:HG2 | 1:A:18:PRO:HG3 | 2 | 0.42 |
| (2,382) | 1:A:18:PRO:HG2 | 1:A:18:PRO:HG3 | 7 | 0.42 |
| (2,382) | 1:A:18:PRO:HG2 | 1:A:18:PRO:HG3 | 10 | 0.42 |
| (2,364) | 1:A:17:SER:HB2 | 1:A:17:SER:H | 6 | 0.42 |
| (2,356) | 1:A:16:LEU:HG | 1:A:16:LEU:HB3 | 2 | 0.42 |
| (2,356) | 1:A:16:LEU:HG | 1:A:16:LEU:HB3 | 7 | 0.42 |
| (2,356) | 1:A:16:LEU:HG | 1:A:16:LEU:HB3 | 8 | 0.42 |
| (2,356) | 1:A:16:LEU:HG | 1:A:16:LEU:HB3 | 14 | 0.42 |
| (2,335) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 1 | 0.42 |
| (2,335) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 7 | 0.42 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD21 | 2 | 0.42 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD22 | 2 | 0.42 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD23 | 2 | 0.42 |
| (2,311) | 1:A:85:PRO:HD2 | 1:A:85:PRO:HD3 | 3 | 0.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,31) | 1:A:39:HIS:HD2 | 1:A:37:LEU:HB3 | 6 | 0.42 |
| (2,292) | 1:A:68:LEU:HB2 | 1:A:65:ARG:HA | 13 | 0.42 |
| (2,276) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:9:LEU:HD11 | 6 | 0.42 |
| (2,276) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:9:LEU:HD12 | 6 | 0.42 |
| (2,276) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:9:LEU:HD13 | 6 | 0.42 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HB2 | 10 | 0.42 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HB2 | 10 | 0.42 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HB2 | 10 | 0.42 |
| (2,1881) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HG | 10 | 0.42 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:9:LEU:HA | 1 | 0.42 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:9:LEU:HA | 1 | 0.42 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:9:LEU:HA | 1 | 0.42 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:9:LEU:HA | 7 | 0.42 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:9:LEU:HA | 7 | 0.42 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:9:LEU:HA | 7 | 0.42 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:9:LEU:HA | 11 | 0.42 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:9:LEU:HA | 11 | 0.42 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:9:LEU:HA | 11 | 0.42 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:9:LEU:HA | 12 | 0.42 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:9:LEU:HA | 12 | 0.42 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:9:LEU:HA | 12 | 0.42 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:9:LEU:HA | 13 | 0.42 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:9:LEU:HA | 13 | 0.42 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:9:LEU:HA | 13 | 0.42 |
| (2,1801) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:96:THR:HG21 | 12 | 0.42 |
| (2,1801) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:96:THR:HG22 | 12 | 0.42 |
| (2,1801) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:96:THR:HG23 | 12 | 0.42 |
| (2,1801) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:96:THR:HG21 | 16 | 0.42 |
| (2,1801) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:96:THR:HG22 | 16 | 0.42 |
| (2,1801) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:96:THR:HG23 | 16 | 0.42 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:99:THR:H | 6 | 0.42 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:99:THR:H | 6 | 0.42 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:99:THR:H | 6 | 0.42 |
| (2,179) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:8:ASP:H | 4 | 0.42 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG21 | 5 | 0.42 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG22 | 5 | 0.42 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG23 | 5 | 0.42 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG21 | 7 | 0.42 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG22 | 7 | 0.42 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG23 | 7 | 0.42 |
| (2,1729) | 1:A:93:HIS:HA | 1:A:90:LEU:HA | 6 | 0.42 |
| (2,1697) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:94:LEU:HB3 | 8 | 0.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1625) | 1:A:87:PRO:HB2 | 1:A:88:HIS:H | 2 | 0.42 |
| (2,1481) | 1:A:78:PRO:HA | 1:A:80:LEU:H | 14 | 0.42 |
| (2,1480) | 1:A:78:PRO:HA | 1:A:79:THR:H | 16 | 0.42 |
| (2,1423) | 1:A:93:HIS:HD2 | 1:A:93:HIS:HB3 | 7 | 0.42 |
| (2,141) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:43:GLU:HG2 | 12 | 0.42 |
| (2,141) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:43:GLU:HG2 | 12 | 0.42 |
| (2,141) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:43:GLU:HG2 | 12 | 0.42 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:54:LEU:H | 4 | 0.42 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:54:LEU:H | 4 | 0.42 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:54:LEU:H | 4 | 0.42 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD11 | 4 | 0.42 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD12 | 4 | 0.42 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD13 | 4 | 0.42 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD21 | 15 | 0.42 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD22 | 15 | 0.42 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD23 | 15 | 0.42 |
| (2,1094) | 1:A:56:ILE:HG12 | 1:A:56:ILE:HB | 2 | 0.42 |
| (2,1030) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG13 | 9 | 0.42 |
| (1,80) | 1:A:86:THR:H | 1:A:85:PRO:HD2 | 14 | 0.42 |
| (1,590) | 1:A:96:THR:H | 1:A:97:ARG:H | 16 | 0.42 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 12 | 0.42 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 12 | 0.42 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 12 | 0.42 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 2 | 0.42 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 2 | 0.42 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 2 | 0.42 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 9 | 0.42 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 9 | 0.42 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 9 | 0.42 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 13 | 0.42 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 13 | 0.42 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 13 | 0.42 |
| (1,527) | 1:A:93:HIS:H | 1:A:92:GLN:HB3 | 12 | 0.42 |
| (1,479) | 1:A:68:LEU:H | 1:A:68:LEU:HG | 1 | 0.42 |
| (1,451) | 1:A:10:ALA:H | 1:A:9:LEU:HB3 | 5 | 0.42 |
| (1,451) | 1:A:10:ALA:H | 1:A:9:LEU:HB3 | 15 | 0.42 |
| (1,415) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HB2 | 7 | 0.42 |
| (1,414) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HB3 | 5 | 0.42 |
| (1,414) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HB3 | 9 | 0.42 |
| (1,414) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HB3 | 13 | 0.42 |
| (1,414) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HB3 | 14 | 0.42 |
| (1,40) | 1:A:16:LEU:H | 1:A:15:GLY:H | 9 | 0.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,40) | 1:A:16:LEU:H | 1:A:15:GLY:H | 13 | 0.42 |
| (1,368) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:93:HIS:HB3 | 10 | 0.42 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD21 | 7 | 0.42 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD22 | 7 | 0.42 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD23 | 7 | 0.42 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD21 | 11 | 0.42 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD22 | 11 | 0.42 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD23 | 11 | 0.42 |
| (1,33) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:55:GLY:H | 3 | 0.42 |
| (1,33) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:55:GLY:H | 11 | 0.42 |
| (1,329) | 1:A:64:LEU:H | 1:A:63:GLU:HB2 | 1 | 0.42 |
| (1,329) | 1:A:64:LEU:H | 1:A:63:GLU:HB2 | 7 | 0.42 |
| (1,329) | 1:A:64:LEU:H | 1:A:63:GLU:HB2 | 10 | 0.42 |
| (1,329) | 1:A:64:LEU:H | 1:A:63:GLU:HB2 | 12 | 0.42 |
| (1,329) | 1:A:64:LEU:H | 1:A:63:GLU:HB2 | 13 | 0.42 |
| (1,329) | 1:A:64:LEU:H | 1:A:63:GLU:HB2 | 16 | 0.42 |
| (1,304) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HB2 | 5 | 0.42 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 6 | 0.42 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 6 | 0.42 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 6 | 0.42 |
| (1,286) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HB2 | 14 | 0.42 |
| (1,270) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:81:ILE:HG12 | 12 | 0.42 |
| (1,262) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:56:ILE:H | 1 | 0.42 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG21 | 6 | 0.42 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG22 | 6 | 0.42 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG23 | 6 | 0.42 |
| (1,239) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG13 | 13 | 0.42 |
| (1,21) | 1:A:7:THR:H | 1:A:6:ALA:H | 9 | 0.42 |
| (1,208) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:47:PRO:HG3 | 3 | 0.42 |
| (1,162) | 1:A:46:SER:H | 1:A:46:SER:HB3 | 3 | 0.42 |
| (1,113) | 1:A:88:HIS:H | 1:A:87:PRO:HD2 | 14 | 0.42 |
| (1,11) | 1:A:96:THR:H | 1:A:95:HIS:H | 5 | 0.42 |
| (1,11) | 1:A:96:THR:H | 1:A:95:HIS:H | 16 | 0.42 |
| (2,946) | 1:A:47:PRO:HD3 | 1:A:46:SER:HA | 3 | 0.41 |
| (2,92) | 1:A:4:SER:HA | 1:A:3:ALA:HB1 | 14 | 0.41 |
| (2,92) | 1:A:4:SER:HA | 1:A:3:ALA:HB2 | 14 | 0.41 |
| (2,92) | 1:A:4:SER:HA | 1:A:3:ALA:HB3 | 14 | 0.41 |
| (2,890) | 1:A:41:THR:HA | 1:A:41:THR:HG21 | 10 | 0.41 |
| (2,890) | 1:A:41:THR:HA | 1:A:41:THR:HG22 | 10 | 0.41 |
| (2,890) | 1:A:41:THR:HA | 1:A:41:THR:HG23 | 10 | 0.41 |
| (2,745) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HA | 9 | 0.41 |
| (2,745) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HA | 11 | 0.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG21 | 1 | 0.41 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG22 | 1 | 0.41 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG23 | 1 | 0.41 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG21 | 7 | 0.41 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG22 | 7 | 0.41 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG23 | 7 | 0.41 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG21 | 11 | 0.41 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG22 | 11 | 0.41 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG23 | 11 | 0.41 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG21 | 15 | 0.41 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG22 | 15 | 0.41 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG23 | 15 | 0.41 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:33:THR:HG1 | 10 | 0.41 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:33:THR:HG1 | 10 | 0.41 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:33:THR:HG1 | 10 | 0.41 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:33:THR:HG1 | 13 | 0.41 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:33:THR:HG1 | 13 | 0.41 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:33:THR:HG1 | 13 | 0.41 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:10:ALA:H | 1 | 0.41 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:10:ALA:H | 1 | 0.41 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:10:ALA:H | 1 | 0.41 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:10:ALA:H | 6 | 0.41 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:10:ALA:H | 6 | 0.41 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:10:ALA:H | 6 | 0.41 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:10:ALA:H | 7 | 0.41 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:10:ALA:H | 7 | 0.41 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:10:ALA:H | 7 | 0.41 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:10:ALA:H | 9 | 0.41 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:10:ALA:H | 9 | 0.41 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:10:ALA:H | 9 | 0.41 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:10:ALA:H | 11 | 0.41 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:10:ALA:H | 11 | 0.41 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:10:ALA:H | 11 | 0.41 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:10:ALA:H | 12 | 0.41 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:10:ALA:H | 12 | 0.41 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:10:ALA:H | 12 | 0.41 |
| (2,547) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:29:VAL:H | 1 | 0.41 |
| (2,547) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:29:VAL:H | 12 | 0.41 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB1 | 9 | 0.41 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB2 | 9 | 0.41 |
| (2,499) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:26:ALA:HB3 | 9 | 0.41 |
| (2,492) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:19:GLN:HA | 3 | 0.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,492) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:19:GLN:HA | 9 | 0.41 |
| (2,471) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HB3 | 8 | 0.41 |
| (2,418) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 13 | 0.41 |
| (2,414) | 1:A:9:LEU:HA | 1:A:8:ASP:HB2 | 2 | 0.41 |
| (2,414) | 1:A:9:LEU:HA | 1:A:8:ASP:HB2 | 12 | 0.41 |
| (2,412) | 1:A:19:GLN:HB2 | 1:A:19:GLN:H | 3 | 0.41 |
| (2,364) | 1:A:17:SER:HB2 | 1:A:17:SER:H | 1 | 0.41 |
| (2,364) | 1:A:17:SER:HB2 | 1:A:17:SER:H | 9 | 0.41 |
| (2,356) | 1:A:16:LEU:HG | 1:A:16:LEU:HB3 | 4 | 0.41 |
| (2,356) | 1:A:16:LEU:HG | 1:A:16:LEU:HB3 | 5 | 0.41 |
| (2,356) | 1:A:16:LEU:HG | 1:A:16:LEU:HB3 | 10 | 0.41 |
| (2,356) | 1:A:16:LEU:HG | 1:A:16:LEU:HB3 | 12 | 0.41 |
| (2,356) | 1:A:16:LEU:HG | 1:A:16:LEU:HB3 | 13 | 0.41 |
| (2,356) | 1:A:16:LEU:HG | 1:A:16:LEU:HB3 | 15 | 0.41 |
| (2,356) | 1:A:16:LEU:HG | 1:A:16:LEU:HB3 | 16 | 0.41 |
| (2,347) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:LEU:HD21 | 5 | 0.41 |
| (2,347) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:LEU:HD22 | 5 | 0.41 |
| (2,347) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:LEU:HD23 | 5 | 0.41 |
| (2,347) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:LEU:HD21 | 13 | 0.41 |
| (2,347) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:LEU:HD22 | 13 | 0.41 |
| (2,347) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:LEU:HD23 | 13 | 0.41 |
| (2,335) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 14 | 0.41 |
| (2,335) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 15 | 0.41 |
| (2,31) | 1:A:39:HIS:HD2 | 1:A:37:LEU:HB3 | 2 | 0.41 |
| (2,295) | 1:A:59:LEU:HB2 | 1:A:60:THR:H | 2 | 0.41 |
| (2,295) | 1:A:59:LEU:HB2 | 1:A:60:THR:H | 4 | 0.41 |
| (2,295) | 1:A:59:LEU:HB2 | 1:A:60:THR:H | 9 | 0.41 |
| (2,292) | 1:A:68:LEU:HB2 | 1:A:65:ARG:HA | 1 | 0.41 |
| (2,292) | 1:A:68:LEU:HB2 | 1:A:65:ARG:HA | 2 | 0.41 |
| (2,292) | 1:A:68:LEU:HB2 | 1:A:65:ARG:HA | 5 | 0.41 |
| (2,292) | 1:A:68:LEU:HB2 | 1:A:65:ARG:HA | 16 | 0.41 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD11 | 1 | 0.41 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD12 | 1 | 0.41 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD13 | 1 | 0.41 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD11 | 1 | 0.41 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD12 | 1 | 0.41 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD13 | 1 | 0.41 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD11 | 1 | 0.41 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD12 | 1 | 0.41 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD13 | 1 | 0.41 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD11 | 7 | 0.41 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD12 | 7 | 0.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD13 | 7 | 0.41 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD11 | 7 | 0.41 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD12 | 7 | 0.41 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD13 | 7 | 0.41 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD11 | 7 | 0.41 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD12 | 7 | 0.41 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD13 | 7 | 0.41 |
| (2,1920) | 1:A:76:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 8 | 0.41 |
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HB3 | 1 | 0.41 |
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HB3 | 1 | 0.41 |
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HB3 | 1 | 0.41 |
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HB3 | 16 | 0.41 |
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HB3 | 16 | 0.41 |
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HB3 | 16 | 0.41 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:H | 5 | 0.41 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:H | 5 | 0.41 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:H | 5 | 0.41 |
| (2,1858) | 1:A:25:LEU:HG | 1:A:21:GLN:HA | 11 | 0.41 |
| (2,1845) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:51:PHE:HZ | 1 | 0.41 |
| (2,1845) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:51:PHE:HZ | 1 | 0.41 |
| (2,1845) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:51:PHE:HZ | 4 | 0.41 |
| (2,1845) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:51:PHE:HZ | 4 | 0.41 |
| (2,1845) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:51:PHE:HZ | 5 | 0.41 |
| (2,1845) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:51:PHE:HZ | 5 | 0.41 |
| (2,1845) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:51:PHE:HZ | 8 | 0.41 |
| (2,1845) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:51:PHE:HZ | 8 | 0.41 |
| (2,1845) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:51:PHE:HZ | 13 | 0.41 |
| (2,1845) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:51:PHE:HZ | 13 | 0.41 |
| (2,1845) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:51:PHE:HZ | 15 | 0.41 |
| (2,1845) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:51:PHE:HZ | 15 | 0.41 |
| (2,1845) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:51:PHE:HZ | 16 | 0.41 |
| (2,1845) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:51:PHE:HZ | 16 | 0.41 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:9:LEU:HA | 6 | 0.41 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:9:LEU:HA | 6 | 0.41 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:9:LEU:HA | 6 | 0.41 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:9:LEU:HA | 8 | 0.41 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:9:LEU:HA | 8 | 0.41 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:9:LEU:HA | 8 | 0.41 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:9:LEU:HA | 9 | 0.41 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:9:LEU:HA | 9 | 0.41 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:9:LEU:HA | 9 | 0.41 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:9:LEU:HA | 10 | 0.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:9:LEU:HA | 10 | 0.41 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:9:LEU:HA | 10 | 0.41 |
| (2,1801) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:96:THR:HG21 | 1 | 0.41 |
| (2,1801) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:96:THR:HG22 | 1 | 0.41 |
| (2,1801) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:96:THR:HG23 | 1 | 0.41 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD21 | 11 | 0.41 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD22 | 11 | 0.41 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD23 | 11 | 0.41 |
| (2,179) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:8:ASP:H | 2 | 0.41 |
| (2,179) | 1:A:8:ASP:HB2 | 1:A:8:ASP:H | 13 | 0.41 |
| (2,1771) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:98:LEU:H | 2 | 0.41 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:40:HIS:HB2 | 9 | 0.41 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:40:HIS:HB2 | 9 | 0.41 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:40:HIS:HB2 | 9 | 0.41 |
| (2,1697) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:94:LEU:HB3 | 5 | 0.41 |
| (2,1677) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HA | 7 | 0.41 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:85:PRO:HD2 | 14 | 0.41 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:85:PRO:HD2 | 14 | 0.41 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:85:PRO:HD2 | 14 | 0.41 |
| (2,1641) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:47:PRO:HB3 | 15 | 0.41 |
| (2,1524) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:16:LEU:HA | 3 | 0.41 |
| (2,1519) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:21:GLN:HG3 | 8 | 0.41 |
| (2,1493) | 1:A:79:THR:HB | 1:A:82:PHE:HB2 | 13 | 0.41 |
| (2,1493) | 1:A:79:THR:HB | 1:A:82:PHE:HB2 | 14 | 0.41 |
| (2,1480) | 1:A:78:PRO:HA | 1:A:79:THR:H | 11 | 0.41 |
| (2,1480) | 1:A:78:PRO:HA | 1:A:79:THR:H | 13 | 0.41 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG21 | 2 | 0.41 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG22 | 2 | 0.41 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG23 | 2 | 0.41 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG21 | 16 | 0.41 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG22 | 16 | 0.41 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG23 | 16 | 0.41 |
| (2,1318) | 1:A:68:LEU:HB3 | 1:A:68:LEU:HA | 15 | 0.41 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 13 | 0.41 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 13 | 0.41 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 13 | 0.41 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD21 | 6 | 0.41 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD22 | 6 | 0.41 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD23 | 6 | 0.41 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:45:ILE:HG13 | 11 | 0.41 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:45:ILE:HG13 | 11 | 0.41 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:45:ILE:HG13 | 11 | 0.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,82) | 1:A:86:THR:H | 1:A:84:HIS:HB2 | 14 | 0.41 |
| (1,73) | 1:A:65:ARG:H | 1:A:64:LEU:H | 8 | 0.41 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 14 | 0.41 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 14 | 0.41 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 14 | 0.41 |
| (1,479) | 1:A:68:LEU:H | 1:A:68:LEU:HG | 2 | 0.41 |
| (1,479) | 1:A:68:LEU:H | 1:A:68:LEU:HG | 4 | 0.41 |
| (1,479) | 1:A:68:LEU:H | 1:A:68:LEU:HG | 6 | 0.41 |
| (1,451) | 1:A:10:ALA:H | 1:A:9:LEU:HB3 | 1 | 0.41 |
| (1,451) | 1:A:10:ALA:H | 1:A:9:LEU:HB3 | 7 | 0.41 |
| (1,451) | 1:A:10:ALA:H | 1:A:9:LEU:HB3 | 14 | 0.41 |
| (1,414) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HB3 | 1 | 0.41 |
| (1,414) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HB3 | 2 | 0.41 |
| (1,414) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HB3 | 4 | 0.41 |
| (1,414) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HB3 | 6 | 0.41 |
| (1,414) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HB3 | 10 | 0.41 |
| (1,414) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HB3 | 12 | 0.41 |
| (1,414) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HB3 | 15 | 0.41 |
| (1,414) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HB3 | 16 | 0.41 |
| (1,40) | 1:A:16:LEU:H | 1:A:15:GLY:H | 1 | 0.41 |
| (1,382) | 1:A:14:ASN:HD22 | 1:A:11:ALA:HB1 | 14 | 0.41 |
| (1,382) | 1:A:14:ASN:HD22 | 1:A:11:ALA:HB2 | 14 | 0.41 |
| (1,382) | 1:A:14:ASN:HD22 | 1:A:11:ALA:HB3 | 14 | 0.41 |
| (1,33) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:55:GLY:H | 7 | 0.41 |
| (1,33) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:55:GLY:H | 16 | 0.41 |
| (1,329) | 1:A:64:LEU:H | 1:A:63:GLU:HB2 | 3 | 0.41 |
| (1,304) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HB2 | 1 | 0.41 |
| (1,304) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HB2 | 13 | 0.41 |
| (1,286) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HB2 | 11 | 0.41 |
| (1,270) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:81:ILE:HG12 | 1 | 0.41 |
| (1,270) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:81:ILE:HG12 | 8 | 0.41 |
| (1,270) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:81:ILE:HG12 | 15 | 0.41 |
| (1,262) | 1:A:55:GLY:H | 1:A:56:ILE:H | 8 | 0.41 |
| (1,113) | 1:A:88:HIS:H | 1:A:87:PRO:HD2 | 6 | 0.41 |
| (1,113) | 1:A:88:HIS:H | 1:A:87:PRO:HD2 | 8 | 0.41 |
| (1,11) | 1:A:96:THR:H | 1:A:95:HIS:H | 1 | 0.41 |
| (2,984) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HD1 | 8 | 0.4 |
| (2,984) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HD2 | 8 | 0.4 |
| (2,976) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:50:ALA:H | 9 | 0.4 |
| (2,96) | 1:A:4:SER:HB3 | 1:A:7:THR:HB | 16 | 0.4 |
| (2,946) | 1:A:47:PRO:HD3 | 1:A:46:SER:HA | 6 | 0.4 |
| (2,946) | 1:A:47:PRO:HD3 | 1:A:46:SER:HA | 12 | 0.4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,932) | 1:A:45:ILE:HG13 | 1:A:42:PRO:HA | 12 | 0.4 |
| (2,917) | 1:A:44:SER:HA | 1:A:41:THR:HG21 | 15 | 0.4 |
| (2,917) | 1:A:44:SER:HA | 1:A:41:THR:HG22 | 15 | 0.4 |
| (2,917) | 1:A:44:SER:HA | 1:A:41:THR:HG23 | 15 | 0.4 |
| (2,90) | 1:A:4:SER:HA | 1:A:5:ALA:H | 16 | 0.4 |
| (2,890) | 1:A:41:THR:HA | 1:A:41:THR:HG21 | 15 | 0.4 |
| (2,890) | 1:A:41:THR:HA | 1:A:41:THR:HG22 | 15 | 0.4 |
| (2,890) | 1:A:41:THR:HA | 1:A:41:THR:HG23 | 15 | 0.4 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:63:GLU:HB2 | 8 | 0.4 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:63:GLU:HB2 | 8 | 0.4 |
| (2,818) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:63:GLU:HB2 | 8 | 0.4 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG21 | 1 | 0.4 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG22 | 1 | 0.4 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG23 | 1 | 0.4 |
| (2,745) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HA | 15 | 0.4 |
| (2,698) | 1:A:83:ASP:HA | 1:A:82:PHE:H | 15 | 0.4 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:33:THR:HG1 | 3 | 0.4 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:33:THR:HG1 | 3 | 0.4 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:33:THR:HG1 | 3 | 0.4 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:33:THR:HG1 | 16 | 0.4 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:33:THR:HG1 | 16 | 0.4 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:33:THR:HG1 | 16 | 0.4 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:71:ASN:HB3 | 3 | 0.4 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:71:ASN:HB3 | 3 | 0.4 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:71:ASN:HB3 | 3 | 0.4 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:10:ALA:H | 5 | 0.4 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:10:ALA:H | 5 | 0.4 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:10:ALA:H | 5 | 0.4 |
| (2,547) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:29:VAL:H | 11 | 0.4 |
| (2,508) | 1:A:23:GLN:HB3 | 1:A:20:GLN:HA | 15 | 0.4 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:20:GLN:HB3 | 3 | 0.4 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:20:GLN:HB3 | 3 | 0.4 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:20:GLN:HB3 | 3 | 0.4 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG21 | 9 | 0.4 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG22 | 9 | 0.4 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:33:THR:HG23 | 9 | 0.4 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG21 | 9 | 0.4 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG22 | 9 | 0.4 |
| (2,45) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:33:THR:HG23 | 9 | 0.4 |
| (2,433) | 1:A:21:GLN:HG2 | 1:A:21:GLN:HA | 7 | 0.4 |
| (2,414) | 1:A:9:LEU:HA | 1:A:8:ASP:HB2 | 10 | 0.4 |
| (2,414) | 1:A:9:LEU:HA | 1:A:8:ASP:HB2 | 15 | 0.4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,412) | 1:A:19:GLN:HB2 | 1:A:19:GLN:H | 4 | 0.4 |
| (2,41) | 1:A:82:PHE:HD1 | 1:A:82:PHE:HB3 | 6 | 0.4 |
| (2,41) | 1:A:82:PHE:HD2 | 1:A:82:PHE:HB3 | 6 | 0.4 |
| (2,370) | 1:A:17:SER:HB2 | 1:A:20:GLN:HG3 | 12 | 0.4 |
| (2,356) | 1:A:16:LEU:HG | 1:A:16:LEU:HB3 | 9 | 0.4 |
| (2,335) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 4 | 0.4 |
| (2,335) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 5 | 0.4 |
| (2,299) | 1:A:13:LEU:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 2 | 0.4 |
| (2,296) | 1:A:68:LEU:HB2 | 1:A:68:LEU:H | 10 | 0.4 |
| (2,295) | 1:A:59:LEU:HB2 | 1:A:60:THR:H | 3 | 0.4 |
| (2,295) | 1:A:59:LEU:HB2 | 1:A:60:THR:H | 8 | 0.4 |
| (2,292) | 1:A:68:LEU:HB2 | 1:A:65:ARG:HA | 14 | 0.4 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG21 | 2 | 0.4 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG22 | 2 | 0.4 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG23 | 2 | 0.4 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HB2 | 15 | 0.4 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HB2 | 15 | 0.4 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HB2 | 15 | 0.4 |
| (2,198) | 1:A:9:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD21 | 6 | 0.4 |
| (2,198) | 1:A:9:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD22 | 6 | 0.4 |
| (2,198) | 1:A:9:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD23 | 6 | 0.4 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB1 | 14 | 0.4 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB2 | 14 | 0.4 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB3 | 14 | 0.4 |
| (2,1881) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HG | 2 | 0.4 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:H | 4 | 0.4 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:H | 4 | 0.4 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:H | 4 | 0.4 |
| (2,1858) | 1:A:25:LEU:HG | 1:A:21:GLN:HA | 1 | 0.4 |
| (2,1858) | 1:A:25:LEU:HG | 1:A:21:GLN:HA | 5 | 0.4 |
| (2,1858) | 1:A:25:LEU:HG | 1:A:21:GLN:HA | 12 | 0.4 |
| (2,1845) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:51:PHE:HZ | 2 | 0.4 |
| (2,1845) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:51:PHE:HZ | 2 | 0.4 |
| (2,1845) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:51:PHE:HZ | 3 | 0.4 |
| (2,1845) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:51:PHE:HZ | 3 | 0.4 |
| (2,1845) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:51:PHE:HZ | 6 | 0.4 |
| (2,1845) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:51:PHE:HZ | 6 | 0.4 |
| (2,1845) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:51:PHE:HZ | 7 | 0.4 |
| (2,1845) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:51:PHE:HZ | 7 | 0.4 |
| (2,1845) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:51:PHE:HZ | 9 | 0.4 |
| (2,1845) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:51:PHE:HZ | 9 | 0.4 |
| (2,1845) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:51:PHE:HZ | 10 | 0.4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1845) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:51:PHE:HZ | 10 | 0.4 |
| (2,1845) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:51:PHE:HZ | 11 | 0.4 |
| (2,1845) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:51:PHE:HZ | 11 | 0.4 |
| (2,1845) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:51:PHE:HZ | 12 | 0.4 |
| (2,1845) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:51:PHE:HZ | 12 | 0.4 |
| (2,1845) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:51:PHE:HZ | 14 | 0.4 |
| (2,1845) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:51:PHE:HZ | 14 | 0.4 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:9:LEU:HA | 2 | 0.4 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:9:LEU:HA | 2 | 0.4 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:9:LEU:HA | 2 | 0.4 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:9:LEU:HA | 14 | 0.4 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:9:LEU:HA | 14 | 0.4 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:9:LEU:HA | 14 | 0.4 |
| (2,1801) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:96:THR:HG21 | 10 | 0.4 |
| (2,1801) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:96:THR:HG22 | 10 | 0.4 |
| (2,1801) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:96:THR:HG23 | 10 | 0.4 |
| (2,1801) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:96:THR:HG21 | 11 | 0.4 |
| (2,1801) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:96:THR:HG22 | 11 | 0.4 |
| (2,1801) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:96:THR:HG23 | 11 | 0.4 |
| (2,1771) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:98:LEU:H | 4 | 0.4 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG21 | 2 | 0.4 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG22 | 2 | 0.4 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG23 | 2 | 0.4 |
| (2,1720) | 1:A:92:GLN:HG3 | 1:A:89:ALA:HA | 14 | 0.4 |
| (2,1697) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:94:LEU:HB3 | 11 | 0.4 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HE1 | 4 | 0.4 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HE2 | 4 | 0.4 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HE1 | 4 | 0.4 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HE2 | 4 | 0.4 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HE1 | 4 | 0.4 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HE2 | 4 | 0.4 |
| (2,1677) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HA | 1 | 0.4 |
| (2,1677) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HA | 11 | 0.4 |
| (2,1543) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:51:PHE:HD1 | 7 | 0.4 |
| (2,1543) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:51:PHE:HD2 | 7 | 0.4 |
| (2,1524) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:16:LEU:HA | 6 | 0.4 |
| (2,1433) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:70:HIS:HD2 | 3 | 0.4 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 1 | 0.4 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 1 | 0.4 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 1 | 0.4 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 1 | 0.4 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 1 | 0.4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 1 | 0.4 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 1 | 0.4 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 1 | 0.4 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 1 | 0.4 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:54:LEU:H | 14 | 0.4 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:54:LEU:H | 14 | 0.4 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:54:LEU:H | 14 | 0.4 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG21 | 1 | 0.4 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG22 | 1 | 0.4 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG23 | 1 | 0.4 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG21 | 3 | 0.4 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG22 | 3 | 0.4 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG23 | 3 | 0.4 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG21 | 4 | 0.4 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG22 | 4 | 0.4 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG23 | 4 | 0.4 |
| (2,1318) | 1:A:68:LEU:HB3 | 1:A:68:LEU:HA | 13 | 0.4 |
| (2,1204) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:59:LEU:HA | 2 | 0.4 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD21 | 10 | 0.4 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD22 | 10 | 0.4 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD23 | 10 | 0.4 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD21 | 16 | 0.4 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD22 | 16 | 0.4 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD23 | 16 | 0.4 |
| (2,1053) | 1:A:52:LYS:HG2 | 1:A:52:LYS:HA | 15 | 0.4 |
| (1,590) | 1:A:96:THR:H | 1:A:97:ARG:H | 3 | 0.4 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 13 | 0.4 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 13 | 0.4 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 13 | 0.4 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 7 | 0.4 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 7 | 0.4 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 7 | 0.4 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 8 | 0.4 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 8 | 0.4 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 8 | 0.4 |
| (1,479) | 1:A:68:LEU:H | 1:A:68:LEU:HG | 5 | 0.4 |
| (1,415) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HB2 | 3 | 0.4 |
| (1,415) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HB2 | 8 | 0.4 |
| (1,415) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HB2 | 11 | 0.4 |
| (1,414) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HB3 | 3 | 0.4 |
| (1,414) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HB3 | 8 | 0.4 |
| (1,414) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HB3 | 11 | 0.4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,409) | 1:A:4:SER:H | 1:A:4:SER:HB2 | 9 | 0.4 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG21 | 13 | 0.4 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG22 | 13 | 0.4 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG23 | 13 | 0.4 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG21 | 1 | 0.4 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG22 | 1 | 0.4 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG23 | 1 | 0.4 |
| (1,33) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:55:GLY:H | 13 | 0.4 |
| (1,33) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:55:GLY:H | 15 | 0.4 |
| (1,329) | 1:A:64:LEU:H | 1:A:63:GLU:HB2 | 15 | 0.4 |
| (1,286) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HB2 | 5 | 0.4 |
| (1,282) | 1:A:14:ASN:HD21 | 1:A:11:ALA:HA | 5 | 0.4 |
| (1,21) | 1:A:7:THR:H | 1:A:6:ALA:H | 14 | 0.4 |
| (1,208) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:47:PRO:HG3 | 4 | 0.4 |
| (1,208) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:47:PRO:HG3 | 11 | 0.4 |
| (1,208) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:47:PRO:HG3 | 14 | 0.4 |
| (1,208) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:47:PRO:HG3 | 16 | 0.4 |
| (1,11) | 1:A:96:THR:H | 1:A:95:HIS:H | 6 | 0.4 |
| (2,946) | 1:A:47:PRO:HD3 | 1:A:46:SER:HA | 2 | 0.39 |
| (2,946) | 1:A:47:PRO:HD3 | 1:A:46:SER:HA | 7 | 0.39 |
| (2,911) | 1:A:43:GLU:HB2 | 1:A:43:GLU:H | 3 | 0.39 |
| (2,888) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:41:THR:HA | 7 | 0.39 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:73:GLY:HA2 | 11 | 0.39 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:73:GLY:HA2 | 11 | 0.39 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:73:GLY:HA2 | 11 | 0.39 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG21 | 5 | 0.39 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG22 | 5 | 0.39 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG23 | 5 | 0.39 |
| (2,84) | 1:A:2:ALA:HB1 | 1:A:5:ALA:H | 16 | 0.39 |
| (2,84) | 1:A:2:ALA:HB2 | 1:A:5:ALA:H | 16 | 0.39 |
| (2,84) | 1:A:2:ALA:HB3 | 1:A:5:ALA:H | 16 | 0.39 |
| (2,745) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HA | 1 | 0.39 |
| (2,698) | 1:A:83:ASP:HA | 1:A:82:PHE:H | 13 | 0.39 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:33:THR:HG1 | 2 | 0.39 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:33:THR:HG1 | 2 | 0.39 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:33:THR:HG1 | 2 | 0.39 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:33:THR:HG1 | 15 | 0.39 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:33:THR:HG1 | 15 | 0.39 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:33:THR:HG1 | 15 | 0.39 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:71:ASN:HB3 | 14 | 0.39 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:71:ASN:HB3 | 14 | 0.39 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:71:ASN:HB3 | 14 | 0.39 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:71:ASN:HB3 | 15 | 0.39 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:71:ASN:HB3 | 15 | 0.39 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:71:ASN:HB3 | 15 | 0.39 |
| (2,636) | 1:A:28:LEU:HG | 1:A:29:VAL:HA | 9 | 0.39 |
| (2,636) | 1:A:28:LEU:HG | 1:A:29:VAL:HA | 10 | 0.39 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:10:ALA:H | 16 | 0.39 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:10:ALA:H | 16 | 0.39 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:10:ALA:H | 16 | 0.39 |
| (2,547) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:29:VAL:H | 10 | 0.39 |
| (2,511) | 1:A:23:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HA | 11 | 0.39 |
| (2,511) | 1:A:23:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HA | 12 | 0.39 |
| (2,473) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HD11 | 9 | 0.39 |
| (2,473) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HD12 | 9 | 0.39 |
| (2,473) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HD13 | 9 | 0.39 |
| (2,433) | 1:A:21:GLN:HG2 | 1:A:21:GLN:HA | 3 | 0.39 |
| (2,433) | 1:A:21:GLN:HG2 | 1:A:21:GLN:HA | 11 | 0.39 |
| (2,418) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 10 | 0.39 |
| (2,414) | 1:A:9:LEU:HA | 1:A:8:ASP:HB2 | 6 | 0.39 |
| (2,414) | 1:A:9:LEU:HA | 1:A:8:ASP:HB2 | 14 | 0.39 |
| (2,347) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:LEU:HD21 | 4 | 0.39 |
| (2,347) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:LEU:HD22 | 4 | 0.39 |
| (2,347) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:LEU:HD23 | 4 | 0.39 |
| (2,347) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:LEU:HD21 | 8 | 0.39 |
| (2,347) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:LEU:HD22 | 8 | 0.39 |
| (2,347) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:LEU:HD23 | 8 | 0.39 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD21 | 10 | 0.39 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD22 | 10 | 0.39 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD23 | 10 | 0.39 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD21 | 14 | 0.39 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD22 | 14 | 0.39 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD23 | 14 | 0.39 |
| (2,31) | 1:A:39:HIS:HD2 | 1:A:37:LEU:HB3 | 16 | 0.39 |
| (2,299) | 1:A:13:LEU:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 1 | 0.39 |
| (2,295) | 1:A:59:LEU:HB2 | 1:A:60:THR:H | 1 | 0.39 |
| (2,295) | 1:A:59:LEU:HB2 | 1:A:60:THR:H | 5 | 0.39 |
| (2,295) | 1:A:59:LEU:HB2 | 1:A:60:THR:H | 6 | 0.39 |
| (2,295) | 1:A:59:LEU:HB2 | 1:A:60:THR:H | 15 | 0.39 |
| (2,292) | 1:A:68:LEU:HB2 | 1:A:65:ARG:HA | 6 | 0.39 |
| (2,292) | 1:A:68:LEU:HB2 | 1:A:65:ARG:HA | 9 | 0.39 |
| (2,1868) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:ASN:H | 9 | 0.39 |
| (2,1858) | 1:A:25:LEU:HG | 1:A:21:GLN:HA | 7 | 0.39 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:9:LEU:HA | 5 | 0.39 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:9:LEU:HA | 5 | 0.39 |
| (2,1827) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:9:LEU:HA | 5 | 0.39 |
| (2,1801) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:96:THR:HG21 | 4 | 0.39 |
| (2,1801) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:96:THR:HG22 | 4 | 0.39 |
| (2,1801) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:96:THR:HG23 | 4 | 0.39 |
| (2,1773) | 1:A:97:ARG:HD2 | 1:A:100:GLN:H | 4 | 0.39 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:40:HIS:HB2 | 4 | 0.39 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:40:HIS:HB2 | 4 | 0.39 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:40:HIS:HB2 | 4 | 0.39 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG21 | 3 | 0.39 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG22 | 3 | 0.39 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG23 | 3 | 0.39 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG21 | 12 | 0.39 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG22 | 12 | 0.39 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG23 | 12 | 0.39 |
| (2,1729) | 1:A:93:HIS:HA | 1:A:90:LEU:HA | 5 | 0.39 |
| (2,1729) | 1:A:93:HIS:HA | 1:A:90:LEU:HA | 13 | 0.39 |
| (2,1697) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:94:LEU:HB3 | 1 | 0.39 |
| (2,1697) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:94:LEU:HB3 | 13 | 0.39 |
| (2,1677) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HA | 3 | 0.39 |
| (2,1677) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HA | 5 | 0.39 |
| (2,1677) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HA | 10 | 0.39 |
| (2,1677) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HA | 12 | 0.39 |
| (2,1433) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:70:HIS:HD2 | 2 | 0.39 |
| (2,141) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:43:GLU:HG2 | 5 | 0.39 |
| (2,141) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:43:GLU:HG2 | 5 | 0.39 |
| (2,141) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:43:GLU:HG2 | 5 | 0.39 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG21 | 11 | 0.39 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG22 | 11 | 0.39 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG23 | 11 | 0.39 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG21 | 15 | 0.39 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG22 | 15 | 0.39 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG23 | 15 | 0.39 |
| (2,1377) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:74:LEU:HD21 | 3 | 0.39 |
| (2,1377) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:74:LEU:HD22 | 3 | 0.39 |
| (2,1377) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:74:LEU:HD23 | 3 | 0.39 |
| (2,1318) | 1:A:68:LEU:HB3 | 1:A:68:LEU:HA | 1 | 0.39 |
| (2,1318) | 1:A:68:LEU:HB3 | 1:A:68:LEU:HA | 5 | 0.39 |
| (2,1318) | 1:A:68:LEU:HB3 | 1:A:68:LEU:HA | 6 | 0.39 |
| (2,1318) | 1:A:68:LEU:HB3 | 1:A:68:LEU:HA | 16 | 0.39 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 6 | 0.39 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 6 | 0.39 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 6 | 0.39 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 8 | 0.39 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 8 | 0.39 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 8 | 0.39 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 11 | 0.39 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 11 | 0.39 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 11 | 0.39 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ALA:H | 4 | 0.39 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ALA:H | 4 | 0.39 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ALA:H | 4 | 0.39 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ALA:H | 13 | 0.39 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ALA:H | 13 | 0.39 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ALA:H | 13 | 0.39 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD21 | 3 | 0.39 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD22 | 3 | 0.39 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD23 | 3 | 0.39 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:45:ILE:HG13 | 9 | 0.39 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:45:ILE:HG13 | 9 | 0.39 |
| (2,1075) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:45:ILE:HG13 | 9 | 0.39 |
| (2,1044) | 1:A:52:LYS:HB2 | 1:A:52:LYS:HE2 | 9 | 0.39 |
| (1,82) | 1:A:86:THR:H | 1:A:84:HIS:HB2 | 5 | 0.39 |
| (1,599) | 1:A:33:THR:H | 1:A:33:THR:HG1 | 7 | 0.39 |
| (1,599) | 1:A:33:THR:H | 1:A:33:THR:HG1 | 11 | 0.39 |
| (1,590) | 1:A:96:THR:H | 1:A:97:ARG:H | 12 | 0.39 |
| (1,590) | 1:A:96:THR:H | 1:A:97:ARG:H | 13 | 0.39 |
| (1,586) | 1:A:96:THR:H | 1:A:95:HIS:HB3 | 9 | 0.39 |
| (1,561) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:21:GLN:HB2 | 5 | 0.39 |
| (1,561) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:21:GLN:HB2 | 16 | 0.39 |
| (1,490) | 1:A:102:HIS:H | 1:A:102:HIS:HB3 | 5 | 0.39 |
| (1,479) | 1:A:68:LEU:H | 1:A:68:LEU:HG | 16 | 0.39 |
| (1,415) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HB2 | 1 | 0.39 |
| (1,415) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HB2 | 10 | 0.39 |
| (1,415) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HB2 | 12 | 0.39 |
| (1,415) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HB2 | 16 | 0.39 |
| (1,414) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HB3 | 7 | 0.39 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG21 | 3 | 0.39 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG22 | 3 | 0.39 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG23 | 3 | 0.39 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG21 | 16 | 0.39 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG22 | 16 | 0.39 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG23 | 16 | 0.39 |
| (1,382) | 1:A:14:ASN:HD22 | 1:A:11:ALA:HB1 | 5 | 0.39 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,382) | 1:A:14:ASN:HD22 | 1:A:11:ALA:HB2 | 5 | 0.39 |
| (1,382) | 1:A:14:ASN:HD22 | 1:A:11:ALA:HB3 | 5 | 0.39 |
| (1,382) | 1:A:14:ASN:HD22 | 1:A:11:ALA:HB1 | 9 | 0.39 |
| (1,382) | 1:A:14:ASN:HD22 | 1:A:11:ALA:HB2 | 9 | 0.39 |
| (1,382) | 1:A:14:ASN:HD22 | 1:A:11:ALA:HB3 | 9 | 0.39 |
| (1,382) | 1:A:14:ASN:HD22 | 1:A:11:ALA:HB1 | 10 | 0.39 |
| (1,382) | 1:A:14:ASN:HD22 | 1:A:11:ALA:HB2 | 10 | 0.39 |
| (1,382) | 1:A:14:ASN:HD22 | 1:A:11:ALA:HB3 | 10 | 0.39 |
| (1,382) | 1:A:14:ASN:HD22 | 1:A:11:ALA:HB1 | 11 | 0.39 |
| (1,382) | 1:A:14:ASN:HD22 | 1:A:11:ALA:HB2 | 11 | 0.39 |
| (1,382) | 1:A:14:ASN:HD22 | 1:A:11:ALA:HB3 | 11 | 0.39 |
| (1,382) | 1:A:14:ASN:HD22 | 1:A:11:ALA:HB1 | 12 | 0.39 |
| (1,382) | 1:A:14:ASN:HD22 | 1:A:11:ALA:HB2 | 12 | 0.39 |
| (1,382) | 1:A:14:ASN:HD22 | 1:A:11:ALA:HB3 | 12 | 0.39 |
| (1,382) | 1:A:14:ASN:HD22 | 1:A:11:ALA:HB1 | 13 | 0.39 |
| (1,382) | 1:A:14:ASN:HD22 | 1:A:11:ALA:HB2 | 13 | 0.39 |
| (1,382) | 1:A:14:ASN:HD22 | 1:A:11:ALA:HB3 | 13 | 0.39 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG21 | 7 | 0.39 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG22 | 7 | 0.39 |
| (1,364) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:91:THR:HG23 | 7 | 0.39 |
| (1,349) | 1:A:17:SER:H | 1:A:20:GLN:HB2 | 11 | 0.39 |
| (1,33) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:55:GLY:H | 2 | 0.39 |
| (1,33) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:55:GLY:H | 10 | 0.39 |
| (1,33) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:55:GLY:H | 12 | 0.39 |
| (1,329) | 1:A:64:LEU:H | 1:A:63:GLU:HB2 | 11 | 0.39 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD11 | 1 | 0.39 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD12 | 1 | 0.39 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD13 | 1 | 0.39 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD11 | 3 | 0.39 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD12 | 3 | 0.39 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD13 | 3 | 0.39 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD11 | 4 | 0.39 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD12 | 4 | 0.39 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD13 | 4 | 0.39 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD11 | 7 | 0.39 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD12 | 7 | 0.39 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD13 | 7 | 0.39 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD11 | 9 | 0.39 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD12 | 9 | 0.39 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD13 | 9 | 0.39 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD11 | 15 | 0.39 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD12 | 15 | 0.39 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD13 | 15 | 0.39 |
| (1,21) | 1:A:7:THR:H | 1:A:6:ALA:H | 5 | 0.39 |
| (1,127) | 1:A:69:THR:H | 1:A:68:LEU:HB2 | 12 | 0.39 |
| (1,11) | 1:A:96:THR:H | 1:A:95:HIS:H | 3 | 0.39 |
| (2,946) | 1:A:47:PRO:HD3 | 1:A:46:SER:HA | 10 | 0.38 |
| (2,946) | 1:A:47:PRO:HD3 | 1:A:46:SER:HA | 14 | 0.38 |
| (2,946) | 1:A:47:PRO:HD3 | 1:A:46:SER:HA | 15 | 0.38 |
| (2,943) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:47:PRO:HG2 | 1 | 0.38 |
| (2,932) | 1:A:45:ILE:HG13 | 1:A:42:PRO:HA | 4 | 0.38 |
| (2,92) | 1:A:4:SER:HA | 1:A:3:ALA:HB1 | 1 | 0.38 |
| (2,92) | 1:A:4:SER:HA | 1:A:3:ALA:HB2 | 1 | 0.38 |
| (2,92) | 1:A:4:SER:HA | 1:A:3:ALA:HB3 | 1 | 0.38 |
| (2,890) | 1:A:41:THR:HA | 1:A:41:THR:HG21 | 14 | 0.38 |
| (2,890) | 1:A:41:THR:HA | 1:A:41:THR:HG22 | 14 | 0.38 |
| (2,890) | 1:A:41:THR:HA | 1:A:41:THR:HG23 | 14 | 0.38 |
| (2,825) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:60:THR:HA | 8 | 0.38 |
| (2,825) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:60:THR:HA | 8 | 0.38 |
| (2,825) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:60:THR:HA | 8 | 0.38 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG21 | 3 | 0.38 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG22 | 3 | 0.38 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG23 | 3 | 0.38 |
| (2,698) | 1:A:83:ASP:HA | 1:A:82:PHE:H | 9 | 0.38 |
| (2,636) | 1:A:28:LEU:HG | 1:A:29:VAL:HA | 14 | 0.38 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB1 | 11 | 0.38 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB2 | 11 | 0.38 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB3 | 11 | 0.38 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:10:ALA:H | 8 | 0.38 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:10:ALA:H | 8 | 0.38 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:10:ALA:H | 8 | 0.38 |
| (2,547) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:29:VAL:H | 3 | 0.38 |
| (2,547) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:29:VAL:H | 5 | 0.38 |
| (2,533) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:25:LEU:HB2 | 9 | 0.38 |
| (2,508) | 1:A:23:GLN:HB3 | 1:A:20:GLN:HA | 12 | 0.38 |
| (2,494) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:23:GLN:H | 16 | 0.38 |
| (2,471) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HB3 | 15 | 0.38 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:51:PHE:HD1 | 8 | 0.38 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:51:PHE:HD2 | 8 | 0.38 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:51:PHE:HD1 | 8 | 0.38 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:51:PHE:HD2 | 8 | 0.38 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:51:PHE:HD1 | 8 | 0.38 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:51:PHE:HD2 | 8 | 0.38 |
| (2,449) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:62:LEU:H | 11 | 0.38 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,433) | 1:A:21:GLN:HG2 | 1:A:21:GLN:HA | 8 | 0.38 |
| (2,418) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 9 | 0.38 |
| (2,414) | 1:A:9:LEU:HA | 1:A:8:ASP:HB2 | 9 | 0.38 |
| (2,412) | 1:A:19:GLN:HB2 | 1:A:19:GLN:H | 1 | 0.38 |
| (2,41) | 1:A:82:PHE:HD1 | 1:A:82:PHE:HB3 | 1 | 0.38 |
| (2,41) | 1:A:82:PHE:HD2 | 1:A:82:PHE:HB3 | 1 | 0.38 |
| (2,41) | 1:A:82:PHE:HD1 | 1:A:82:PHE:HB3 | 9 | 0.38 |
| (2,41) | 1:A:82:PHE:HD2 | 1:A:82:PHE:HB3 | 9 | 0.38 |
| (2,366) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:17:SER:HA | 10 | 0.38 |
| (2,364) | 1:A:17:SER:HB2 | 1:A:17:SER:H | 3 | 0.38 |
| (2,364) | 1:A:17:SER:HB2 | 1:A:17:SER:H | 12 | 0.38 |
| (2,347) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:LEU:HD21 | 1 | 0.38 |
| (2,347) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:LEU:HD22 | 1 | 0.38 |
| (2,347) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:LEU:HD23 | 1 | 0.38 |
| (2,335) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 9 | 0.38 |
| (2,335) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 12 | 0.38 |
| (2,335) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 13 | 0.38 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD21 | 13 | 0.38 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD22 | 13 | 0.38 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD23 | 13 | 0.38 |
| (2,321) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:86:THR:HA | 5 | 0.38 |
| (2,292) | 1:A:68:LEU:HB2 | 1:A:65:ARG:HA | 4 | 0.38 |
| (2,292) | 1:A:68:LEU:HB2 | 1:A:65:ARG:HA | 15 | 0.38 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD11 | 16 | 0.38 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD12 | 16 | 0.38 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD13 | 16 | 0.38 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD11 | 16 | 0.38 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD12 | 16 | 0.38 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD13 | 16 | 0.38 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD11 | 16 | 0.38 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD12 | 16 | 0.38 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD13 | 16 | 0.38 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HB2 | 9 | 0.38 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HB2 | 9 | 0.38 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HB2 | 9 | 0.38 |
| (2,204) | 1:A:9:LEU:HB3 | 1:A:10:ALA:H | 13 | 0.38 |
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HB3 | 12 | 0.38 |
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HB3 | 12 | 0.38 |
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HB3 | 12 | 0.38 |
| (2,1801) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:96:THR:HG21 | 14 | 0.38 |
| (2,1801) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:96:THR:HG22 | 14 | 0.38 |
| (2,1801) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:96:THR:HG23 | 14 | 0.38 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:99:THR:H | 8 | 0.38 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:99:THR:H | 8 | 0.38 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:99:THR:H | 8 | 0.38 |
| (2,1783) | 1:A:98:LEU:HD11 | 1:A:98:LEU:H | 9 | 0.38 |
| (2,1783) | 1:A:98:LEU:HD12 | 1:A:98:LEU:H | 9 | 0.38 |
| (2,1783) | 1:A:98:LEU:HD13 | 1:A:98:LEU:H | 9 | 0.38 |
| (2,1729) | 1:A:93:HIS:HA | 1:A:90:LEU:HA | 4 | 0.38 |
| (2,1720) | 1:A:92:GLN:HG3 | 1:A:89:ALA:HA | 6 | 0.38 |
| (2,1677) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HA | 4 | 0.38 |
| (2,1524) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:16:LEU:HA | 9 | 0.38 |
| (2,1524) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:16:LEU:HA | 15 | 0.38 |
| (2,1521) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:21:GLN:HG2 | 2 | 0.38 |
| (2,1519) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:21:GLN:HG3 | 4 | 0.38 |
| (2,1519) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:21:GLN:HG3 | 16 | 0.38 |
| (2,1493) | 1:A:79:THR:HB | 1:A:82:PHE:HB2 | 9 | 0.38 |
| (2,1483) | 1:A:60:THR:HA | 1:A:63:GLU:HB2 | 2 | 0.38 |
| (2,1481) | 1:A:78:PRO:HA | 1:A:80:LEU:H | 2 | 0.38 |
| (2,1481) | 1:A:78:PRO:HA | 1:A:80:LEU:H | 5 | 0.38 |
| (2,1481) | 1:A:78:PRO:HA | 1:A:80:LEU:H | 11 | 0.38 |
| (2,1480) | 1:A:78:PRO:HA | 1:A:79:THR:H | 14 | 0.38 |
| (2,1473) | 1:A:75:ASP:HB3 | 1:A:75:ASP:H | 9 | 0.38 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:54:LEU:H | 5 | 0.38 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:54:LEU:H | 5 | 0.38 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:54:LEU:H | 5 | 0.38 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:54:LEU:H | 12 | 0.38 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:54:LEU:H | 12 | 0.38 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:54:LEU:H | 12 | 0.38 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:54:LEU:H | 15 | 0.38 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:54:LEU:H | 15 | 0.38 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:54:LEU:H | 15 | 0.38 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG21 | 7 | 0.38 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG22 | 7 | 0.38 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG23 | 7 | 0.38 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG21 | 10 | 0.38 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG22 | 10 | 0.38 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG23 | 10 | 0.38 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG21 | 12 | 0.38 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG22 | 12 | 0.38 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG23 | 12 | 0.38 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG21 | 13 | 0.38 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG22 | 13 | 0.38 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG23 | 13 | 0.38 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1378) | 1:A:97:ARG:HB3 | 1:A:74:LEU:HD21 | 15 | 0.38 |
| (2,1378) | 1:A:97:ARG:HB3 | 1:A:74:LEU:HD22 | 15 | 0.38 |
| (2,1378) | 1:A:97:ARG:HB3 | 1:A:74:LEU:HD23 | 15 | 0.38 |
| (2,1334) | 1:A:69:THR:HA | 1:A:74:LEU:H | 16 | 0.38 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD11 | 5 | 0.38 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD12 | 5 | 0.38 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD13 | 5 | 0.38 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD11 | 6 | 0.38 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD12 | 6 | 0.38 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD13 | 6 | 0.38 |
| (2,1318) | 1:A:68:LEU:HB3 | 1:A:68:LEU:HA | 2 | 0.38 |
| (2,1318) | 1:A:68:LEU:HB3 | 1:A:68:LEU:HA | 4 | 0.38 |
| (2,1318) | 1:A:68:LEU:HB3 | 1:A:68:LEU:HA | 14 | 0.38 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ALA:H | 7 | 0.38 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ALA:H | 7 | 0.38 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ALA:H | 7 | 0.38 |
| (2,1133) | 1:A:58:SER:HB3 | 1:A:59:LEU:HG | 13 | 0.38 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG21 | 10 | 0.38 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG22 | 10 | 0.38 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG23 | 10 | 0.38 |
| (1,82) | 1:A:86:THR:H | 1:A:84:HIS:HB2 | 2 | 0.38 |
| (1,82) | 1:A:86:THR:H | 1:A:84:HIS:HB2 | 11 | 0.38 |
| (1,82) | 1:A:86:THR:H | 1:A:84:HIS:HB2 | 15 | 0.38 |
| (1,80) | 1:A:86:THR:H | 1:A:85:PRO:HD2 | 10 | 0.38 |
| (1,599) | 1:A:33:THR:H | 1:A:33:THR:HG1 | 1 | 0.38 |
| (1,590) | 1:A:96:THR:H | 1:A:97:ARG:H | 1 | 0.38 |
| (1,590) | 1:A:96:THR:H | 1:A:97:ARG:H | 6 | 0.38 |
| (1,568) | 1:A:98:LEU:H | 1:A:98:LEU:HD11 | 9 | 0.38 |
| (1,568) | 1:A:98:LEU:H | 1:A:98:LEU:HD12 | 9 | 0.38 |
| (1,568) | 1:A:98:LEU:H | 1:A:98:LEU:HD13 | 9 | 0.38 |
| (1,561) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:21:GLN:HB2 | 4 | 0.38 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 10 | 0.38 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 10 | 0.38 |
| (1,542) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 10 | 0.38 |
| (1,527) | 1:A:93:HIS:H | 1:A:92:GLN:HB3 | 3 | 0.38 |
| (1,451) | 1:A:10:ALA:H | 1:A:9:LEU:HB3 | 9 | 0.38 |
| (1,442) | 1:A:75:ASP:H | 1:A:75:ASP:HB3 | 9 | 0.38 |
| (1,415) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HB2 | 2 | 0.38 |
| (1,415) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HB2 | 4 | 0.38 |
| (1,415) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HB2 | 5 | 0.38 |
| (1,415) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HB2 | 6 | 0.38 |
| (1,415) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HB2 | 13 | 0.38 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,415) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HB2 | 15 | 0.38 |
| (1,40) | 1:A:16:LEU:H | 1:A:15:GLY:H | 2 | 0.38 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG21 | 11 | 0.38 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG22 | 11 | 0.38 |
| (1,396) | 1:A:7:THR:H | 1:A:7:THR:HG23 | 11 | 0.38 |
| (1,382) | 1:A:14:ASN:HD22 | 1:A:11:ALA:HB1 | 3 | 0.38 |
| (1,382) | 1:A:14:ASN:HD22 | 1:A:11:ALA:HB2 | 3 | 0.38 |
| (1,382) | 1:A:14:ASN:HD22 | 1:A:11:ALA:HB3 | 3 | 0.38 |
| (1,382) | 1:A:14:ASN:HD22 | 1:A:11:ALA:HB1 | 8 | 0.38 |
| (1,382) | 1:A:14:ASN:HD22 | 1:A:11:ALA:HB2 | 8 | 0.38 |
| (1,382) | 1:A:14:ASN:HD22 | 1:A:11:ALA:HB3 | 8 | 0.38 |
| (1,368) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:93:HIS:HB3 | 16 | 0.38 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD21 | 16 | 0.38 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD22 | 16 | 0.38 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD23 | 16 | 0.38 |
| (1,33) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:55:GLY:H | 4 | 0.38 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD11 | 10 | 0.38 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD12 | 10 | 0.38 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD13 | 10 | 0.38 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD11 | 12 | 0.38 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD12 | 12 | 0.38 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD13 | 12 | 0.38 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD11 | 16 | 0.38 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD12 | 16 | 0.38 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD13 | 16 | 0.38 |
| (1,304) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HB2 | 15 | 0.38 |
| (1,304) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HB2 | 16 | 0.38 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 1 | 0.38 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 1 | 0.38 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 1 | 0.38 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 12 | 0.38 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 12 | 0.38 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 12 | 0.38 |
| (1,270) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:81:ILE:HG12 | 4 | 0.38 |
| (1,270) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:81:ILE:HG12 | 16 | 0.38 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG21 | 8 | 0.38 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG22 | 8 | 0.38 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG23 | 8 | 0.38 |
| (1,22) | 1:A:43:GLU:H | 1:A:44:SER:H | 8 | 0.38 |
| (1,208) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:47:PRO:HG3 | 7 | 0.38 |
| (1,189) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:53:ASP:HB3 | 2 | 0.38 |
| (1,189) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:53:ASP:HB3 | 3 | 0.38 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,189) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:53:ASP:HB3 | 5 | 0.38 |
| (1,189) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:53:ASP:HB3 | 11 | 0.38 |
| (1,189) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:53:ASP:HB3 | 15 | 0.38 |
| (2,946) | 1:A:47:PRO:HD3 | 1:A:46:SER:HA | 9 | 0.37 |
| (2,946) | 1:A:47:PRO:HD3 | 1:A:46:SER:HA | 16 | 0.37 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:40:HIS:HD2 | 4 | 0.37 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:40:HIS:HD2 | 4 | 0.37 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:40:HIS:HD2 | 4 | 0.37 |
| (2,892) | 1:A:43:GLU:HG2 | 1:A:41:THR:HB | 7 | 0.37 |
| (2,890) | 1:A:41:THR:HA | 1:A:41:THR:HG21 | 3 | 0.37 |
| (2,890) | 1:A:41:THR:HA | 1:A:41:THR:HG22 | 3 | 0.37 |
| (2,890) | 1:A:41:THR:HA | 1:A:41:THR:HG23 | 3 | 0.37 |
| (2,890) | 1:A:41:THR:HA | 1:A:41:THR:HG21 | 8 | 0.37 |
| (2,890) | 1:A:41:THR:HA | 1:A:41:THR:HG22 | 8 | 0.37 |
| (2,890) | 1:A:41:THR:HA | 1:A:41:THR:HG23 | 8 | 0.37 |
| (2,890) | 1:A:41:THR:HA | 1:A:41:THR:HG21 | 9 | 0.37 |
| (2,890) | 1:A:41:THR:HA | 1:A:41:THR:HG22 | 9 | 0.37 |
| (2,890) | 1:A:41:THR:HA | 1:A:41:THR:HG23 | 9 | 0.37 |
| (2,884) | 1:A:42:PRO:HD3 | 1:A:42:PRO:HB2 | 4 | 0.37 |
| (2,884) | 1:A:42:PRO:HD3 | 1:A:42:PRO:HB2 | 13 | 0.37 |
| (2,745) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HA | 7 | 0.37 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG21 | 8 | 0.37 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG22 | 8 | 0.37 |
| (2,708) | 1:A:30:ALA:HA | 1:A:45:ILE:HG23 | 8 | 0.37 |
| (2,698) | 1:A:83:ASP:HA | 1:A:82:PHE:H | 7 | 0.37 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:33:THR:HG1 | 6 | 0.37 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:33:THR:HG1 | 6 | 0.37 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:33:THR:HG1 | 6 | 0.37 |
| (2,636) | 1:A:28:LEU:HG | 1:A:29:VAL:HA | 2 | 0.37 |
| (2,636) | 1:A:28:LEU:HG | 1:A:29:VAL:HA | 5 | 0.37 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD11 | 8 | 0.37 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD12 | 8 | 0.37 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD13 | 8 | 0.37 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD11 | 8 | 0.37 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD12 | 8 | 0.37 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD13 | 8 | 0.37 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD11 | 8 | 0.37 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD12 | 8 | 0.37 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD13 | 8 | 0.37 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:10:ALA:H | 13 | 0.37 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:10:ALA:H | 13 | 0.37 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:10:ALA:H | 13 | 0.37 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG21 | 11 | 0.37 |
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG22 | 11 | 0.37 |
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG23 | 11 | 0.37 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:71:ASN:HB3 | 9 | 0.37 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:71:ASN:HB3 | 9 | 0.37 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:71:ASN:HB3 | 9 | 0.37 |
| (2,547) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:29:VAL:H | 7 | 0.37 |
| (2,547) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:29:VAL:H | 8 | 0.37 |
| (2,508) | 1:A:23:GLN:HB3 | 1:A:20:GLN:HA | 9 | 0.37 |
| (2,508) | 1:A:23:GLN:HB3 | 1:A:20:GLN:HA | 11 | 0.37 |
| (2,494) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:23:GLN:H | 9 | 0.37 |
| (2,492) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:19:GLN:HA | 2 | 0.37 |
| (2,471) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HB3 | 7 | 0.37 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:20:GLN:HB3 | 7 | 0.37 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:20:GLN:HB3 | 7 | 0.37 |
| (2,460) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:20:GLN:HB3 | 7 | 0.37 |
| (2,433) | 1:A:21:GLN:HG2 | 1:A:21:GLN:HA | 1 | 0.37 |
| (2,433) | 1:A:21:GLN:HG2 | 1:A:21:GLN:HA | 5 | 0.37 |
| (2,418) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 3 | 0.37 |
| (2,412) | 1:A:19:GLN:HB2 | 1:A:19:GLN:H | 5 | 0.37 |
| (2,412) | 1:A:19:GLN:HB2 | 1:A:19:GLN:H | 7 | 0.37 |
| (2,412) | 1:A:19:GLN:HB2 | 1:A:19:GLN:H | 10 | 0.37 |
| (2,412) | 1:A:19:GLN:HB2 | 1:A:19:GLN:H | 15 | 0.37 |
| (2,321) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:86:THR:HA | 2 | 0.37 |
| (2,321) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:86:THR:HA | 8 | 0.37 |
| (2,321) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:86:THR:HA | 10 | 0.37 |
| (2,299) | 1:A:13:LEU:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 4 | 0.37 |
| (2,296) | 1:A:68:LEU:HB2 | 1:A:68:LEU:H | 7 | 0.37 |
| (2,295) | 1:A:59:LEU:HB2 | 1:A:60:THR:H | 12 | 0.37 |
| (2,295) | 1:A:59:LEU:HB2 | 1:A:60:THR:H | 13 | 0.37 |
| (2,292) | 1:A:68:LEU:HB2 | 1:A:65:ARG:HA | 8 | 0.37 |
| (2,1881) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HG | 16 | 0.37 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:H | 10 | 0.37 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:H | 10 | 0.37 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:H | 10 | 0.37 |
| (2,1868) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:ASN:H | 1 | 0.37 |
| (2,1801) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:96:THR:HG21 | 5 | 0.37 |
| (2,1801) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:96:THR:HG22 | 5 | 0.37 |
| (2,1801) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:96:THR:HG23 | 5 | 0.37 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:40:HIS:HB2 | 3 | 0.37 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:40:HIS:HB2 | 3 | 0.37 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:40:HIS:HB2 | 3 | 0.37 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG21 | 16 | 0.37 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG22 | 16 | 0.37 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG23 | 16 | 0.37 |
| (2,1729) | 1:A:93:HIS:HA | 1:A:90:LEU:HA | 12 | 0.37 |
| (2,1720) | 1:A:92:GLN:HG3 | 1:A:89:ALA:HA | 10 | 0.37 |
| (2,1697) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:94:LEU:HB3 | 2 | 0.37 |
| (2,1697) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:94:LEU:HB3 | 4 | 0.37 |
| (2,1697) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:94:LEU:HB3 | 15 | 0.37 |
| (2,1677) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HA | 6 | 0.37 |
| (2,1677) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HA | 15 | 0.37 |
| (2,1677) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HA | 16 | 0.37 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD21 | 3 | 0.37 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD22 | 3 | 0.37 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD23 | 3 | 0.37 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD21 | 9 | 0.37 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD22 | 9 | 0.37 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD23 | 9 | 0.37 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 9 | 0.37 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 9 | 0.37 |
| (2,1626) | 1:A:87:PRO:HD2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 9 | 0.37 |
| (2,1625) | 1:A:87:PRO:HB2 | 1:A:88:HIS:H | 5 | 0.37 |
| (2,1524) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:16:LEU:HA | 7 | 0.37 |
| (2,1524) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:16:LEU:HA | 10 | 0.37 |
| (2,1524) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:16:LEU:HA | 13 | 0.37 |
| (2,1505) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:71:ASN:HB2 | 12 | 0.37 |
| (2,1505) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:71:ASN:HB2 | 12 | 0.37 |
| (2,1505) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:71:ASN:HB2 | 12 | 0.37 |
| (2,1481) | 1:A:78:PRO:HA | 1:A:80:LEU:H | 13 | 0.37 |
| (2,1480) | 1:A:78:PRO:HA | 1:A:79:THR:H | 3 | 0.37 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:54:LEU:H | 2 | 0.37 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:54:LEU:H | 2 | 0.37 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:54:LEU:H | 2 | 0.37 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:54:LEU:H | 16 | 0.37 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:54:LEU:H | 16 | 0.37 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:54:LEU:H | 16 | 0.37 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG21 | 5 | 0.37 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG22 | 5 | 0.37 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG23 | 5 | 0.37 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG21 | 6 | 0.37 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG22 | 6 | 0.37 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG23 | 6 | 0.37 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG21 | 14 | 0.37 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG22 | 14 | 0.37 |
| (2,1382) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:81:ILE:HG23 | 14 | 0.37 |
| (2,1318) | 1:A:68:LEU:HB3 | 1:A:68:LEU:HA | 8 | 0.37 |
| (2,1318) | 1:A:68:LEU:HB3 | 1:A:68:LEU:HA | 9 | 0.37 |
| (2,1204) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:59:LEU:HA | 15 | 0.37 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB1 | 1 | 0.37 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB2 | 1 | 0.37 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB3 | 1 | 0.37 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB1 | 1 | 0.37 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB2 | 1 | 0.37 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB3 | 1 | 0.37 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB1 | 1 | 0.37 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB2 | 1 | 0.37 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB3 | 1 | 0.37 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ALA:H | 6 | 0.37 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ALA:H | 6 | 0.37 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ALA:H | 6 | 0.37 |
| (2,1053) | 1:A:52:LYS:HG2 | 1:A:52:LYS:HA | 8 | 0.37 |
| (2,1030) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG13 | 11 | 0.37 |
| (1,82) | 1:A:86:THR:H | 1:A:84:HIS:HB2 | 3 | 0.37 |
| (1,73) | 1:A:65:ARG:H | 1:A:64:LEU:H | 7 | 0.37 |
| (1,73) | 1:A:65:ARG:H | 1:A:64:LEU:H | 9 | 0.37 |
| (1,602) | 1:A:57:ASP:H | 1:A:57:ASP:HB3 | 1 | 0.37 |
| (1,602) | 1:A:57:ASP:H | 1:A:57:ASP:HB3 | 4 | 0.37 |
| (1,590) | 1:A:96:THR:H | 1:A:97:ARG:H | 4 | 0.37 |
| (1,561) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:21:GLN:HB2 | 2 | 0.37 |
| (1,479) | 1:A:68:LEU:H | 1:A:68:LEU:HG | 14 | 0.37 |
| (1,415) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HB2 | 9 | 0.37 |
| (1,415) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HB2 | 14 | 0.37 |
| (1,40) | 1:A:16:LEU:H | 1:A:15:GLY:H | 5 | 0.37 |
| (1,40) | 1:A:16:LEU:H | 1:A:15:GLY:H | 8 | 0.37 |
| (1,368) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:93:HIS:HB3 | 1 | 0.37 |
| (1,342) | 1:A:66:ASN:H | 1:A:66:ASN:HB2 | 11 | 0.37 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD21 | 10 | 0.37 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD22 | 10 | 0.37 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD23 | 10 | 0.37 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD21 | 12 | 0.37 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD22 | 12 | 0.37 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD23 | 12 | 0.37 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD21 | 13 | 0.37 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD22 | 13 | 0.37 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD23 | 13 | 0.37 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,33) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:55:GLY:H | 8 | 0.37 |
| (1,33) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:55:GLY:H | 14 | 0.37 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD11 | 11 | 0.37 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD12 | 11 | 0.37 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD13 | 11 | 0.37 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD11 | 13 | 0.37 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD12 | 13 | 0.37 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD13 | 13 | 0.37 |
| (1,304) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HB2 | 3 | 0.37 |
| (1,208) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:47:PRO:HG3 | 10 | 0.37 |
| (1,189) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:53:ASP:HB3 | 6 | 0.37 |
| (1,158) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:4:SER:HA | 8 | 0.37 |
| (1,11) | 1:A:96:THR:H | 1:A:95:HIS:H | 12 | 0.37 |
| (2,976) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:50:ALA:H | 1 | 0.36 |
| (2,946) | 1:A:47:PRO:HD3 | 1:A:46:SER:HA | 4 | 0.36 |
| (2,946) | 1:A:47:PRO:HD3 | 1:A:46:SER:HA | 5 | 0.36 |
| (2,890) | 1:A:41:THR:HA | 1:A:41:THR:HG21 | 11 | 0.36 |
| (2,890) | 1:A:41:THR:HA | 1:A:41:THR:HG22 | 11 | 0.36 |
| (2,890) | 1:A:41:THR:HA | 1:A:41:THR:HG23 | 11 | 0.36 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:73:GLY:HA2 | 15 | 0.36 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:73:GLY:HA2 | 15 | 0.36 |
| (2,852) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:73:GLY:HA2 | 15 | 0.36 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG21 | 4 | 0.36 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG22 | 4 | 0.36 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG23 | 4 | 0.36 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG21 | 6 | 0.36 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG22 | 6 | 0.36 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG23 | 6 | 0.36 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG21 | 4 | 0.36 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG22 | 4 | 0.36 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG23 | 4 | 0.36 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG21 | 6 | 0.36 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG22 | 6 | 0.36 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG23 | 6 | 0.36 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG21 | 7 | 0.36 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG22 | 7 | 0.36 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG23 | 7 | 0.36 |
| (2,745) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HA | 8 | 0.36 |
| (2,745) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HA | 14 | 0.36 |
| (2,682) | 1:A:62:LEU:HD11 | 1:A:78:PRO:HB2 | 6 | 0.36 |
| (2,682) | 1:A:62:LEU:HD12 | 1:A:78:PRO:HB2 | 6 | 0.36 |
| (2,682) | 1:A:62:LEU:HD13 | 1:A:78:PRO:HB2 | 6 | 0.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:33:THR:HG1 | 4 | 0.36 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:33:THR:HG1 | 4 | 0.36 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:33:THR:HG1 | 4 | 0.36 |
| (2,636) | 1:A:28:LEU:HG | 1:A:29:VAL:HA | 3 | 0.36 |
| (2,636) | 1:A:28:LEU:HG | 1:A:29:VAL:HA | 6 | 0.36 |
| (2,636) | 1:A:28:LEU:HG | 1:A:29:VAL:HA | 7 | 0.36 |
| (2,636) | 1:A:28:LEU:HG | 1:A:29:VAL:HA | 13 | 0.36 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:64:LEU:HB3 | 11 | 0.36 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:64:LEU:HB3 | 11 | 0.36 |
| (2,63) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:64:LEU:HB3 | 11 | 0.36 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD11 | 7 | 0.36 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD12 | 7 | 0.36 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD13 | 7 | 0.36 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD11 | 7 | 0.36 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD12 | 7 | 0.36 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD13 | 7 | 0.36 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD11 | 7 | 0.36 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD12 | 7 | 0.36 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD13 | 7 | 0.36 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:71:ASN:HB3 | 2 | 0.36 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:71:ASN:HB3 | 2 | 0.36 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:71:ASN:HB3 | 2 | 0.36 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:71:ASN:HB3 | 11 | 0.36 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:71:ASN:HB3 | 11 | 0.36 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:71:ASN:HB3 | 11 | 0.36 |
| (2,52) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:85:PRO:HA | 9 | 0.36 |
| (2,52) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:85:PRO:HA | 9 | 0.36 |
| (2,471) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HB3 | 10 | 0.36 |
| (2,414) | 1:A:9:LEU:HA | 1:A:8:ASP:HB2 | 3 | 0.36 |
| (2,414) | 1:A:9:LEU:HA | 1:A:8:ASP:HB2 | 5 | 0.36 |
| (2,414) | 1:A:9:LEU:HA | 1:A:8:ASP:HB2 | 8 | 0.36 |
| (2,366) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:17:SER:HA | 2 | 0.36 |
| (2,364) | 1:A:17:SER:HB2 | 1:A:17:SER:H | 7 | 0.36 |
| (2,364) | 1:A:17:SER:HB2 | 1:A:17:SER:H | 13 | 0.36 |
| (2,347) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:LEU:HD21 | 15 | 0.36 |
| (2,347) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:LEU:HD22 | 15 | 0.36 |
| (2,347) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:LEU:HD23 | 15 | 0.36 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD21 | 1 | 0.36 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD22 | 1 | 0.36 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD23 | 1 | 0.36 |
| (2,321) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:86:THR:HA | 4 | 0.36 |
| (2,321) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:86:THR:HA | 16 | 0.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,204) | 1:A:9:LEU:HB3 | 1:A:10:ALA:H | 16 | 0.36 |
| (2,1888) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:13:LEU:H | 9 | 0.36 |
| (2,1888) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:13:LEU:H | 12 | 0.36 |
| (2,1771) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:98:LEU:H | 7 | 0.36 |
| (2,1771) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:98:LEU:H | 13 | 0.36 |
| (2,1771) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:98:LEU:H | 16 | 0.36 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:40:HIS:HB2 | 2 | 0.36 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:40:HIS:HB2 | 2 | 0.36 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:40:HIS:HB2 | 2 | 0.36 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:40:HIS:HB2 | 5 | 0.36 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:40:HIS:HB2 | 5 | 0.36 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:40:HIS:HB2 | 5 | 0.36 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:40:HIS:HB2 | 15 | 0.36 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:40:HIS:HB2 | 15 | 0.36 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:40:HIS:HB2 | 15 | 0.36 |
| (2,1729) | 1:A:93:HIS:HA | 1:A:90:LEU:HA | 1 | 0.36 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD21 | 7 | 0.36 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD22 | 7 | 0.36 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD23 | 7 | 0.36 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD21 | 8 | 0.36 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD22 | 8 | 0.36 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD23 | 8 | 0.36 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD21 | 10 | 0.36 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD22 | 10 | 0.36 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD23 | 10 | 0.36 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD21 | 11 | 0.36 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD22 | 11 | 0.36 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD23 | 11 | 0.36 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD21 | 12 | 0.36 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD22 | 12 | 0.36 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD23 | 12 | 0.36 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD21 | 16 | 0.36 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD22 | 16 | 0.36 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD23 | 16 | 0.36 |
| (2,1663) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:84:HIS:HB3 | 2 | 0.36 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:90:LEU:H | 8 | 0.36 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:90:LEU:H | 8 | 0.36 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:90:LEU:H | 8 | 0.36 |
| (2,1601) | 1:A:86:THR:HB | 1:A:87:PRO:HD2 | 15 | 0.36 |
| (2,1567) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:83:ASP:H | 3 | 0.36 |
| (2,1539) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:99:THR:H | 13 | 0.36 |
| (2,1524) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:16:LEU:HA | 1 | 0.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1524) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:16:LEU:HA | 4 | 0.36 |
| (2,1524) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:16:LEU:HA | 5 | 0.36 |
| (2,1524) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:16:LEU:HA | 14 | 0.36 |
| (2,1524) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:16:LEU:HA | 16 | 0.36 |
| (2,1521) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:21:GLN:HG2 | 4 | 0.36 |
| (2,1498) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:82:PHE:HB2 | 15 | 0.36 |
| (2,1483) | 1:A:60:THR:HA | 1:A:63:GLU:HB2 | 5 | 0.36 |
| (2,1483) | 1:A:60:THR:HA | 1:A:63:GLU:HB2 | 14 | 0.36 |
| (2,1468) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:75:ASP:H | 15 | 0.36 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HB | 9 | 0.36 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HB | 9 | 0.36 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HB | 9 | 0.36 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:54:LEU:H | 6 | 0.36 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:54:LEU:H | 6 | 0.36 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:54:LEU:H | 6 | 0.36 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:54:LEU:H | 7 | 0.36 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:54:LEU:H | 7 | 0.36 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:54:LEU:H | 7 | 0.36 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:54:LEU:H | 13 | 0.36 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:54:LEU:H | 13 | 0.36 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:54:LEU:H | 13 | 0.36 |
| (2,1377) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:74:LEU:HD21 | 16 | 0.36 |
| (2,1377) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:74:LEU:HD22 | 16 | 0.36 |
| (2,1377) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:74:LEU:HD23 | 16 | 0.36 |
| (2,1363) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:93:HIS:H | 2 | 0.36 |
| (2,1363) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:93:HIS:H | 13 | 0.36 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG21 | 1:A:63:GLU:HB2 | 14 | 0.36 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG22 | 1:A:63:GLU:HB2 | 14 | 0.36 |
| (2,1197) | 1:A:60:THR:HG23 | 1:A:63:GLU:HB2 | 14 | 0.36 |
| (2,1192) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:65:ARG:HB2 | 7 | 0.36 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB1 | 11 | 0.36 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB2 | 11 | 0.36 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB3 | 11 | 0.36 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB1 | 11 | 0.36 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB2 | 11 | 0.36 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB3 | 11 | 0.36 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB1 | 11 | 0.36 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB2 | 11 | 0.36 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB3 | 11 | 0.36 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ALA:H | 11 | 0.36 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ALA:H | 11 | 0.36 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ALA:H | 11 | 0.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1053) | 1:A:52:LYS:HG2 | 1:A:52:LYS:HA | 14 | 0.36 |
| (2,1044) | 1:A:52:LYS:HB2 | 1:A:52:LYS:HE2 | 3 | 0.36 |
| (2,1030) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG13 | 15 | 0.36 |
| (2,1029) | 1:A:51:PHE:HB3 | 1:A:52:LYS:HG2 | 9 | 0.36 |
| (1,73) | 1:A:65:ARG:H | 1:A:64:LEU:H | 1 | 0.36 |
| (1,73) | 1:A:65:ARG:H | 1:A:64:LEU:H | 3 | 0.36 |
| (1,73) | 1:A:65:ARG:H | 1:A:64:LEU:H | 16 | 0.36 |
| (1,602) | 1:A:57:ASP:H | 1:A:57:ASP:HB3 | 5 | 0.36 |
| (1,599) | 1:A:33:THR:H | 1:A:33:THR:HG1 | 8 | 0.36 |
| (1,599) | 1:A:33:THR:H | 1:A:33:THR:HG1 | 13 | 0.36 |
| (1,590) | 1:A:96:THR:H | 1:A:97:ARG:H | 11 | 0.36 |
| (1,438) | 1:A:75:ASP:H | 1:A:76:LEU:H | 9 | 0.36 |
| (1,438) | 1:A:75:ASP:H | 1:A:76:LEU:H | 14 | 0.36 |
| (1,409) | 1:A:4:SER:H | 1:A:4:SER:HB2 | 6 | 0.36 |
| (1,368) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:93:HIS:HB3 | 9 | 0.36 |
| (1,342) | 1:A:66:ASN:H | 1:A:66:ASN:HB2 | 7 | 0.36 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB1 | 8 | 0.36 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB2 | 8 | 0.36 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB3 | 8 | 0.36 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD11 | 8 | 0.36 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD12 | 8 | 0.36 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD13 | 8 | 0.36 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD11 | 14 | 0.36 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD12 | 14 | 0.36 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD13 | 14 | 0.36 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 2 | 0.36 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 2 | 0.36 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 2 | 0.36 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 4 | 0.36 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 4 | 0.36 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 4 | 0.36 |
| (1,249) | 1:A:99:THR:H | 1:A:98:LEU:HB2 | 3 | 0.36 |
| (1,21) | 1:A:7:THR:H | 1:A:6:ALA:H | 4 | 0.36 |
| (1,208) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:47:PRO:HG3 | 1 | 0.36 |
| (1,208) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:47:PRO:HG3 | 2 | 0.36 |
| (1,208) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:47:PRO:HG3 | 6 | 0.36 |
| (1,189) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:53:ASP:HB3 | 4 | 0.36 |
| (1,189) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:53:ASP:HB3 | 7 | 0.36 |
| (1,189) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:53:ASP:HB3 | 12 | 0.36 |
| (1,189) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:53:ASP:HB3 | 13 | 0.36 |
| (1,189) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:53:ASP:HB3 | 16 | 0.36 |
| (1,11) | 1:A:96:THR:H | 1:A:95:HIS:H | 15 | 0.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,946) | 1:A:47:PRO:HD3 | 1:A:46:SER:HA | 1 | 0.35 |
| (2,946) | 1:A:47:PRO:HD3 | 1:A:46:SER:HA | 13 | 0.35 |
| (2,943) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:47:PRO:HG2 | 10 | 0.35 |
| (2,890) | 1:A:41:THR:HA | 1:A:41:THR:HG21 | 2 | 0.35 |
| (2,890) | 1:A:41:THR:HA | 1:A:41:THR:HG22 | 2 | 0.35 |
| (2,890) | 1:A:41:THR:HA | 1:A:41:THR:HG23 | 2 | 0.35 |
| (2,884) | 1:A:42:PRO:HD3 | 1:A:42:PRO:HB2 | 1 | 0.35 |
| (2,884) | 1:A:42:PRO:HD3 | 1:A:42:PRO:HB2 | 6 | 0.35 |
| (2,884) | 1:A:42:PRO:HD3 | 1:A:42:PRO:HB2 | 8 | 0.35 |
| (2,884) | 1:A:42:PRO:HD3 | 1:A:42:PRO:HB2 | 9 | 0.35 |
| (2,884) | 1:A:42:PRO:HD3 | 1:A:42:PRO:HB2 | 11 | 0.35 |
| (2,884) | 1:A:42:PRO:HD3 | 1:A:42:PRO:HB2 | 12 | 0.35 |
| (2,884) | 1:A:42:PRO:HD3 | 1:A:42:PRO:HB2 | 16 | 0.35 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG21 | 10 | 0.35 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG22 | 10 | 0.35 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG23 | 10 | 0.35 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG21 | 11 | 0.35 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG22 | 11 | 0.35 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG23 | 11 | 0.35 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG21 | 16 | 0.35 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG22 | 16 | 0.35 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG23 | 16 | 0.35 |
| (2,745) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HA | 10 | 0.35 |
| (2,745) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HA | 13 | 0.35 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HA | 7 | 0.35 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HA | 7 | 0.35 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HA | 7 | 0.35 |
| (2,698) | 1:A:83:ASP:HA | 1:A:82:PHE:H | 16 | 0.35 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:33:THR:HG1 | 12 | 0.35 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:33:THR:HG1 | 12 | 0.35 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:33:THR:HG1 | 12 | 0.35 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:71:ASN:HB3 | 8 | 0.35 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:71:ASN:HB3 | 8 | 0.35 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:71:ASN:HB3 | 8 | 0.35 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:71:ASN:HB3 | 9 | 0.35 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:71:ASN:HB3 | 9 | 0.35 |
| (2,648) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:71:ASN:HB3 | 9 | 0.35 |
| (2,636) | 1:A:28:LEU:HG | 1:A:29:VAL:HA | 1 | 0.35 |
| (2,636) | 1:A:28:LEU:HG | 1:A:29:VAL:HA | 4 | 0.35 |
| (2,636) | 1:A:28:LEU:HG | 1:A:29:VAL:HA | 8 | 0.35 |
| (2,619) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:28:LEU:HB2 | 1 | 0.35 |
| (2,619) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:28:LEU:HB2 | 2 | 0.35 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,619) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:28:LEU:HB2 | 3 | 0.35 |
| (2,619) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:28:LEU:HB2 | 4 | 0.35 |
| (2,619) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:28:LEU:HB2 | 5 | 0.35 |
| (2,619) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:28:LEU:HB2 | 6 | 0.35 |
| (2,619) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:28:LEU:HB2 | 7 | 0.35 |
| (2,619) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:28:LEU:HB2 | 8 | 0.35 |
| (2,619) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:28:LEU:HB2 | 9 | 0.35 |
| (2,619) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:28:LEU:HB2 | 10 | 0.35 |
| (2,619) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:28:LEU:HB2 | 11 | 0.35 |
| (2,619) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:28:LEU:HB2 | 12 | 0.35 |
| (2,619) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:28:LEU:HB2 | 13 | 0.35 |
| (2,619) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:28:LEU:HB2 | 14 | 0.35 |
| (2,619) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:28:LEU:HB2 | 15 | 0.35 |
| (2,619) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:28:LEU:HB2 | 16 | 0.35 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB1 | 2 | 0.35 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB2 | 2 | 0.35 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB3 | 2 | 0.35 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB1 | 5 | 0.35 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB2 | 5 | 0.35 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB3 | 5 | 0.35 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB1 | 9 | 0.35 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB2 | 9 | 0.35 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB3 | 9 | 0.35 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:10:ALA:H | 3 | 0.35 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:10:ALA:H | 3 | 0.35 |
| (2,6) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:10:ALA:H | 3 | 0.35 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:H | 1 | 0.35 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:H | 1 | 0.35 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 1 | 0.35 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:H | 4 | 0.35 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:H | 4 | 0.35 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 4 | 0.35 |
| (2,571) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:ALA:H | 2 | 0.35 |
| (2,511) | 1:A:23:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HA | 3 | 0.35 |
| (2,414) | 1:A:9:LEU:HA | 1:A:8:ASP:HB2 | 4 | 0.35 |
| (2,412) | 1:A:19:GLN:HB2 | 1:A:19:GLN:H | 12 | 0.35 |
| (2,412) | 1:A:19:GLN:HB2 | 1:A:19:GLN:H | 16 | 0.35 |
| (2,395) | 1:A:80:LEU:HA | 1:A:83:ASP:HB3 | 11 | 0.35 |
| (2,366) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:17:SER:HA | 13 | 0.35 |
| (2,34) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:51:PHE:HZ | 16 | 0.35 |
| (2,335) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 3 | 0.35 |
| (2,321) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:86:THR:HA | 1 | 0.35 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,321) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:86:THR:HA | 3 | 0.35 |
| (2,321) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:86:THR:HA | 6 | 0.35 |
| (2,321) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:86:THR:HA | 7 | 0.35 |
| (2,321) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:86:THR:HA | 12 | 0.35 |
| (2,321) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:86:THR:HA | 13 | 0.35 |
| (2,321) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:86:THR:HA | 15 | 0.35 |
| (2,296) | 1:A:68:LEU:HB2 | 1:A:68:LEU:H | 12 | 0.35 |
| (2,295) | 1:A:59:LEU:HB2 | 1:A:60:THR:H | 16 | 0.35 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG21 | 3 | 0.35 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG22 | 3 | 0.35 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG23 | 3 | 0.35 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD11 | 6 | 0.35 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD12 | 6 | 0.35 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD13 | 6 | 0.35 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD11 | 6 | 0.35 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD12 | 6 | 0.35 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD13 | 6 | 0.35 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD11 | 6 | 0.35 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD12 | 6 | 0.35 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD13 | 6 | 0.35 |
| (2,204) | 1:A:9:LEU:HB3 | 1:A:10:ALA:H | 6 | 0.35 |
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HB3 | 6 | 0.35 |
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HB3 | 6 | 0.35 |
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HB3 | 6 | 0.35 |
| (2,1888) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:13:LEU:H | 13 | 0.35 |
| (2,1881) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HG | 7 | 0.35 |
| (2,1864) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:ASN:HA | 15 | 0.35 |
| (2,1806) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:97:ARG:HA | 6 | 0.35 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG21 | 6 | 0.35 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG22 | 6 | 0.35 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG23 | 6 | 0.35 |
| (2,1772) | 1:A:97:ARG:HD3 | 1:A:97:ARG:HD2 | 9 | 0.35 |
| (2,1772) | 1:A:97:ARG:HD3 | 1:A:97:ARG:HD2 | 16 | 0.35 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:40:HIS:HB2 | 14 | 0.35 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:40:HIS:HB2 | 14 | 0.35 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:40:HIS:HB2 | 14 | 0.35 |
| (2,1729) | 1:A:93:HIS:HA | 1:A:90:LEU:HA | 7 | 0.35 |
| (2,1722) | 1:A:92:GLN:HG3 | 1:A:92:GLN:H | 5 | 0.35 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD11 | 4 | 0.35 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD12 | 4 | 0.35 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD13 | 4 | 0.35 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD11 | 4 | 0.35 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD12 | 4 | 0.35 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD13 | 4 | 0.35 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD11 | 4 | 0.35 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD12 | 4 | 0.35 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD13 | 4 | 0.35 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HZ | 11 | 0.35 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HZ | 11 | 0.35 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HZ | 11 | 0.35 |
| (2,1677) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HA | 13 | 0.35 |
| (2,1677) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HA | 14 | 0.35 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD21 | 4 | 0.35 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD22 | 4 | 0.35 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD23 | 4 | 0.35 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD21 | 6 | 0.35 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD22 | 6 | 0.35 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD23 | 6 | 0.35 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD21 | 13 | 0.35 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD22 | 13 | 0.35 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD23 | 13 | 0.35 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD21 | 14 | 0.35 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD22 | 14 | 0.35 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD23 | 14 | 0.35 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD21 | 15 | 0.35 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD22 | 15 | 0.35 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD23 | 15 | 0.35 |
| (2,1567) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:83:ASP:H | 11 | 0.35 |
| (2,1543) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:51:PHE:HD1 | 13 | 0.35 |
| (2,1543) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:51:PHE:HD2 | 13 | 0.35 |
| (2,1543) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:51:PHE:HD1 | 15 | 0.35 |
| (2,1543) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:51:PHE:HD2 | 15 | 0.35 |
| (2,1540) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:95:HIS:HA | 11 | 0.35 |
| (2,1524) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:16:LEU:HA | 2 | 0.35 |
| (2,1524) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:16:LEU:HA | 8 | 0.35 |
| (2,1524) | 1:A:16:LEU:HB3 | 1:A:16:LEU:HA | 12 | 0.35 |
| (2,1483) | 1:A:60:THR:HA | 1:A:63:GLU:HB2 | 6 | 0.35 |
| (2,1481) | 1:A:78:PRO:HA | 1:A:80:LEU:H | 8 | 0.35 |
| (2,1480) | 1:A:78:PRO:HA | 1:A:79:THR:H | 2 | 0.35 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 15 | 0.35 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 15 | 0.35 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 15 | 0.35 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 15 | 0.35 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 15 | 0.35 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 15 | 0.35 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 15 | 0.35 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 15 | 0.35 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 15 | 0.35 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HB | 1 | 0.35 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HB | 1 | 0.35 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HB | 1 | 0.35 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:54:LEU:H | 10 | 0.35 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:54:LEU:H | 10 | 0.35 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:54:LEU:H | 10 | 0.35 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:54:LEU:H | 11 | 0.35 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:54:LEU:H | 11 | 0.35 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:54:LEU:H | 11 | 0.35 |
| (2,1363) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:93:HIS:H | 3 | 0.35 |
| (2,1334) | 1:A:69:THR:HA | 1:A:74:LEU:H | 10 | 0.35 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG11 | 14 | 0.35 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG12 | 14 | 0.35 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG13 | 14 | 0.35 |
| (2,1204) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:59:LEU:HA | 5 | 0.35 |
| (2,1203) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:63:GLU:H | 11 | 0.35 |
| (2,1194) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 14 | 0.35 |
| (2,117) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:4:SER:HA | 15 | 0.35 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB1 | 9 | 0.35 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB2 | 9 | 0.35 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB3 | 9 | 0.35 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB1 | 9 | 0.35 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB2 | 9 | 0.35 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB3 | 9 | 0.35 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB1 | 9 | 0.35 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB2 | 9 | 0.35 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB3 | 9 | 0.35 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ALA:H | 8 | 0.35 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ALA:H | 8 | 0.35 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ALA:H | 8 | 0.35 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ALA:H | 12 | 0.35 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ALA:H | 12 | 0.35 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ALA:H | 12 | 0.35 |
| (2,1053) | 1:A:52:LYS:HG2 | 1:A:52:LYS:HA | 5 | 0.35 |
| (2,1047) | 1:A:52:LYS:HB2 | 1:A:53:ASP:H | 13 | 0.35 |
| (2,1047) | 1:A:52:LYS:HB2 | 1:A:53:ASP:H | 16 | 0.35 |
| (2,1044) | 1:A:52:LYS:HB2 | 1:A:52:LYS:HE2 | 11 | 0.35 |
| (2,1043) | 1:A:52:LYS:HB3 | 1:A:52:LYS:HE2 | 15 | 0.35 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1030) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG13 | 13 | 0.35 |
| (2,1030) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG13 | 16 | 0.35 |
| (2,1007) | 1:A:39:HIS:HA | 1:A:39:HIS:HD2 | 11 | 0.35 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG21 | 3 | 0.35 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG22 | 3 | 0.35 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG23 | 3 | 0.35 |
| (1,82) | 1:A:86:THR:H | 1:A:84:HIS:HB2 | 7 | 0.35 |
| (1,80) | 1:A:86:THR:H | 1:A:85:PRO:HD2 | 9 | 0.35 |
| (1,73) | 1:A:65:ARG:H | 1:A:64:LEU:H | 4 | 0.35 |
| (1,73) | 1:A:65:ARG:H | 1:A:64:LEU:H | 10 | 0.35 |
| (1,599) | 1:A:33:THR:H | 1:A:33:THR:HG1 | 5 | 0.35 |
| (1,599) | 1:A:33:THR:H | 1:A:33:THR:HG1 | 10 | 0.35 |
| (1,599) | 1:A:33:THR:H | 1:A:33:THR:HG1 | 12 | 0.35 |
| (1,590) | 1:A:96:THR:H | 1:A:97:ARG:H | 15 | 0.35 |
| (1,56) | 1:A:60:THR:H | 1:A:59:LEU:HB2 | 10 | 0.35 |
| (1,527) | 1:A:93:HIS:H | 1:A:92:GLN:HB3 | 9 | 0.35 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB1 | 1 | 0.35 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB2 | 1 | 0.35 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB3 | 1 | 0.35 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB1 | 4 | 0.35 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB2 | 4 | 0.35 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB3 | 4 | 0.35 |
| (1,479) | 1:A:68:LEU:H | 1:A:68:LEU:HG | 8 | 0.35 |
| (1,398) | 1:A:44:SER:H | 1:A:43:GLU:HG2 | 1 | 0.35 |
| (1,398) | 1:A:44:SER:H | 1:A:43:GLU:HG2 | 12 | 0.35 |
| (1,368) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:93:HIS:HB3 | 3 | 0.35 |
| (1,368) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:93:HIS:HB3 | 13 | 0.35 |
| (1,349) | 1:A:17:SER:H | 1:A:20:GLN:HB2 | 3 | 0.35 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD21 | 15 | 0.35 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD22 | 15 | 0.35 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD23 | 15 | 0.35 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD11 | 2 | 0.35 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD12 | 2 | 0.35 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD13 | 2 | 0.35 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD11 | 6 | 0.35 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD12 | 6 | 0.35 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD13 | 6 | 0.35 |
| (1,268) | 1:A:99:THR:H | 1:A:98:LEU:HD21 | 6 | 0.35 |
| (1,268) | 1:A:99:THR:H | 1:A:98:LEU:HD22 | 6 | 0.35 |
| (1,268) | 1:A:99:THR:H | 1:A:98:LEU:HD23 | 6 | 0.35 |
| (1,233) | 1:A:102:HIS:H | 1:A:102:HIS:HB2 | 4 | 0.35 |
| (1,233) | 1:A:102:HIS:H | 1:A:102:HIS:HB2 | 7 | 0.35 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,22) | 1:A:43:GLU:H | 1:A:44:SER:H | 9 | 0.35 |
| (1,22) | 1:A:43:GLU:H | 1:A:44:SER:H | 11 | 0.35 |
| (1,21) | 1:A:7:THR:H | 1:A:6:ALA:H | 7 | 0.35 |
| (1,189) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:53:ASP:HB3 | 8 | 0.35 |
| (1,189) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:53:ASP:HB3 | 9 | 0.35 |
| (1,17) | 1:A:100:GLN:H | 1:A:99:THR:H | 7 | 0.35 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB1 | 11 | 0.35 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB2 | 11 | 0.35 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB3 | 11 | 0.35 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB1 | 13 | 0.35 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB2 | 13 | 0.35 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB3 | 13 | 0.35 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB1 | 16 | 0.35 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB2 | 16 | 0.35 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB3 | 16 | 0.35 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD11 | 7 | 0.34 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD12 | 7 | 0.34 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD13 | 7 | 0.34 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD11 | 7 | 0.34 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD12 | 7 | 0.34 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD13 | 7 | 0.34 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD11 | 7 | 0.34 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD12 | 7 | 0.34 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD13 | 7 | 0.34 |
| (2,943) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:47:PRO:HG2 | 2 | 0.34 |
| (2,943) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:47:PRO:HG2 | 7 | 0.34 |
| (2,943) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:47:PRO:HG2 | 14 | 0.34 |
| (2,943) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:47:PRO:HG2 | 16 | 0.34 |
| (2,932) | 1:A:45:ILE:HG13 | 1:A:42:PRO:HA | 5 | 0.34 |
| (2,884) | 1:A:42:PRO:HD3 | 1:A:42:PRO:HB2 | 7 | 0.34 |
| (2,884) | 1:A:42:PRO:HD3 | 1:A:42:PRO:HB2 | 14 | 0.34 |
| (2,884) | 1:A:42:PRO:HD3 | 1:A:42:PRO:HB2 | 15 | 0.34 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:74:LEU:H | 10 | 0.34 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:74:LEU:H | 10 | 0.34 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:74:LEU:H | 10 | 0.34 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG21 | 13 | 0.34 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG22 | 13 | 0.34 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG23 | 13 | 0.34 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG21 | 15 | 0.34 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG22 | 15 | 0.34 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG23 | 15 | 0.34 |
| (2,745) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HA | 12 | 0.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,745) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HA | 16 | 0.34 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HA | 7 | 0.34 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HA | 7 | 0.34 |
| (2,73) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HA | 7 | 0.34 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB1 | 9 | 0.34 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB2 | 9 | 0.34 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB3 | 9 | 0.34 |
| (2,698) | 1:A:83:ASP:HA | 1:A:82:PHE:H | 1 | 0.34 |
| (2,698) | 1:A:83:ASP:HA | 1:A:82:PHE:H | 2 | 0.34 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:33:THR:HG1 | 11 | 0.34 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:33:THR:HG1 | 11 | 0.34 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:33:THR:HG1 | 11 | 0.34 |
| (2,641) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:54:LEU:HA | 15 | 0.34 |
| (2,636) | 1:A:28:LEU:HG | 1:A:29:VAL:HA | 11 | 0.34 |
| (2,636) | 1:A:28:LEU:HG | 1:A:29:VAL:HA | 12 | 0.34 |
| (2,636) | 1:A:28:LEU:HG | 1:A:29:VAL:HA | 15 | 0.34 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB1 | 14 | 0.34 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB2 | 14 | 0.34 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB3 | 14 | 0.34 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD11 | 15 | 0.34 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD12 | 15 | 0.34 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD13 | 15 | 0.34 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD11 | 15 | 0.34 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD12 | 15 | 0.34 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD13 | 15 | 0.34 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD11 | 15 | 0.34 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD12 | 15 | 0.34 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD13 | 15 | 0.34 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:H | 2 | 0.34 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:H | 2 | 0.34 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 2 | 0.34 |
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG21 | 8 | 0.34 |
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG22 | 8 | 0.34 |
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG23 | 8 | 0.34 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:71:ASN:HB3 | 14 | 0.34 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:71:ASN:HB3 | 14 | 0.34 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:71:ASN:HB3 | 14 | 0.34 |
| (2,478) | 1:A:59:LEU:HG | 1:A:60:THR:H | 11 | 0.34 |
| (2,473) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HD11 | 12 | 0.34 |
| (2,473) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HD12 | 12 | 0.34 |
| (2,473) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HD13 | 12 | 0.34 |
| (2,473) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HD11 | 14 | 0.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,473) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HD12 | 14 | 0.34 |
| (2,473) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HD13 | 14 | 0.34 |
| (2,471) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HB3 | 2 | 0.34 |
| (2,471) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HB3 | 14 | 0.34 |
| (2,466) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:20:GLN:HB3 | 1 | 0.34 |
| (2,466) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:20:GLN:HB3 | 2 | 0.34 |
| (2,466) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:20:GLN:HB3 | 3 | 0.34 |
| (2,466) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:20:GLN:HB3 | 4 | 0.34 |
| (2,466) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:20:GLN:HB3 | 5 | 0.34 |
| (2,466) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:20:GLN:HB3 | 6 | 0.34 |
| (2,466) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:20:GLN:HB3 | 7 | 0.34 |
| (2,466) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:20:GLN:HB3 | 8 | 0.34 |
| (2,466) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:20:GLN:HB3 | 9 | 0.34 |
| (2,466) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:20:GLN:HB3 | 10 | 0.34 |
| (2,466) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:20:GLN:HB3 | 11 | 0.34 |
| (2,466) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:20:GLN:HB3 | 12 | 0.34 |
| (2,466) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:20:GLN:HB3 | 13 | 0.34 |
| (2,466) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:20:GLN:HB3 | 14 | 0.34 |
| (2,466) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:20:GLN:HB3 | 16 | 0.34 |
| (2,423) | 1:A:18:PRO:HA | 1:A:21:GLN:HB2 | 6 | 0.34 |
| (2,418) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 15 | 0.34 |
| (2,366) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:17:SER:HA | 7 | 0.34 |
| (2,364) | 1:A:17:SER:HB2 | 1:A:17:SER:H | 2 | 0.34 |
| (2,347) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:LEU:HD21 | 2 | 0.34 |
| (2,347) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:LEU:HD22 | 2 | 0.34 |
| (2,347) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:LEU:HD23 | 2 | 0.34 |
| (2,345) | 1:A:15:GLY:HA2 | 1:A:15:GLY:H | 12 | 0.34 |
| (2,34) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:51:PHE:HZ | 2 | 0.34 |
| (2,337) | 1:A:11:ALA:HA | 1:A:14:ASN:HB2 | 6 | 0.34 |
| (2,335) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 8 | 0.34 |
| (2,335) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 10 | 0.34 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD21 | 5 | 0.34 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD22 | 5 | 0.34 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD23 | 5 | 0.34 |
| (2,321) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:86:THR:HA | 14 | 0.34 |
| (2,299) | 1:A:13:LEU:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 7 | 0.34 |
| (2,299) | 1:A:13:LEU:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 12 | 0.34 |
| (2,295) | 1:A:59:LEU:HB2 | 1:A:60:THR:H | 11 | 0.34 |
| (2,262) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:12:ARG:H | 2 | 0.34 |
| (2,262) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:12:ARG:H | 6 | 0.34 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD11 | 3 | 0.34 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD12 | 3 | 0.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD13 | 3 | 0.34 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD11 | 3 | 0.34 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD12 | 3 | 0.34 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD13 | 3 | 0.34 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD11 | 3 | 0.34 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD12 | 3 | 0.34 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD13 | 3 | 0.34 |
| (2,204) | 1:A:9:LEU:HB3 | 1:A:10:ALA:H | 3 | 0.34 |
| (2,204) | 1:A:9:LEU:HB3 | 1:A:10:ALA:H | 8 | 0.34 |
| (2,204) | 1:A:9:LEU:HB3 | 1:A:10:ALA:H | 10 | 0.34 |
| (2,204) | 1:A:9:LEU:HB3 | 1:A:10:ALA:H | 11 | 0.34 |
| (2,204) | 1:A:9:LEU:HB3 | 1:A:10:ALA:H | 12 | 0.34 |
| (2,1888) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:13:LEU:H | 5 | 0.34 |
| (2,1888) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:13:LEU:H | 10 | 0.34 |
| (2,1888) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:13:LEU:H | 11 | 0.34 |
| (2,1858) | 1:A:25:LEU:HG | 1:A:21:GLN:HA | 8 | 0.34 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG21 | 2 | 0.34 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG22 | 2 | 0.34 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG23 | 2 | 0.34 |
| (2,1783) | 1:A:98:LEU:HD11 | 1:A:98:LEU:H | 5 | 0.34 |
| (2,1783) | 1:A:98:LEU:HD12 | 1:A:98:LEU:H | 5 | 0.34 |
| (2,1783) | 1:A:98:LEU:HD13 | 1:A:98:LEU:H | 5 | 0.34 |
| (2,1772) | 1:A:97:ARG:HD3 | 1:A:97:ARG:HD2 | 1 | 0.34 |
| (2,1772) | 1:A:97:ARG:HD3 | 1:A:97:ARG:HD2 | 2 | 0.34 |
| (2,1772) | 1:A:97:ARG:HD3 | 1:A:97:ARG:HD2 | 3 | 0.34 |
| (2,1772) | 1:A:97:ARG:HD3 | 1:A:97:ARG:HD2 | 4 | 0.34 |
| (2,1772) | 1:A:97:ARG:HD3 | 1:A:97:ARG:HD2 | 5 | 0.34 |
| (2,1772) | 1:A:97:ARG:HD3 | 1:A:97:ARG:HD2 | 6 | 0.34 |
| (2,1772) | 1:A:97:ARG:HD3 | 1:A:97:ARG:HD2 | 7 | 0.34 |
| (2,1772) | 1:A:97:ARG:HD3 | 1:A:97:ARG:HD2 | 8 | 0.34 |
| (2,1772) | 1:A:97:ARG:HD3 | 1:A:97:ARG:HD2 | 10 | 0.34 |
| (2,1772) | 1:A:97:ARG:HD3 | 1:A:97:ARG:HD2 | 11 | 0.34 |
| (2,1772) | 1:A:97:ARG:HD3 | 1:A:97:ARG:HD2 | 12 | 0.34 |
| (2,1772) | 1:A:97:ARG:HD3 | 1:A:97:ARG:HD2 | 13 | 0.34 |
| (2,1772) | 1:A:97:ARG:HD3 | 1:A:97:ARG:HD2 | 14 | 0.34 |
| (2,1772) | 1:A:97:ARG:HD3 | 1:A:97:ARG:HD2 | 15 | 0.34 |
| (2,1771) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:98:LEU:H | 3 | 0.34 |
| (2,1771) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:98:LEU:H | 15 | 0.34 |
| (2,1729) | 1:A:93:HIS:HA | 1:A:90:LEU:HA | 8 | 0.34 |
| (2,1722) | 1:A:92:GLN:HG3 | 1:A:92:GLN:H | 14 | 0.34 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD11 | 5 | 0.34 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD12 | 5 | 0.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD13 | 5 | 0.34 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD11 | 5 | 0.34 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD12 | 5 | 0.34 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD13 | 5 | 0.34 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD11 | 5 | 0.34 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD12 | 5 | 0.34 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD13 | 5 | 0.34 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD11 | 6 | 0.34 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD12 | 6 | 0.34 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD13 | 6 | 0.34 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD11 | 6 | 0.34 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD12 | 6 | 0.34 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD13 | 6 | 0.34 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD11 | 6 | 0.34 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD12 | 6 | 0.34 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD13 | 6 | 0.34 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HE1 | 1 | 0.34 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HE2 | 1 | 0.34 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HE1 | 1 | 0.34 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HE2 | 1 | 0.34 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HE1 | 1 | 0.34 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HE2 | 1 | 0.34 |
| (2,1677) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:90:LEU:HA | 2 | 0.34 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD21 | 1 | 0.34 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD22 | 1 | 0.34 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD23 | 1 | 0.34 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD21 | 2 | 0.34 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD22 | 2 | 0.34 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD23 | 2 | 0.34 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD21 | 5 | 0.34 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD22 | 5 | 0.34 |
| (2,1669) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD23 | 5 | 0.34 |
| (2,1601) | 1:A:86:THR:HB | 1:A:87:PRO:HD2 | 1 | 0.34 |
| (2,1601) | 1:A:86:THR:HB | 1:A:87:PRO:HD2 | 9 | 0.34 |
| (2,1567) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:83:ASP:H | 15 | 0.34 |
| (2,1567) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:83:ASP:H | 16 | 0.34 |
| (2,1543) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:51:PHE:HD1 | 14 | 0.34 |
| (2,1543) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:51:PHE:HD2 | 14 | 0.34 |
| (2,1483) | 1:A:60:THR:HA | 1:A:63:GLU:HB2 | 4 | 0.34 |
| (2,1483) | 1:A:60:THR:HA | 1:A:63:GLU:HB2 | 13 | 0.34 |
| (2,1481) | 1:A:78:PRO:HA | 1:A:80:LEU:H | 6 | 0.34 |
| (2,1433) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:70:HIS:HD2 | 4 | 0.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 9 | 0.34 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 9 | 0.34 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 9 | 0.34 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 9 | 0.34 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 9 | 0.34 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 9 | 0.34 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 9 | 0.34 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 9 | 0.34 |
| (2,143) | 1:A:33:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 9 | 0.34 |
| (2,1402) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:44:SER:HB3 | 4 | 0.34 |
| (2,1402) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:44:SER:HB3 | 4 | 0.34 |
| (2,1402) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:44:SER:HB3 | 4 | 0.34 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD11 | 6 | 0.34 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD12 | 6 | 0.34 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD13 | 6 | 0.34 |
| (2,1363) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:93:HIS:H | 15 | 0.34 |
| (2,1363) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:93:HIS:H | 16 | 0.34 |
| (2,1327) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:68:LEU:H | 3 | 0.34 |
| (2,1327) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:68:LEU:H | 10 | 0.34 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD11 | 2 | 0.34 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD12 | 2 | 0.34 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD13 | 2 | 0.34 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD11 | 9 | 0.34 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD12 | 9 | 0.34 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD13 | 9 | 0.34 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 2 | 0.34 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 2 | 0.34 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 2 | 0.34 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 7 | 0.34 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 7 | 0.34 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 7 | 0.34 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG11 | 2 | 0.34 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG12 | 2 | 0.34 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG13 | 2 | 0.34 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG11 | 6 | 0.34 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG12 | 6 | 0.34 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG13 | 6 | 0.34 |
| (2,1204) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:59:LEU:HA | 12 | 0.34 |
| (2,1194) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 4 | 0.34 |
| (2,1194) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 6 | 0.34 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB1 | 15 | 0.34 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB2 | 15 | 0.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB3 | 15 | 0.34 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB1 | 15 | 0.34 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB2 | 15 | 0.34 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB3 | 15 | 0.34 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB1 | 15 | 0.34 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB2 | 15 | 0.34 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB3 | 15 | 0.34 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ALA:H | 10 | 0.34 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ALA:H | 10 | 0.34 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ALA:H | 10 | 0.34 |
| (2,1133) | 1:A:58:SER:HB3 | 1:A:59:LEU:HG | 9 | 0.34 |
| (2,1086) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:55:GLY:HA2 | 1 | 0.34 |
| (2,1086) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:55:GLY:HA2 | 2 | 0.34 |
| (2,1086) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:55:GLY:HA2 | 3 | 0.34 |
| (2,1086) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:55:GLY:HA2 | 4 | 0.34 |
| (2,1086) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:55:GLY:HA2 | 5 | 0.34 |
| (2,1086) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:55:GLY:HA2 | 6 | 0.34 |
| (2,1086) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:55:GLY:HA2 | 7 | 0.34 |
| (2,1086) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:55:GLY:HA2 | 8 | 0.34 |
| (2,1086) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:55:GLY:HA2 | 9 | 0.34 |
| (2,1086) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:55:GLY:HA2 | 10 | 0.34 |
| (2,1086) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:55:GLY:HA2 | 11 | 0.34 |
| (2,1086) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:55:GLY:HA2 | 12 | 0.34 |
| (2,1086) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:55:GLY:HA2 | 13 | 0.34 |
| (2,1086) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:55:GLY:HA2 | 14 | 0.34 |
| (2,1086) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:55:GLY:HA2 | 15 | 0.34 |
| (2,1086) | 1:A:55:GLY:HA3 | 1:A:55:GLY:HA2 | 16 | 0.34 |
| (2,1053) | 1:A:52:LYS:HG2 | 1:A:52:LYS:HA | 10 | 0.34 |
| (2,1030) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG13 | 1 | 0.34 |
| (2,1030) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG13 | 3 | 0.34 |
| (2,1030) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG13 | 7 | 0.34 |
| (1,73) | 1:A:65:ARG:H | 1:A:64:LEU:H | 2 | 0.34 |
| (1,73) | 1:A:65:ARG:H | 1:A:64:LEU:H | 5 | 0.34 |
| (1,590) | 1:A:96:THR:H | 1:A:97:ARG:H | 2 | 0.34 |
| (1,569) | 1:A:98:LEU:H | 1:A:98:LEU:HD21 | 11 | 0.34 |
| (1,569) | 1:A:98:LEU:H | 1:A:98:LEU:HD22 | 11 | 0.34 |
| (1,569) | 1:A:98:LEU:H | 1:A:98:LEU:HD23 | 11 | 0.34 |
| (1,568) | 1:A:98:LEU:H | 1:A:98:LEU:HD11 | 5 | 0.34 |
| (1,568) | 1:A:98:LEU:H | 1:A:98:LEU:HD12 | 5 | 0.34 |
| (1,568) | 1:A:98:LEU:H | 1:A:98:LEU:HD13 | 5 | 0.34 |
| (1,561) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:21:GLN:HB2 | 11 | 0.34 |
| (1,56) | 1:A:60:THR:H | 1:A:59:LEU:HB2 | 14 | 0.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,527) | 1:A:93:HIS:H | 1:A:92:GLN:HB3 | 16 | 0.34 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB1 | 2 | 0.34 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB2 | 2 | 0.34 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB3 | 2 | 0.34 |
| (1,44) | 1:A:79:THR:H | 1:A:78:PRO:HA | 12 | 0.34 |
| (1,424) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:51:PHE:HZ | 9 | 0.34 |
| (1,398) | 1:A:44:SER:H | 1:A:43:GLU:HG2 | 4 | 0.34 |
| (1,390) | 1:A:65:ARG:HE | 1:A:65:ARG:HD3 | 14 | 0.34 |
| (1,368) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:93:HIS:HB3 | 2 | 0.34 |
| (1,368) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:93:HIS:HB3 | 5 | 0.34 |
| (1,368) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:93:HIS:HB3 | 12 | 0.34 |
| (1,368) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:93:HIS:HB3 | 15 | 0.34 |
| (1,342) | 1:A:66:ASN:H | 1:A:66:ASN:HB2 | 4 | 0.34 |
| (1,342) | 1:A:66:ASN:H | 1:A:66:ASN:HB2 | 16 | 0.34 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD21 | 2 | 0.34 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD22 | 2 | 0.34 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD23 | 2 | 0.34 |
| (1,33) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:55:GLY:H | 9 | 0.34 |
| (1,270) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:81:ILE:HG12 | 11 | 0.34 |
| (1,268) | 1:A:99:THR:H | 1:A:98:LEU:HD21 | 11 | 0.34 |
| (1,268) | 1:A:99:THR:H | 1:A:98:LEU:HD22 | 11 | 0.34 |
| (1,268) | 1:A:99:THR:H | 1:A:98:LEU:HD23 | 11 | 0.34 |
| (1,25) | 1:A:83:ASP:H | 1:A:84:HIS:H | 2 | 0.34 |
| (1,233) | 1:A:102:HIS:H | 1:A:102:HIS:HB2 | 12 | 0.34 |
| (1,21) | 1:A:7:THR:H | 1:A:6:ALA:H | 2 | 0.34 |
| (1,189) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:53:ASP:HB3 | 10 | 0.34 |
| (1,185) | 1:A:16:LEU:H | 1:A:16:LEU:HD21 | 3 | 0.34 |
| (1,185) | 1:A:16:LEU:H | 1:A:16:LEU:HD22 | 3 | 0.34 |
| (1,185) | 1:A:16:LEU:H | 1:A:16:LEU:HD23 | 3 | 0.34 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB1 | 2 | 0.34 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB2 | 2 | 0.34 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB3 | 2 | 0.34 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB1 | 4 | 0.34 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB2 | 4 | 0.34 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB3 | 4 | 0.34 |
| (1,128) | 1:A:69:THR:H | 1:A:69:THR:HG21 | 10 | 0.34 |
| (1,128) | 1:A:69:THR:H | 1:A:69:THR:HG22 | 10 | 0.34 |
| (1,128) | 1:A:69:THR:H | 1:A:69:THR:HG23 | 10 | 0.34 |
| (1,11) | 1:A:96:THR:H | 1:A:95:HIS:H | 13 | 0.34 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB1 | 1:A:47:PRO:HA | 1 | 0.33 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB2 | 1:A:47:PRO:HA | 1 | 0.33 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB3 | 1:A:47:PRO:HA | 1 | 0.33 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB1 | 1:A:47:PRO:HA | 7 | 0.33 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB2 | 1:A:47:PRO:HA | 7 | 0.33 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB3 | 1:A:47:PRO:HA | 7 | 0.33 |
| (2,943) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:47:PRO:HG2 | 4 | 0.33 |
| (2,943) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:47:PRO:HG2 | 5 | 0.33 |
| (2,943) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:47:PRO:HG2 | 6 | 0.33 |
| (2,943) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:47:PRO:HG2 | 13 | 0.33 |
| (2,904) | 1:A:42:PRO:HG3 | 1:A:42:PRO:HD3 | 1 | 0.33 |
| (2,904) | 1:A:42:PRO:HG3 | 1:A:42:PRO:HD3 | 4 | 0.33 |
| (2,904) | 1:A:42:PRO:HG3 | 1:A:42:PRO:HD3 | 6 | 0.33 |
| (2,904) | 1:A:42:PRO:HG3 | 1:A:42:PRO:HD3 | 12 | 0.33 |
| (2,904) | 1:A:42:PRO:HG3 | 1:A:42:PRO:HD3 | 13 | 0.33 |
| (2,904) | 1:A:42:PRO:HG3 | 1:A:42:PRO:HD3 | 16 | 0.33 |
| (2,897) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:44:SER:HB3 | 8 | 0.33 |
| (2,897) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:44:SER:HB3 | 8 | 0.33 |
| (2,897) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:44:SER:HB3 | 8 | 0.33 |
| (2,884) | 1:A:42:PRO:HD3 | 1:A:42:PRO:HB2 | 2 | 0.33 |
| (2,884) | 1:A:42:PRO:HD3 | 1:A:42:PRO:HB2 | 3 | 0.33 |
| (2,884) | 1:A:42:PRO:HD3 | 1:A:42:PRO:HB2 | 5 | 0.33 |
| (2,884) | 1:A:42:PRO:HD3 | 1:A:42:PRO:HB2 | 10 | 0.33 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG21 | 1 | 0.33 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG22 | 1 | 0.33 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG23 | 1 | 0.33 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG21 | 8 | 0.33 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG22 | 8 | 0.33 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG23 | 8 | 0.33 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG21 | 14 | 0.33 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG22 | 14 | 0.33 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG23 | 14 | 0.33 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG21 | 10 | 0.33 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG22 | 10 | 0.33 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG23 | 10 | 0.33 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:29:VAL:H | 2 | 0.33 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:29:VAL:H | 2 | 0.33 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:29:VAL:H | 2 | 0.33 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:29:VAL:H | 5 | 0.33 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:29:VAL:H | 5 | 0.33 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:29:VAL:H | 5 | 0.33 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:29:VAL:H | 15 | 0.33 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:29:VAL:H | 15 | 0.33 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:29:VAL:H | 15 | 0.33 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:29:VAL:H | 16 | 0.33 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:29:VAL:H | 16 | 0.33 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:29:VAL:H | 16 | 0.33 |
| (2,785) | 1:A:27:THR:HB | 1:A:23:GLN:HB2 | 9 | 0.33 |
| (2,745) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HA | 5 | 0.33 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB1 | 1 | 0.33 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB2 | 1 | 0.33 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB3 | 1 | 0.33 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB1 | 2 | 0.33 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB2 | 2 | 0.33 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB3 | 2 | 0.33 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB1 | 4 | 0.33 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB2 | 4 | 0.33 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB3 | 4 | 0.33 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB1 | 5 | 0.33 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB2 | 5 | 0.33 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB3 | 5 | 0.33 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB1 | 6 | 0.33 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB2 | 6 | 0.33 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB3 | 6 | 0.33 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB1 | 7 | 0.33 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB2 | 7 | 0.33 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB3 | 7 | 0.33 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB1 | 10 | 0.33 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB2 | 10 | 0.33 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB3 | 10 | 0.33 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB1 | 13 | 0.33 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB2 | 13 | 0.33 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB3 | 13 | 0.33 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB1 | 14 | 0.33 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB2 | 14 | 0.33 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB3 | 14 | 0.33 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB1 | 16 | 0.33 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB2 | 16 | 0.33 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB3 | 16 | 0.33 |
| (2,7) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:71:ASN:HA | 5 | 0.33 |
| (2,7) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:71:ASN:HA | 5 | 0.33 |
| (2,7) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:71:ASN:HA | 5 | 0.33 |
| (2,698) | 1:A:83:ASP:HA | 1:A:82:PHE:H | 8 | 0.33 |
| (2,698) | 1:A:83:ASP:HA | 1:A:82:PHE:H | 14 | 0.33 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:29:VAL:H | 10 | 0.33 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:29:VAL:H | 10 | 0.33 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:29:VAL:H | 10 | 0.33 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,641) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:54:LEU:HA | 1 | 0.33 |
| (2,641) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:54:LEU:HA | 5 | 0.33 |
| (2,636) | 1:A:28:LEU:HG | 1:A:29:VAL:HA | 16 | 0.33 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB1 | 3 | 0.33 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB2 | 3 | 0.33 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB3 | 3 | 0.33 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB1 | 8 | 0.33 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB2 | 8 | 0.33 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB3 | 8 | 0.33 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB1 | 10 | 0.33 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB2 | 10 | 0.33 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB3 | 10 | 0.33 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:H | 14 | 0.33 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:H | 14 | 0.33 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 14 | 0.33 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:H | 15 | 0.33 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:H | 15 | 0.33 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 15 | 0.33 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD11 | 15 | 0.33 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD12 | 15 | 0.33 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD13 | 15 | 0.33 |
| (2,533) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:25:LEU:HB2 | 14 | 0.33 |
| (2,511) | 1:A:23:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HA | 13 | 0.33 |
| (2,508) | 1:A:23:GLN:HB3 | 1:A:20:GLN:HA | 10 | 0.33 |
| (2,489) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:22:GLN:HA | 10 | 0.33 |
| (2,487) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:95:HIS:HB2 | 16 | 0.33 |
| (2,471) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HB3 | 4 | 0.33 |
| (2,466) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:20:GLN:HB3 | 15 | 0.33 |
| (2,458) | 1:A:20:GLN:HB3 | 1:A:16:LEU:HB3 | 1 | 0.33 |
| (2,433) | 1:A:21:GLN:HG2 | 1:A:21:GLN:HA | 6 | 0.33 |
| (2,372) | 1:A:18:PRO:HA | 1:A:18:PRO:HD3 | 6 | 0.33 |
| (2,366) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:17:SER:HA | 3 | 0.33 |
| (2,366) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:17:SER:HA | 12 | 0.33 |
| (2,366) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:17:SER:HA | 15 | 0.33 |
| (2,347) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:LEU:HD21 | 7 | 0.33 |
| (2,347) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:LEU:HD22 | 7 | 0.33 |
| (2,347) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:LEU:HD23 | 7 | 0.33 |
| (2,337) | 1:A:11:ALA:HA | 1:A:14:ASN:HB2 | 4 | 0.33 |
| (2,335) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 11 | 0.33 |
| (2,321) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:86:THR:HA | 9 | 0.33 |
| (2,321) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:86:THR:HA | 11 | 0.33 |
| (2,309) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HD3 | 1 | 0.33 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,309) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HD3 | 8 | 0.33 |
| (2,309) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HD3 | 9 | 0.33 |
| (2,309) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HD3 | 14 | 0.33 |
| (2,306) | 1:A:85:PRO:HG2 | 1:A:85:PRO:HD2 | 1 | 0.33 |
| (2,306) | 1:A:85:PRO:HG2 | 1:A:85:PRO:HD2 | 9 | 0.33 |
| (2,204) | 1:A:9:LEU:HB3 | 1:A:10:ALA:H | 2 | 0.33 |
| (2,204) | 1:A:9:LEU:HB3 | 1:A:10:ALA:H | 4 | 0.33 |
| (2,198) | 1:A:9:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD21 | 16 | 0.33 |
| (2,198) | 1:A:9:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD22 | 16 | 0.33 |
| (2,198) | 1:A:9:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD23 | 16 | 0.33 |
| (2,19) | 1:A:102:HIS:HB3 | 1:A:102:HIS:HD2 | 13 | 0.33 |
| (2,1888) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:13:LEU:H | 8 | 0.33 |
| (2,1881) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HG | 4 | 0.33 |
| (2,1881) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HG | 6 | 0.33 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:H | 12 | 0.33 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:H | 12 | 0.33 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:H | 12 | 0.33 |
| (2,1858) | 1:A:25:LEU:HG | 1:A:21:GLN:HA | 9 | 0.33 |
| (2,1807) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HA | 5 | 0.33 |
| (2,1771) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:98:LEU:H | 6 | 0.33 |
| (2,1771) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:98:LEU:H | 8 | 0.33 |
| (2,1771) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:98:LEU:H | 10 | 0.33 |
| (2,1771) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:98:LEU:H | 11 | 0.33 |
| (2,1729) | 1:A:93:HIS:HA | 1:A:90:LEU:HA | 15 | 0.33 |
| (2,17) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:95:HIS:HB2 | 2 | 0.33 |
| (2,17) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:95:HIS:HB2 | 14 | 0.33 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HZ | 3 | 0.33 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HZ | 3 | 0.33 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HZ | 3 | 0.33 |
| (2,1663) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:84:HIS:HB3 | 14 | 0.33 |
| (2,1663) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:84:HIS:HB3 | 16 | 0.33 |
| (2,1601) | 1:A:86:THR:HB | 1:A:87:PRO:HD2 | 7 | 0.33 |
| (2,1601) | 1:A:86:THR:HB | 1:A:87:PRO:HD2 | 10 | 0.33 |
| (2,1567) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:83:ASP:H | 7 | 0.33 |
| (2,1567) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:83:ASP:H | 8 | 0.33 |
| (2,1567) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:83:ASP:H | 10 | 0.33 |
| (2,1567) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:83:ASP:H | 13 | 0.33 |
| (2,1547) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HA | 8 | 0.33 |
| (2,1547) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HA | 8 | 0.33 |
| (2,1547) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HA | 8 | 0.33 |
| (2,1543) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:51:PHE:HD1 | 3 | 0.33 |
| (2,1543) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:51:PHE:HD2 | 3 | 0.33 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1540) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:95:HIS:HA | 8 | 0.33 |
| (2,1483) | 1:A:60:THR:HA | 1:A:63:GLU:HB2 | 10 | 0.33 |
| (2,1481) | 1:A:78:PRO:HA | 1:A:80:LEU:H | 3 | 0.33 |
| (2,1481) | 1:A:78:PRO:HA | 1:A:80:LEU:H | 4 | 0.33 |
| (2,1429) | 1:A:102:HIS:HD2 | 1:A:101:SER:HB2 | 16 | 0.33 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:54:LEU:H | 3 | 0.33 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:54:LEU:H | 3 | 0.33 |
| (2,1408) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:54:LEU:H | 3 | 0.33 |
| (2,1402) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:44:SER:HB3 | 1 | 0.33 |
| (2,1402) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:44:SER:HB3 | 1 | 0.33 |
| (2,1402) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:44:SER:HB3 | 1 | 0.33 |
| (2,1402) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:44:SER:HB3 | 12 | 0.33 |
| (2,1402) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:44:SER:HB3 | 12 | 0.33 |
| (2,1402) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:44:SER:HB3 | 12 | 0.33 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD11 | 8 | 0.33 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD12 | 8 | 0.33 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD13 | 8 | 0.33 |
| (2,1363) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:93:HIS:H | 6 | 0.33 |
| (2,1363) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:93:HIS:H | 9 | 0.33 |
| (2,1363) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:93:HIS:H | 12 | 0.33 |
| (2,1363) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:93:HIS:H | 14 | 0.33 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 15 | 0.33 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 15 | 0.33 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 15 | 0.33 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 10 | 0.33 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 10 | 0.33 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 10 | 0.33 |
| (2,1228) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:63:GLU:H | 11 | 0.33 |
| (2,1204) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:59:LEU:HA | 1 | 0.33 |
| (2,1204) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:59:LEU:HA | 9 | 0.33 |
| (2,1194) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 2 | 0.33 |
| (2,1194) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 5 | 0.33 |
| (2,1194) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 9 | 0.33 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB1 | 7 | 0.33 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB2 | 7 | 0.33 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB3 | 7 | 0.33 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB1 | 7 | 0.33 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB2 | 7 | 0.33 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB3 | 7 | 0.33 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB1 | 7 | 0.33 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB2 | 7 | 0.33 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB3 | 7 | 0.33 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB1 | 12 | 0.33 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB2 | 12 | 0.33 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB3 | 12 | 0.33 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB1 | 12 | 0.33 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB2 | 12 | 0.33 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB3 | 12 | 0.33 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB1 | 12 | 0.33 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB2 | 12 | 0.33 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB3 | 12 | 0.33 |
| (2,114) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:7:THR:H | 16 | 0.33 |
| (2,114) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:7:THR:H | 16 | 0.33 |
| (2,114) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:7:THR:H | 16 | 0.33 |
| (2,1053) | 1:A:52:LYS:HG2 | 1:A:52:LYS:HA | 3 | 0.33 |
| (2,1053) | 1:A:52:LYS:HG2 | 1:A:52:LYS:HA | 6 | 0.33 |
| (2,1053) | 1:A:52:LYS:HG2 | 1:A:52:LYS:HA | 12 | 0.33 |
| (2,1047) | 1:A:52:LYS:HB2 | 1:A:53:ASP:H | 9 | 0.33 |
| (1,82) | 1:A:86:THR:H | 1:A:84:HIS:HB2 | 4 | 0.33 |
| (1,82) | 1:A:86:THR:H | 1:A:84:HIS:HB2 | 12 | 0.33 |
| (1,82) | 1:A:86:THR:H | 1:A:84:HIS:HB2 | 13 | 0.33 |
| (1,80) | 1:A:86:THR:H | 1:A:85:PRO:HD2 | 5 | 0.33 |
| (1,73) | 1:A:65:ARG:H | 1:A:64:LEU:H | 6 | 0.33 |
| (1,73) | 1:A:65:ARG:H | 1:A:64:LEU:H | 15 | 0.33 |
| (1,602) | 1:A:57:ASP:H | 1:A:57:ASP:HB3 | 15 | 0.33 |
| (1,599) | 1:A:33:THR:H | 1:A:33:THR:HG1 | 6 | 0.33 |
| (1,599) | 1:A:33:THR:H | 1:A:33:THR:HG1 | 14 | 0.33 |
| (1,599) | 1:A:33:THR:H | 1:A:33:THR:HG1 | 15 | 0.33 |
| (1,569) | 1:A:98:LEU:H | 1:A:98:LEU:HD21 | 8 | 0.33 |
| (1,569) | 1:A:98:LEU:H | 1:A:98:LEU:HD22 | 8 | 0.33 |
| (1,569) | 1:A:98:LEU:H | 1:A:98:LEU:HD23 | 8 | 0.33 |
| (1,528) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HB3 | 3 | 0.33 |
| (1,528) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HB3 | 6 | 0.33 |
| (1,527) | 1:A:93:HIS:H | 1:A:92:GLN:HB3 | 5 | 0.33 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB1 | 14 | 0.33 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB2 | 14 | 0.33 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB3 | 14 | 0.33 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB1 | 15 | 0.33 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB2 | 15 | 0.33 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB3 | 15 | 0.33 |
| (1,44) | 1:A:79:THR:H | 1:A:78:PRO:HA | 4 | 0.33 |
| (1,40) | 1:A:16:LEU:H | 1:A:15:GLY:H | 7 | 0.33 |
| (1,368) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:93:HIS:HB3 | 4 | 0.33 |
| (1,368) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:93:HIS:HB3 | 6 | 0.33 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,368) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:93:HIS:HB3 | 8 | 0.33 |
| (1,331) | 1:A:64:LEU:H | 1:A:64:LEU:HB2 | 7 | 0.33 |
| (1,331) | 1:A:64:LEU:H | 1:A:64:LEU:HB2 | 10 | 0.33 |
| (1,331) | 1:A:64:LEU:H | 1:A:64:LEU:HB2 | 12 | 0.33 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD11 | 5 | 0.33 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD12 | 5 | 0.33 |
| (1,315) | 1:A:9:LEU:H | 1:A:9:LEU:HD13 | 5 | 0.33 |
| (1,309) | 1:A:56:ILE:H | 1:A:51:PHE:HB2 | 11 | 0.33 |
| (1,275) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:82:PHE:H | 9 | 0.33 |
| (1,248) | 1:A:99:THR:H | 1:A:98:LEU:HB3 | 9 | 0.33 |
| (1,233) | 1:A:102:HIS:H | 1:A:102:HIS:HB2 | 14 | 0.33 |
| (1,23) | 1:A:44:SER:H | 1:A:45:ILE:H | 1 | 0.33 |
| (1,23) | 1:A:44:SER:H | 1:A:45:ILE:H | 12 | 0.33 |
| (1,23) | 1:A:44:SER:H | 1:A:45:ILE:H | 16 | 0.33 |
| (1,21) | 1:A:7:THR:H | 1:A:6:ALA:H | 6 | 0.33 |
| (1,21) | 1:A:7:THR:H | 1:A:6:ALA:H | 10 | 0.33 |
| (1,21) | 1:A:7:THR:H | 1:A:6:ALA:H | 12 | 0.33 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB1 | 6 | 0.33 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB2 | 6 | 0.33 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB3 | 6 | 0.33 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB1 | 12 | 0.33 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB2 | 12 | 0.33 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB3 | 12 | 0.33 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB1 | 15 | 0.33 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB2 | 15 | 0.33 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB3 | 15 | 0.33 |
| (1,110) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:52:LYS:HG3 | 2 | 0.33 |
| (1,110) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:52:LYS:HG3 | 16 | 0.33 |
| (2,980) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:54:LEU:HG | 1 | 0.32 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB1 | 1:A:47:PRO:HA | 2 | 0.32 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB2 | 1:A:47:PRO:HA | 2 | 0.32 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB3 | 1:A:47:PRO:HA | 2 | 0.32 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB1 | 1:A:47:PRO:HA | 4 | 0.32 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB2 | 1:A:47:PRO:HA | 4 | 0.32 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB3 | 1:A:47:PRO:HA | 4 | 0.32 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB1 | 1:A:47:PRO:HA | 6 | 0.32 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB2 | 1:A:47:PRO:HA | 6 | 0.32 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB3 | 1:A:47:PRO:HA | 6 | 0.32 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB1 | 1:A:47:PRO:HA | 11 | 0.32 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB2 | 1:A:47:PRO:HA | 11 | 0.32 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB3 | 1:A:47:PRO:HA | 11 | 0.32 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB1 | 1:A:47:PRO:HA | 14 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB2 | 1:A:47:PRO:HA | 14 | 0.32 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB3 | 1:A:47:PRO:HA | 14 | 0.32 |
| (2,943) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:47:PRO:HG2 | 9 | 0.32 |
| (2,943) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:47:PRO:HG2 | 15 | 0.32 |
| (2,932) | 1:A:45:ILE:HG13 | 1:A:42:PRO:HA | 6 | 0.32 |
| (2,904) | 1:A:42:PRO:HG3 | 1:A:42:PRO:HD3 | 5 | 0.32 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG21 | 7 | 0.32 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG22 | 7 | 0.32 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG23 | 7 | 0.32 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG21 | 5 | 0.32 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG22 | 5 | 0.32 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG23 | 5 | 0.32 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG21 | 12 | 0.32 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG22 | 12 | 0.32 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG23 | 12 | 0.32 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:29:VAL:H | 1 | 0.32 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:29:VAL:H | 1 | 0.32 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:29:VAL:H | 1 | 0.32 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:29:VAL:H | 3 | 0.32 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:29:VAL:H | 3 | 0.32 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:29:VAL:H | 3 | 0.32 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:29:VAL:H | 4 | 0.32 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:29:VAL:H | 4 | 0.32 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:29:VAL:H | 4 | 0.32 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:29:VAL:H | 6 | 0.32 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:29:VAL:H | 6 | 0.32 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:29:VAL:H | 6 | 0.32 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:29:VAL:H | 7 | 0.32 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:29:VAL:H | 7 | 0.32 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:29:VAL:H | 7 | 0.32 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:29:VAL:H | 8 | 0.32 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:29:VAL:H | 8 | 0.32 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:29:VAL:H | 8 | 0.32 |
| (2,785) | 1:A:27:THR:HB | 1:A:23:GLN:HB2 | 13 | 0.32 |
| (2,745) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HA | 6 | 0.32 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB1 | 3 | 0.32 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB2 | 3 | 0.32 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB3 | 3 | 0.32 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB1 | 8 | 0.32 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB2 | 8 | 0.32 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB3 | 8 | 0.32 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB1 | 11 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB2 | 11 | 0.32 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB3 | 11 | 0.32 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB1 | 12 | 0.32 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB2 | 12 | 0.32 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB3 | 12 | 0.32 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB1 | 15 | 0.32 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB2 | 15 | 0.32 |
| (2,717) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:30:ALA:HB3 | 15 | 0.32 |
| (2,698) | 1:A:83:ASP:HA | 1:A:82:PHE:H | 5 | 0.32 |
| (2,698) | 1:A:83:ASP:HA | 1:A:82:PHE:H | 10 | 0.32 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:29:VAL:H | 1 | 0.32 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:29:VAL:H | 1 | 0.32 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:29:VAL:H | 1 | 0.32 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:29:VAL:H | 2 | 0.32 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:29:VAL:H | 2 | 0.32 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:29:VAL:H | 2 | 0.32 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:29:VAL:H | 3 | 0.32 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:29:VAL:H | 3 | 0.32 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:29:VAL:H | 3 | 0.32 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:29:VAL:H | 5 | 0.32 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:29:VAL:H | 5 | 0.32 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:29:VAL:H | 5 | 0.32 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:29:VAL:H | 6 | 0.32 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:29:VAL:H | 6 | 0.32 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:29:VAL:H | 6 | 0.32 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:29:VAL:H | 7 | 0.32 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:29:VAL:H | 7 | 0.32 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:29:VAL:H | 7 | 0.32 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:29:VAL:H | 8 | 0.32 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:29:VAL:H | 8 | 0.32 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:29:VAL:H | 8 | 0.32 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:29:VAL:H | 9 | 0.32 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:29:VAL:H | 9 | 0.32 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:29:VAL:H | 9 | 0.32 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:29:VAL:H | 11 | 0.32 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:29:VAL:H | 11 | 0.32 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:29:VAL:H | 11 | 0.32 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:29:VAL:H | 12 | 0.32 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:29:VAL:H | 12 | 0.32 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:29:VAL:H | 12 | 0.32 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:29:VAL:H | 13 | 0.32 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:29:VAL:H | 13 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:29:VAL:H | 13 | 0.32 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:29:VAL:H | 14 | 0.32 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:29:VAL:H | 14 | 0.32 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:29:VAL:H | 14 | 0.32 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:29:VAL:H | 15 | 0.32 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:29:VAL:H | 15 | 0.32 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:29:VAL:H | 15 | 0.32 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:29:VAL:H | 16 | 0.32 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:29:VAL:H | 16 | 0.32 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:29:VAL:H | 16 | 0.32 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:33:THR:HG1 | 5 | 0.32 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:33:THR:HG1 | 5 | 0.32 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:33:THR:HG1 | 5 | 0.32 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:33:THR:HG1 | 8 | 0.32 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:33:THR:HG1 | 8 | 0.32 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:33:THR:HG1 | 8 | 0.32 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:33:THR:HG1 | 9 | 0.32 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:33:THR:HG1 | 9 | 0.32 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:33:THR:HG1 | 9 | 0.32 |
| (2,641) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:54:LEU:HA | 4 | 0.32 |
| (2,641) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:54:LEU:HA | 11 | 0.32 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD11 | 1 | 0.32 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD12 | 1 | 0.32 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD13 | 1 | 0.32 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD11 | 1 | 0.32 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD12 | 1 | 0.32 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD13 | 1 | 0.32 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD11 | 1 | 0.32 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD12 | 1 | 0.32 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD13 | 1 | 0.32 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD11 | 6 | 0.32 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD12 | 6 | 0.32 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD13 | 6 | 0.32 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD11 | 6 | 0.32 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD12 | 6 | 0.32 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD13 | 6 | 0.32 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD11 | 6 | 0.32 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD12 | 6 | 0.32 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD13 | 6 | 0.32 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD11 | 12 | 0.32 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD12 | 12 | 0.32 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD13 | 12 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD11 | 12 | 0.32 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD12 | 12 | 0.32 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD13 | 12 | 0.32 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD11 | 12 | 0.32 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD12 | 12 | 0.32 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD13 | 12 | 0.32 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:H | 5 | 0.32 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:H | 5 | 0.32 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 5 | 0.32 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:H | 12 | 0.32 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:H | 12 | 0.32 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 12 | 0.32 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:H | 13 | 0.32 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:H | 13 | 0.32 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 13 | 0.32 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:H | 16 | 0.32 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:H | 16 | 0.32 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 16 | 0.32 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:71:ASN:HB3 | 8 | 0.32 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:71:ASN:HB3 | 8 | 0.32 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:71:ASN:HB3 | 8 | 0.32 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD11 | 1 | 0.32 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD12 | 1 | 0.32 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD13 | 1 | 0.32 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD11 | 2 | 0.32 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD12 | 2 | 0.32 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD13 | 2 | 0.32 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD11 | 6 | 0.32 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD12 | 6 | 0.32 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD13 | 6 | 0.32 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD11 | 14 | 0.32 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD12 | 14 | 0.32 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD13 | 14 | 0.32 |
| (2,533) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:25:LEU:HB2 | 12 | 0.32 |
| (2,478) | 1:A:59:LEU:HG | 1:A:60:THR:H | 12 | 0.32 |
| (2,478) | 1:A:59:LEU:HG | 1:A:60:THR:H | 13 | 0.32 |
| (2,478) | 1:A:59:LEU:HG | 1:A:60:THR:H | 16 | 0.32 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:51:PHE:HD1 | 1 | 0.32 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:51:PHE:HD2 | 1 | 0.32 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:51:PHE:HD1 | 1 | 0.32 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:51:PHE:HD2 | 1 | 0.32 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:51:PHE:HD1 | 1 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:51:PHE:HD2 | 1 | 0.32 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:51:PHE:HD1 | 10 | 0.32 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:51:PHE:HD2 | 10 | 0.32 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:51:PHE:HD1 | 10 | 0.32 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:51:PHE:HD2 | 10 | 0.32 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:51:PHE:HD1 | 10 | 0.32 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:51:PHE:HD2 | 10 | 0.32 |
| (2,458) | 1:A:20:GLN:HB3 | 1:A:16:LEU:HB3 | 5 | 0.32 |
| (2,403) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:20:GLN:H | 3 | 0.32 |
| (2,366) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:17:SER:HA | 1 | 0.32 |
| (2,366) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:17:SER:HA | 6 | 0.32 |
| (2,366) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:17:SER:HA | 9 | 0.32 |
| (2,366) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:17:SER:HA | 11 | 0.32 |
| (2,353) | 1:A:16:LEU:HG | 1:A:16:LEU:HA | 3 | 0.32 |
| (2,347) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:LEU:HD21 | 16 | 0.32 |
| (2,347) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:LEU:HD22 | 16 | 0.32 |
| (2,347) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:LEU:HD23 | 16 | 0.32 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD21 | 4 | 0.32 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD22 | 4 | 0.32 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD23 | 4 | 0.32 |
| (2,309) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HD3 | 2 | 0.32 |
| (2,309) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HD3 | 3 | 0.32 |
| (2,309) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HD3 | 4 | 0.32 |
| (2,309) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HD3 | 5 | 0.32 |
| (2,309) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HD3 | 6 | 0.32 |
| (2,309) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HD3 | 7 | 0.32 |
| (2,309) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HD3 | 10 | 0.32 |
| (2,309) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HD3 | 11 | 0.32 |
| (2,309) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HD3 | 12 | 0.32 |
| (2,309) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HD3 | 13 | 0.32 |
| (2,309) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HD3 | 15 | 0.32 |
| (2,309) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HD3 | 16 | 0.32 |
| (2,306) | 1:A:85:PRO:HG2 | 1:A:85:PRO:HD2 | 2 | 0.32 |
| (2,306) | 1:A:85:PRO:HG2 | 1:A:85:PRO:HD2 | 3 | 0.32 |
| (2,306) | 1:A:85:PRO:HG2 | 1:A:85:PRO:HD2 | 4 | 0.32 |
| (2,306) | 1:A:85:PRO:HG2 | 1:A:85:PRO:HD2 | 5 | 0.32 |
| (2,306) | 1:A:85:PRO:HG2 | 1:A:85:PRO:HD2 | 6 | 0.32 |
| (2,306) | 1:A:85:PRO:HG2 | 1:A:85:PRO:HD2 | 7 | 0.32 |
| (2,306) | 1:A:85:PRO:HG2 | 1:A:85:PRO:HD2 | 8 | 0.32 |
| (2,306) | 1:A:85:PRO:HG2 | 1:A:85:PRO:HD2 | 10 | 0.32 |
| (2,306) | 1:A:85:PRO:HG2 | 1:A:85:PRO:HD2 | 11 | 0.32 |
| (2,306) | 1:A:85:PRO:HG2 | 1:A:85:PRO:HD2 | 12 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,306) | 1:A:85:PRO:HG2 | 1:A:85:PRO:HD2 | 13 | 0.32 |
| (2,306) | 1:A:85:PRO:HG2 | 1:A:85:PRO:HD2 | 14 | 0.32 |
| (2,306) | 1:A:85:PRO:HG2 | 1:A:85:PRO:HD2 | 15 | 0.32 |
| (2,306) | 1:A:85:PRO:HG2 | 1:A:85:PRO:HD2 | 16 | 0.32 |
| (2,299) | 1:A:13:LEU:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 6 | 0.32 |
| (2,299) | 1:A:13:LEU:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 15 | 0.32 |
| (2,276) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:9:LEU:HD11 | 14 | 0.32 |
| (2,276) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:9:LEU:HD12 | 14 | 0.32 |
| (2,276) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:9:LEU:HD13 | 14 | 0.32 |
| (2,204) | 1:A:9:LEU:HB3 | 1:A:10:ALA:H | 5 | 0.32 |
| (2,204) | 1:A:9:LEU:HB3 | 1:A:10:ALA:H | 15 | 0.32 |
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HB3 | 13 | 0.32 |
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HB3 | 13 | 0.32 |
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HB3 | 13 | 0.32 |
| (2,1888) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:13:LEU:H | 3 | 0.32 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:H | 6 | 0.32 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:H | 6 | 0.32 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:H | 6 | 0.32 |
| (2,1729) | 1:A:93:HIS:HA | 1:A:90:LEU:HA | 3 | 0.32 |
| (2,1729) | 1:A:93:HIS:HA | 1:A:90:LEU:HA | 14 | 0.32 |
| (2,1720) | 1:A:92:GLN:HG3 | 1:A:89:ALA:HA | 12 | 0.32 |
| (2,1720) | 1:A:92:GLN:HG3 | 1:A:89:ALA:HA | 13 | 0.32 |
| (2,1697) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:94:LEU:HB3 | 9 | 0.32 |
| (2,1697) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:94:LEU:HB3 | 12 | 0.32 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD11 | 10 | 0.32 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD12 | 10 | 0.32 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD13 | 10 | 0.32 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD11 | 10 | 0.32 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD12 | 10 | 0.32 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD13 | 10 | 0.32 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD11 | 10 | 0.32 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD12 | 10 | 0.32 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD13 | 10 | 0.32 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HE1 | 5 | 0.32 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HE2 | 5 | 0.32 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HE1 | 5 | 0.32 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HE2 | 5 | 0.32 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HE1 | 5 | 0.32 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HE2 | 5 | 0.32 |
| (2,1663) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:84:HIS:HB3 | 3 | 0.32 |
| (2,1663) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:84:HIS:HB3 | 13 | 0.32 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:90:LEU:H | 9 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:90:LEU:H | 9 | 0.32 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:90:LEU:H | 9 | 0.32 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:85:PRO:HD2 | 5 | 0.32 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:85:PRO:HD2 | 5 | 0.32 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:85:PRO:HD2 | 5 | 0.32 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:85:PRO:HD2 | 15 | 0.32 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:85:PRO:HD2 | 15 | 0.32 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:85:PRO:HD2 | 15 | 0.32 |
| (2,1601) | 1:A:86:THR:HB | 1:A:87:PRO:HD2 | 5 | 0.32 |
| (2,1567) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:83:ASP:H | 5 | 0.32 |
| (2,1538) | 1:A:98:LEU:HB3 | 1:A:99:THR:H | 7 | 0.32 |
| (2,1519) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:21:GLN:HG3 | 14 | 0.32 |
| (2,1483) | 1:A:60:THR:HA | 1:A:63:GLU:HB2 | 9 | 0.32 |
| (2,1483) | 1:A:60:THR:HA | 1:A:63:GLU:HB2 | 12 | 0.32 |
| (2,1483) | 1:A:60:THR:HA | 1:A:63:GLU:HB2 | 15 | 0.32 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HB | 8 | 0.32 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HB | 8 | 0.32 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HB | 8 | 0.32 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HB | 13 | 0.32 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HB | 13 | 0.32 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HB | 13 | 0.32 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD11 | 4 | 0.32 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD12 | 4 | 0.32 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD13 | 4 | 0.32 |
| (2,1377) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:74:LEU:HD21 | 8 | 0.32 |
| (2,1377) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:74:LEU:HD22 | 8 | 0.32 |
| (2,1377) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:74:LEU:HD23 | 8 | 0.32 |
| (2,1363) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:93:HIS:H | 4 | 0.32 |
| (2,1363) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:93:HIS:H | 11 | 0.32 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD11 | 1 | 0.32 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD12 | 1 | 0.32 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD13 | 1 | 0.32 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 8 | 0.32 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 8 | 0.32 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 8 | 0.32 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 4 | 0.32 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 4 | 0.32 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 4 | 0.32 |
| (2,1228) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:63:GLU:H | 9 | 0.32 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG11 | 10 | 0.32 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG12 | 10 | 0.32 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG13 | 10 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1204) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:59:LEU:HA | 13 | 0.32 |
| (2,1203) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:63:GLU:H | 16 | 0.32 |
| (2,1194) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 1 | 0.32 |
| (2,1194) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 7 | 0.32 |
| (2,1194) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 10 | 0.32 |
| (2,1194) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 12 | 0.32 |
| (2,1194) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 13 | 0.32 |
| (2,1194) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 16 | 0.32 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB1 | 1:A:64:LEU:HB3 | 13 | 0.32 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB2 | 1:A:64:LEU:HB3 | 13 | 0.32 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB3 | 1:A:64:LEU:HB3 | 13 | 0.32 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB1 | 4 | 0.32 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB2 | 4 | 0.32 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB3 | 4 | 0.32 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB1 | 4 | 0.32 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB2 | 4 | 0.32 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB3 | 4 | 0.32 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB1 | 4 | 0.32 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB2 | 4 | 0.32 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB3 | 4 | 0.32 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB1 | 5 | 0.32 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB2 | 5 | 0.32 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB3 | 5 | 0.32 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB1 | 5 | 0.32 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB2 | 5 | 0.32 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB3 | 5 | 0.32 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB1 | 5 | 0.32 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB2 | 5 | 0.32 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB3 | 5 | 0.32 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ALA:H | 2 | 0.32 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ALA:H | 2 | 0.32 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ALA:H | 2 | 0.32 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ALA:H | 5 | 0.32 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ALA:H | 5 | 0.32 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ALA:H | 5 | 0.32 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD11 | 2 | 0.32 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD12 | 2 | 0.32 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD13 | 2 | 0.32 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD11 | 2 | 0.32 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD12 | 2 | 0.32 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD13 | 2 | 0.32 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD11 | 2 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD12 | 2 | 0.32 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD13 | 2 | 0.32 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD11 | 8 | 0.32 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD12 | 8 | 0.32 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD13 | 8 | 0.32 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD11 | 8 | 0.32 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD12 | 8 | 0.32 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD13 | 8 | 0.32 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD11 | 8 | 0.32 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD12 | 8 | 0.32 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD13 | 8 | 0.32 |
| (2,1053) | 1:A:52:LYS:HG2 | 1:A:52:LYS:HA | 1 | 0.32 |
| (2,1053) | 1:A:52:LYS:HG2 | 1:A:52:LYS:HA | 4 | 0.32 |
| (2,1029) | 1:A:51:PHE:HB3 | 1:A:52:LYS:HG2 | 16 | 0.32 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG21 | 7 | 0.32 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG22 | 7 | 0.32 |
| (1,85) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:67:THR:HG23 | 7 | 0.32 |
| (1,82) | 1:A:86:THR:H | 1:A:84:HIS:HB2 | 1 | 0.32 |
| (1,82) | 1:A:86:THR:H | 1:A:84:HIS:HB2 | 10 | 0.32 |
| (1,82) | 1:A:86:THR:H | 1:A:84:HIS:HB2 | 16 | 0.32 |
| (1,80) | 1:A:86:THR:H | 1:A:85:PRO:HD2 | 1 | 0.32 |
| (1,80) | 1:A:86:THR:H | 1:A:85:PRO:HD2 | 4 | 0.32 |
| (1,73) | 1:A:65:ARG:H | 1:A:64:LEU:H | 12 | 0.32 |
| (1,602) | 1:A:57:ASP:H | 1:A:57:ASP:HB3 | 9 | 0.32 |
| (1,599) | 1:A:33:THR:H | 1:A:33:THR:HG1 | 4 | 0.32 |
| (1,590) | 1:A:96:THR:H | 1:A:97:ARG:H | 7 | 0.32 |
| (1,566) | 1:A:98:LEU:H | 1:A:98:LEU:HB3 | 2 | 0.32 |
| (1,528) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HB3 | 2 | 0.32 |
| (1,528) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HB3 | 8 | 0.32 |
| (1,528) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HB3 | 12 | 0.32 |
| (1,528) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HB3 | 14 | 0.32 |
| (1,528) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HB3 | 16 | 0.32 |
| (1,527) | 1:A:93:HIS:H | 1:A:92:GLN:HB3 | 11 | 0.32 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB1 | 5 | 0.32 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB2 | 5 | 0.32 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB3 | 5 | 0.32 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB1 | 12 | 0.32 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB2 | 12 | 0.32 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB3 | 12 | 0.32 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB1 | 13 | 0.32 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB2 | 13 | 0.32 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB3 | 13 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB1 | 16 | 0.32 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB2 | 16 | 0.32 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB3 | 16 | 0.32 |
| (1,500) | 1:A:100:GLN:H | 1:A:100:GLN:HB3 | 5 | 0.32 |
| (1,40) | 1:A:16:LEU:H | 1:A:15:GLY:H | 15 | 0.32 |
| (1,398) | 1:A:44:SER:H | 1:A:43:GLU:HG2 | 5 | 0.32 |
| (1,368) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:93:HIS:HB3 | 7 | 0.32 |
| (1,368) | 1:A:94:LEU:H | 1:A:93:HIS:HB3 | 11 | 0.32 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB1 | 9 | 0.32 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB2 | 9 | 0.32 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB3 | 9 | 0.32 |
| (1,331) | 1:A:64:LEU:H | 1:A:64:LEU:HB2 | 1 | 0.32 |
| (1,331) | 1:A:64:LEU:H | 1:A:64:LEU:HB2 | 6 | 0.32 |
| (1,331) | 1:A:64:LEU:H | 1:A:64:LEU:HB2 | 16 | 0.32 |
| (1,312) | 1:A:46:SER:H | 1:A:45:ILE:HG12 | 13 | 0.32 |
| (1,309) | 1:A:56:ILE:H | 1:A:51:PHE:HB2 | 3 | 0.32 |
| (1,309) | 1:A:56:ILE:H | 1:A:51:PHE:HB2 | 15 | 0.32 |
| (1,25) | 1:A:83:ASP:H | 1:A:84:HIS:H | 5 | 0.32 |
| (1,25) | 1:A:83:ASP:H | 1:A:84:HIS:H | 8 | 0.32 |
| (1,25) | 1:A:83:ASP:H | 1:A:84:HIS:H | 15 | 0.32 |
| (1,23) | 1:A:44:SER:H | 1:A:45:ILE:H | 5 | 0.32 |
| (1,23) | 1:A:44:SER:H | 1:A:45:ILE:H | 6 | 0.32 |
| (1,22) | 1:A:43:GLU:H | 1:A:44:SER:H | 15 | 0.32 |
| (1,213) | 1:A:38:GLY:H | 1:A:38:GLY:HA2 | 14 | 0.32 |
| (1,189) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:53:ASP:HB3 | 14 | 0.32 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB1 | 1 | 0.32 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB2 | 1 | 0.32 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB3 | 1 | 0.32 |
| (1,127) | 1:A:69:THR:H | 1:A:68:LEU:HB2 | 10 | 0.32 |
| (2,976) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:50:ALA:H | 5 | 0.31 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB1 | 1:A:47:PRO:HA | 3 | 0.31 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB2 | 1:A:47:PRO:HA | 3 | 0.31 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB3 | 1:A:47:PRO:HA | 3 | 0.31 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB1 | 1:A:47:PRO:HA | 10 | 0.31 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB2 | 1:A:47:PRO:HA | 10 | 0.31 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB3 | 1:A:47:PRO:HA | 10 | 0.31 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB1 | 1:A:47:PRO:HA | 16 | 0.31 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB2 | 1:A:47:PRO:HA | 16 | 0.31 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB3 | 1:A:47:PRO:HA | 16 | 0.31 |
| (2,943) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:47:PRO:HG2 | 3 | 0.31 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:40:HIS:HD2 | 13 | 0.31 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:40:HIS:HD2 | 13 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:40:HIS:HD2 | 13 | 0.31 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:33:THR:HG21 | 8 | 0.31 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:33:THR:HG22 | 8 | 0.31 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:33:THR:HG23 | 8 | 0.31 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:33:THR:HG21 | 8 | 0.31 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:33:THR:HG22 | 8 | 0.31 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:33:THR:HG23 | 8 | 0.31 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:33:THR:HG21 | 8 | 0.31 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:33:THR:HG22 | 8 | 0.31 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:33:THR:HG23 | 8 | 0.31 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG21 | 9 | 0.31 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG22 | 9 | 0.31 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG23 | 9 | 0.31 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:29:VAL:H | 9 | 0.31 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:29:VAL:H | 9 | 0.31 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:29:VAL:H | 9 | 0.31 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:29:VAL:H | 10 | 0.31 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:29:VAL:H | 10 | 0.31 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:29:VAL:H | 10 | 0.31 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:29:VAL:H | 11 | 0.31 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:29:VAL:H | 11 | 0.31 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:29:VAL:H | 11 | 0.31 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:29:VAL:H | 13 | 0.31 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:29:VAL:H | 13 | 0.31 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:29:VAL:H | 13 | 0.31 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:29:VAL:H | 14 | 0.31 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:29:VAL:H | 14 | 0.31 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:29:VAL:H | 14 | 0.31 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB1 | 4 | 0.31 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB2 | 4 | 0.31 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB3 | 4 | 0.31 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB1 | 7 | 0.31 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB2 | 7 | 0.31 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB3 | 7 | 0.31 |
| (2,745) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HA | 2 | 0.31 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:34:ALA:HA | 9 | 0.31 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:34:ALA:HA | 9 | 0.31 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:34:ALA:HA | 9 | 0.31 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HA | 9 | 0.31 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HA | 9 | 0.31 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HA | 9 | 0.31 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HA | 11 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HA | 11 | 0.31 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HA | 11 | 0.31 |
| (2,698) | 1:A:83:ASP:HA | 1:A:82:PHE:H | 4 | 0.31 |
| (2,698) | 1:A:83:ASP:HA | 1:A:82:PHE:H | 11 | 0.31 |
| (2,698) | 1:A:83:ASP:HA | 1:A:82:PHE:H | 12 | 0.31 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:29:VAL:H | 4 | 0.31 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:29:VAL:H | 4 | 0.31 |
| (2,690) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:29:VAL:H | 4 | 0.31 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:33:THR:HG1 | 7 | 0.31 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:33:THR:HG1 | 7 | 0.31 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:33:THR:HG1 | 7 | 0.31 |
| (2,641) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:54:LEU:HA | 9 | 0.31 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB1 | 4 | 0.31 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB2 | 4 | 0.31 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB3 | 4 | 0.31 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD11 | 4 | 0.31 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD12 | 4 | 0.31 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD13 | 4 | 0.31 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD11 | 4 | 0.31 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD12 | 4 | 0.31 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD13 | 4 | 0.31 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD11 | 4 | 0.31 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD12 | 4 | 0.31 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD13 | 4 | 0.31 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD11 | 10 | 0.31 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD12 | 10 | 0.31 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD13 | 10 | 0.31 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD11 | 10 | 0.31 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD12 | 10 | 0.31 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD13 | 10 | 0.31 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD11 | 10 | 0.31 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD12 | 10 | 0.31 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD13 | 10 | 0.31 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD11 | 14 | 0.31 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD12 | 14 | 0.31 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD13 | 14 | 0.31 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD11 | 14 | 0.31 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD12 | 14 | 0.31 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD13 | 14 | 0.31 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD11 | 14 | 0.31 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD12 | 14 | 0.31 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD13 | 14 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD11 | 16 | 0.31 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD12 | 16 | 0.31 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD13 | 16 | 0.31 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD11 | 16 | 0.31 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD12 | 16 | 0.31 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD13 | 16 | 0.31 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD11 | 16 | 0.31 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD12 | 16 | 0.31 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD13 | 16 | 0.31 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:H | 3 | 0.31 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:H | 3 | 0.31 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 3 | 0.31 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:H | 6 | 0.31 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:H | 6 | 0.31 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 6 | 0.31 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:H | 8 | 0.31 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:H | 8 | 0.31 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 8 | 0.31 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:H | 10 | 0.31 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:H | 10 | 0.31 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 10 | 0.31 |
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG21 | 10 | 0.31 |
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG22 | 10 | 0.31 |
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG23 | 10 | 0.31 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:71:ASN:HB3 | 1 | 0.31 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:71:ASN:HB3 | 1 | 0.31 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:71:ASN:HB3 | 1 | 0.31 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:29:VAL:HA | 16 | 0.31 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:29:VAL:HA | 16 | 0.31 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:29:VAL:HA | 16 | 0.31 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:64:LEU:HD11 | 11 | 0.31 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:64:LEU:HD12 | 11 | 0.31 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:64:LEU:HD13 | 11 | 0.31 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:64:LEU:HD11 | 11 | 0.31 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:64:LEU:HD12 | 11 | 0.31 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:64:LEU:HD13 | 11 | 0.31 |
| (2,478) | 1:A:59:LEU:HG | 1:A:60:THR:H | 5 | 0.31 |
| (2,478) | 1:A:59:LEU:HG | 1:A:60:THR:H | 15 | 0.31 |
| (2,477) | 1:A:25:LEU:HG | 1:A:25:LEU:H | 1 | 0.31 |
| (2,433) | 1:A:21:GLN:HG2 | 1:A:21:GLN:HA | 16 | 0.31 |
| (2,402) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:23:GLN:H | 4 | 0.31 |
| (2,402) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:23:GLN:H | 12 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,366) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:17:SER:HA | 4 | 0.31 |
| (2,366) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:17:SER:HA | 5 | 0.31 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD21 | 9 | 0.31 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD22 | 9 | 0.31 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD23 | 9 | 0.31 |
| (2,299) | 1:A:13:LEU:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 16 | 0.31 |
| (2,262) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:12:ARG:H | 4 | 0.31 |
| (2,262) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:12:ARG:H | 7 | 0.31 |
| (2,262) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:12:ARG:H | 14 | 0.31 |
| (2,204) | 1:A:9:LEU:HB3 | 1:A:10:ALA:H | 1 | 0.31 |
| (2,204) | 1:A:9:LEU:HB3 | 1:A:10:ALA:H | 7 | 0.31 |
| (2,204) | 1:A:9:LEU:HB3 | 1:A:10:ALA:H | 14 | 0.31 |
| (2,201) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HB3 | 9 | 0.31 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB1 | 3 | 0.31 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB2 | 3 | 0.31 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB3 | 3 | 0.31 |
| (2,1915) | 1:A:91:THR:HB | 1:A:91:THR:H | 2 | 0.31 |
| (2,1881) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HG | 12 | 0.31 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:H | 14 | 0.31 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:H | 14 | 0.31 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:H | 14 | 0.31 |
| (2,18) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:95:HIS:HD2 | 14 | 0.31 |
| (2,1783) | 1:A:98:LEU:HD11 | 1:A:98:LEU:H | 1 | 0.31 |
| (2,1783) | 1:A:98:LEU:HD12 | 1:A:98:LEU:H | 1 | 0.31 |
| (2,1783) | 1:A:98:LEU:HD13 | 1:A:98:LEU:H | 1 | 0.31 |
| (2,1771) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:98:LEU:H | 9 | 0.31 |
| (2,1720) | 1:A:92:GLN:HG3 | 1:A:89:ALA:HA | 4 | 0.31 |
| (2,17) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:95:HIS:HB2 | 13 | 0.31 |
| (2,17) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:95:HIS:HB2 | 15 | 0.31 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD11 | 2 | 0.31 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD12 | 2 | 0.31 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD13 | 2 | 0.31 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD11 | 2 | 0.31 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD12 | 2 | 0.31 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD13 | 2 | 0.31 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD11 | 2 | 0.31 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD12 | 2 | 0.31 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD13 | 2 | 0.31 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD11 | 12 | 0.31 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD12 | 12 | 0.31 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD13 | 12 | 0.31 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD11 | 12 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD12 | 12 | 0.31 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD13 | 12 | 0.31 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD11 | 12 | 0.31 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD12 | 12 | 0.31 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD13 | 12 | 0.31 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD11 | 14 | 0.31 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD12 | 14 | 0.31 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD13 | 14 | 0.31 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD11 | 14 | 0.31 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD12 | 14 | 0.31 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD13 | 14 | 0.31 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD11 | 14 | 0.31 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD12 | 14 | 0.31 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD13 | 14 | 0.31 |
| (2,1601) | 1:A:86:THR:HB | 1:A:87:PRO:HD2 | 8 | 0.31 |
| (2,1601) | 1:A:86:THR:HB | 1:A:87:PRO:HD2 | 11 | 0.31 |
| (2,1567) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:83:ASP:H | 1 | 0.31 |
| (2,1560) | 1:A:82:PHE:HB2 | 1:A:83:ASP:H | 13 | 0.31 |
| (2,1547) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HA | 9 | 0.31 |
| (2,1547) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HA | 9 | 0.31 |
| (2,1547) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HA | 9 | 0.31 |
| (2,1543) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:51:PHE:HD1 | 16 | 0.31 |
| (2,1543) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:51:PHE:HD2 | 16 | 0.31 |
| (2,1483) | 1:A:60:THR:HA | 1:A:63:GLU:HB2 | 1 | 0.31 |
| (2,1483) | 1:A:60:THR:HA | 1:A:63:GLU:HB2 | 16 | 0.31 |
| (2,1481) | 1:A:78:PRO:HA | 1:A:80:LEU:H | 10 | 0.31 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG21 | 2 | 0.31 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG22 | 2 | 0.31 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG23 | 2 | 0.31 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG21 | 2 | 0.31 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG22 | 2 | 0.31 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG23 | 2 | 0.31 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG21 | 2 | 0.31 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG22 | 2 | 0.31 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG23 | 2 | 0.31 |
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:39:HIS:HB2 | 2 | 0.31 |
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:39:HIS:HB2 | 2 | 0.31 |
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:39:HIS:HB2 | 2 | 0.31 |
| (2,1378) | 1:A:97:ARG:HB3 | 1:A:74:LEU:HD21 | 14 | 0.31 |
| (2,1378) | 1:A:97:ARG:HB3 | 1:A:74:LEU:HD22 | 14 | 0.31 |
| (2,1378) | 1:A:97:ARG:HB3 | 1:A:74:LEU:HD23 | 14 | 0.31 |
| (2,1377) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:74:LEU:HD21 | 5 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1377) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:74:LEU:HD22 | 5 | 0.31 |
| (2,1377) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:74:LEU:HD23 | 5 | 0.31 |
| (2,1367) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:98:LEU:H | 9 | 0.31 |
| (2,1327) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:68:LEU:H | 11 | 0.31 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD11 | 8 | 0.31 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD12 | 8 | 0.31 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD13 | 8 | 0.31 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD11 | 14 | 0.31 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD12 | 14 | 0.31 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD13 | 14 | 0.31 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 5 | 0.31 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 5 | 0.31 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 5 | 0.31 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 12 | 0.31 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 12 | 0.31 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 12 | 0.31 |
| (2,1228) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:63:GLU:H | 4 | 0.31 |
| (2,1228) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:63:GLU:H | 5 | 0.31 |
| (2,1228) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:63:GLU:H | 7 | 0.31 |
| (2,1204) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:59:LEU:HA | 3 | 0.31 |
| (2,1203) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:63:GLU:H | 4 | 0.31 |
| (2,1203) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:63:GLU:H | 7 | 0.31 |
| (2,1194) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 3 | 0.31 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB1 | 1:A:64:LEU:HB3 | 12 | 0.31 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB2 | 1:A:64:LEU:HB3 | 12 | 0.31 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB3 | 1:A:64:LEU:HB3 | 12 | 0.31 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB1 | 2 | 0.31 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB2 | 2 | 0.31 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB3 | 2 | 0.31 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB1 | 2 | 0.31 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB2 | 2 | 0.31 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB3 | 2 | 0.31 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB1 | 2 | 0.31 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB2 | 2 | 0.31 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB3 | 2 | 0.31 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB1 | 8 | 0.31 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB2 | 8 | 0.31 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB3 | 8 | 0.31 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB1 | 8 | 0.31 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB2 | 8 | 0.31 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB3 | 8 | 0.31 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB1 | 8 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB2 | 8 | 0.31 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB3 | 8 | 0.31 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB1 | 13 | 0.31 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB2 | 13 | 0.31 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB3 | 13 | 0.31 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB1 | 13 | 0.31 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB2 | 13 | 0.31 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB3 | 13 | 0.31 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB1 | 13 | 0.31 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB2 | 13 | 0.31 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB3 | 13 | 0.31 |
| (2,1157) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:60:THR:HB | 2 | 0.31 |
| (2,1157) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:60:THR:HB | 2 | 0.31 |
| (2,1157) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:60:THR:HB | 2 | 0.31 |
| (2,1047) | 1:A:52:LYS:HB2 | 1:A:53:ASP:H | 7 | 0.31 |
| (2,1047) | 1:A:52:LYS:HB2 | 1:A:53:ASP:H | 12 | 0.31 |
| (2,1044) | 1:A:52:LYS:HB2 | 1:A:52:LYS:HE2 | 1 | 0.31 |
| (2,1044) | 1:A:52:LYS:HB2 | 1:A:52:LYS:HE2 | 2 | 0.31 |
| (2,1030) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG13 | 4 | 0.31 |
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD21 | 10 | 0.31 |
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD22 | 10 | 0.31 |
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD23 | 10 | 0.31 |
| (1,80) | 1:A:86:THR:H | 1:A:85:PRO:HD2 | 8 | 0.31 |
| (1,73) | 1:A:65:ARG:H | 1:A:64:LEU:H | 13 | 0.31 |
| (1,73) | 1:A:65:ARG:H | 1:A:64:LEU:H | 14 | 0.31 |
| (1,599) | 1:A:33:THR:H | 1:A:33:THR:HG1 | 2 | 0.31 |
| (1,599) | 1:A:33:THR:H | 1:A:33:THR:HG1 | 16 | 0.31 |
| (1,590) | 1:A:96:THR:H | 1:A:97:ARG:H | 10 | 0.31 |
| (1,568) | 1:A:98:LEU:H | 1:A:98:LEU:HD11 | 1 | 0.31 |
| (1,568) | 1:A:98:LEU:H | 1:A:98:LEU:HD12 | 1 | 0.31 |
| (1,568) | 1:A:98:LEU:H | 1:A:98:LEU:HD13 | 1 | 0.31 |
| (1,566) | 1:A:98:LEU:H | 1:A:98:LEU:HB3 | 14 | 0.31 |
| (1,561) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:21:GLN:HB2 | 13 | 0.31 |
| (1,56) | 1:A:60:THR:H | 1:A:59:LEU:HB2 | 2 | 0.31 |
| (1,56) | 1:A:60:THR:H | 1:A:59:LEU:HB2 | 4 | 0.31 |
| (1,56) | 1:A:60:THR:H | 1:A:59:LEU:HB2 | 9 | 0.31 |
| (1,552) | 1:A:12:ARG:H | 1:A:12:ARG:HB3 | 9 | 0.31 |
| (1,552) | 1:A:12:ARG:H | 1:A:12:ARG:HB3 | 11 | 0.31 |
| (1,552) | 1:A:12:ARG:H | 1:A:12:ARG:HB3 | 12 | 0.31 |
| (1,528) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HB3 | 5 | 0.31 |
| (1,528) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HB3 | 7 | 0.31 |
| (1,528) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HB3 | 9 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,528) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HB3 | 10 | 0.31 |
| (1,528) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HB3 | 11 | 0.31 |
| (1,528) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HB3 | 13 | 0.31 |
| (1,528) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HB3 | 15 | 0.31 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB1 | 3 | 0.31 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB2 | 3 | 0.31 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB3 | 3 | 0.31 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB1 | 6 | 0.31 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB2 | 6 | 0.31 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB3 | 6 | 0.31 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB1 | 8 | 0.31 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB2 | 8 | 0.31 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB3 | 8 | 0.31 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB1 | 10 | 0.31 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB2 | 10 | 0.31 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB3 | 10 | 0.31 |
| (1,479) | 1:A:68:LEU:H | 1:A:68:LEU:HG | 9 | 0.31 |
| (1,390) | 1:A:65:ARG:HE | 1:A:65:ARG:HD3 | 6 | 0.31 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD21 | 6 | 0.31 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD22 | 6 | 0.31 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD23 | 6 | 0.31 |
| (1,331) | 1:A:64:LEU:H | 1:A:64:LEU:HB2 | 2 | 0.31 |
| (1,331) | 1:A:64:LEU:H | 1:A:64:LEU:HB2 | 4 | 0.31 |
| (1,331) | 1:A:64:LEU:H | 1:A:64:LEU:HB2 | 5 | 0.31 |
| (1,331) | 1:A:64:LEU:H | 1:A:64:LEU:HB2 | 8 | 0.31 |
| (1,310) | 1:A:76:LEU:H | 1:A:76:LEU:HB2 | 9 | 0.31 |
| (1,268) | 1:A:99:THR:H | 1:A:98:LEU:HD21 | 2 | 0.31 |
| (1,268) | 1:A:99:THR:H | 1:A:98:LEU:HD22 | 2 | 0.31 |
| (1,268) | 1:A:99:THR:H | 1:A:98:LEU:HD23 | 2 | 0.31 |
| (1,25) | 1:A:83:ASP:H | 1:A:84:HIS:H | 9 | 0.31 |
| (1,22) | 1:A:43:GLU:H | 1:A:44:SER:H | 10 | 0.31 |
| (1,213) | 1:A:38:GLY:H | 1:A:38:GLY:HA2 | 7 | 0.31 |
| (1,213) | 1:A:38:GLY:H | 1:A:38:GLY:HA2 | 10 | 0.31 |
| (1,213) | 1:A:38:GLY:H | 1:A:38:GLY:HA2 | 12 | 0.31 |
| (1,213) | 1:A:38:GLY:H | 1:A:38:GLY:HA2 | 13 | 0.31 |
| (1,21) | 1:A:7:THR:H | 1:A:6:ALA:H | 1 | 0.31 |
| (1,21) | 1:A:7:THR:H | 1:A:6:ALA:H | 13 | 0.31 |
| (1,17) | 1:A:100:GLN:H | 1:A:99:THR:H | 4 | 0.31 |
| (1,17) | 1:A:100:GLN:H | 1:A:99:THR:H | 11 | 0.31 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB1 | 3 | 0.31 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB2 | 3 | 0.31 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB3 | 3 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB1 | 10 | 0.31 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB2 | 10 | 0.31 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB3 | 10 | 0.31 |
| (1,128) | 1:A:69:THR:H | 1:A:69:THR:HG21 | 9 | 0.31 |
| (1,128) | 1:A:69:THR:H | 1:A:69:THR:HG22 | 9 | 0.31 |
| (1,128) | 1:A:69:THR:H | 1:A:69:THR:HG23 | 9 | 0.31 |
| (2,976) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:50:ALA:H | 11 | 0.3 |
| (2,960) | 1:A:47:PRO:HD2 | 1:A:46:SER:HB3 | 11 | 0.3 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB1 | 1:A:47:PRO:HA | 5 | 0.3 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB2 | 1:A:47:PRO:HA | 5 | 0.3 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB3 | 1:A:47:PRO:HA | 5 | 0.3 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB1 | 1:A:47:PRO:HA | 9 | 0.3 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB2 | 1:A:47:PRO:HA | 9 | 0.3 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB3 | 1:A:47:PRO:HA | 9 | 0.3 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB1 | 1:A:47:PRO:HA | 12 | 0.3 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB2 | 1:A:47:PRO:HA | 12 | 0.3 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB3 | 1:A:47:PRO:HA | 12 | 0.3 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB1 | 1:A:47:PRO:HA | 13 | 0.3 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB2 | 1:A:47:PRO:HA | 13 | 0.3 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB3 | 1:A:47:PRO:HA | 13 | 0.3 |
| (2,92) | 1:A:4:SER:HA | 1:A:3:ALA:HB1 | 7 | 0.3 |
| (2,92) | 1:A:4:SER:HA | 1:A:3:ALA:HB2 | 7 | 0.3 |
| (2,92) | 1:A:4:SER:HA | 1:A:3:ALA:HB3 | 7 | 0.3 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:33:THR:HG21 | 10 | 0.3 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:33:THR:HG22 | 10 | 0.3 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:33:THR:HG23 | 10 | 0.3 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:33:THR:HG21 | 10 | 0.3 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:33:THR:HG22 | 10 | 0.3 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:33:THR:HG23 | 10 | 0.3 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:33:THR:HG21 | 10 | 0.3 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:33:THR:HG22 | 10 | 0.3 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:33:THR:HG23 | 10 | 0.3 |
| (2,832) | 1:A:37:LEU:HB2 | 1:A:37:LEU:H | 3 | 0.3 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:64:LEU:H | 3 | 0.3 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:64:LEU:H | 3 | 0.3 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:64:LEU:H | 3 | 0.3 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:64:LEU:H | 11 | 0.3 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:64:LEU:H | 11 | 0.3 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:64:LEU:H | 11 | 0.3 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:64:LEU:H | 16 | 0.3 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:64:LEU:H | 16 | 0.3 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:64:LEU:H | 16 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG21 | 13 | 0.3 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG22 | 13 | 0.3 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG23 | 13 | 0.3 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:29:VAL:H | 12 | 0.3 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:29:VAL:H | 12 | 0.3 |
| (2,795) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:29:VAL:H | 12 | 0.3 |
| (2,785) | 1:A:27:THR:HB | 1:A:23:GLN:HB2 | 2 | 0.3 |
| (2,785) | 1:A:27:THR:HB | 1:A:23:GLN:HB2 | 4 | 0.3 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB1 | 13 | 0.3 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB2 | 13 | 0.3 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB3 | 13 | 0.3 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HA | 3 | 0.3 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HA | 3 | 0.3 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HA | 3 | 0.3 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HA | 15 | 0.3 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HA | 15 | 0.3 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HA | 15 | 0.3 |
| (2,698) | 1:A:83:ASP:HA | 1:A:82:PHE:H | 3 | 0.3 |
| (2,698) | 1:A:83:ASP:HA | 1:A:82:PHE:H | 6 | 0.3 |
| (2,641) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:54:LEU:HA | 16 | 0.3 |
| (2,624) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 16 | 0.3 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB1 | 7 | 0.3 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB2 | 7 | 0.3 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB3 | 7 | 0.3 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB1 | 13 | 0.3 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB2 | 13 | 0.3 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB3 | 13 | 0.3 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB1 | 15 | 0.3 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB2 | 15 | 0.3 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB3 | 15 | 0.3 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD11 | 2 | 0.3 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD12 | 2 | 0.3 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD13 | 2 | 0.3 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD11 | 2 | 0.3 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD12 | 2 | 0.3 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD13 | 2 | 0.3 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD11 | 2 | 0.3 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD12 | 2 | 0.3 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD13 | 2 | 0.3 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD11 | 5 | 0.3 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD12 | 5 | 0.3 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD13 | 5 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD11 | 5 | 0.3 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD12 | 5 | 0.3 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD13 | 5 | 0.3 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD11 | 5 | 0.3 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD12 | 5 | 0.3 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD13 | 5 | 0.3 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD11 | 13 | 0.3 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD12 | 13 | 0.3 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD13 | 13 | 0.3 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD11 | 13 | 0.3 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD12 | 13 | 0.3 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD13 | 13 | 0.3 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD11 | 13 | 0.3 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD12 | 13 | 0.3 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD13 | 13 | 0.3 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:H | 7 | 0.3 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:H | 7 | 0.3 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 7 | 0.3 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:H | 11 | 0.3 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:H | 11 | 0.3 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 11 | 0.3 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:71:ASN:HB3 | 5 | 0.3 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:71:ASN:HB3 | 5 | 0.3 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:71:ASN:HB3 | 5 | 0.3 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:71:ASN:HB3 | 13 | 0.3 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:71:ASN:HB3 | 13 | 0.3 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:71:ASN:HB3 | 13 | 0.3 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD11 | 3 | 0.3 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD12 | 3 | 0.3 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD13 | 3 | 0.3 |
| (2,525) | 1:A:96:THR:HB | 1:A:96:THR:H | 14 | 0.3 |
| (2,511) | 1:A:23:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HA | 4 | 0.3 |
| (2,511) | 1:A:23:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HA | 14 | 0.3 |
| (2,478) | 1:A:59:LEU:HG | 1:A:60:THR:H | 1 | 0.3 |
| (2,478) | 1:A:59:LEU:HG | 1:A:60:THR:H | 2 | 0.3 |
| (2,478) | 1:A:59:LEU:HG | 1:A:60:THR:H | 6 | 0.3 |
| (2,478) | 1:A:59:LEU:HG | 1:A:60:THR:H | 9 | 0.3 |
| (2,477) | 1:A:25:LEU:HG | 1:A:25:LEU:H | 9 | 0.3 |
| (2,473) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HD11 | 6 | 0.3 |
| (2,473) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HD12 | 6 | 0.3 |
| (2,473) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HD13 | 6 | 0.3 |
| (2,473) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HD11 | 11 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,473) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HD12 | 11 | 0.3 |
| (2,473) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HD13 | 11 | 0.3 |
| (2,473) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HD11 | 13 | 0.3 |
| (2,473) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HD12 | 13 | 0.3 |
| (2,473) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HD13 | 13 | 0.3 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:51:PHE:HD1 | 14 | 0.3 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:51:PHE:HD2 | 14 | 0.3 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:51:PHE:HD1 | 14 | 0.3 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:51:PHE:HD2 | 14 | 0.3 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:51:PHE:HD1 | 14 | 0.3 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:51:PHE:HD2 | 14 | 0.3 |
| (2,433) | 1:A:21:GLN:HG2 | 1:A:21:GLN:HA | 2 | 0.3 |
| (2,414) | 1:A:9:LEU:HA | 1:A:8:ASP:HB2 | 7 | 0.3 |
| (2,366) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:17:SER:HA | 8 | 0.3 |
| (2,366) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:17:SER:HA | 14 | 0.3 |
| (2,337) | 1:A:11:ALA:HA | 1:A:14:ASN:HB2 | 15 | 0.3 |
| (2,295) | 1:A:59:LEU:HB2 | 1:A:60:THR:H | 7 | 0.3 |
| (2,262) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:12:ARG:H | 3 | 0.3 |
| (2,262) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:12:ARG:H | 13 | 0.3 |
| (2,262) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:12:ARG:H | 15 | 0.3 |
| (2,262) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:12:ARG:H | 16 | 0.3 |
| (2,1915) | 1:A:91:THR:HB | 1:A:91:THR:H | 5 | 0.3 |
| (2,1915) | 1:A:91:THR:HB | 1:A:91:THR:H | 10 | 0.3 |
| (2,1915) | 1:A:91:THR:HB | 1:A:91:THR:H | 13 | 0.3 |
| (2,1915) | 1:A:91:THR:HB | 1:A:91:THR:H | 14 | 0.3 |
| (2,19) | 1:A:102:HIS:HB3 | 1:A:102:HIS:HD2 | 6 | 0.3 |
| (2,19) | 1:A:102:HIS:HB3 | 1:A:102:HIS:HD2 | 9 | 0.3 |
| (2,1848) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:22:GLN:H | 14 | 0.3 |
| (2,1783) | 1:A:98:LEU:HD11 | 1:A:98:LEU:H | 7 | 0.3 |
| (2,1783) | 1:A:98:LEU:HD12 | 1:A:98:LEU:H | 7 | 0.3 |
| (2,1783) | 1:A:98:LEU:HD13 | 1:A:98:LEU:H | 7 | 0.3 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD11 | 3 | 0.3 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD12 | 3 | 0.3 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD13 | 3 | 0.3 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD11 | 6 | 0.3 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD12 | 6 | 0.3 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD13 | 6 | 0.3 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD11 | 10 | 0.3 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD12 | 10 | 0.3 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD13 | 10 | 0.3 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD11 | 12 | 0.3 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD12 | 12 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD13 | 12 | 0.3 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG21 | 6 | 0.3 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG22 | 6 | 0.3 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG23 | 6 | 0.3 |
| (2,1736) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:93:HIS:HD2 | 7 | 0.3 |
| (2,1722) | 1:A:92:GLN:HG3 | 1:A:92:GLN:H | 10 | 0.3 |
| (2,1722) | 1:A:92:GLN:HG3 | 1:A:92:GLN:H | 15 | 0.3 |
| (2,1720) | 1:A:92:GLN:HG3 | 1:A:89:ALA:HA | 11 | 0.3 |
| (2,1720) | 1:A:92:GLN:HG3 | 1:A:89:ALA:HA | 15 | 0.3 |
| (2,1697) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:94:LEU:HB3 | 6 | 0.3 |
| (2,1697) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:94:LEU:HB3 | 14 | 0.3 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD11 | 1 | 0.3 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD12 | 1 | 0.3 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD13 | 1 | 0.3 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD11 | 1 | 0.3 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD12 | 1 | 0.3 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD13 | 1 | 0.3 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD11 | 1 | 0.3 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD12 | 1 | 0.3 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD13 | 1 | 0.3 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HE1 | 6 | 0.3 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HE2 | 6 | 0.3 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HE1 | 6 | 0.3 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HE2 | 6 | 0.3 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HE1 | 6 | 0.3 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HE2 | 6 | 0.3 |
| (2,1630) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:51:PHE:H | 2 | 0.3 |
| (2,1601) | 1:A:86:THR:HB | 1:A:87:PRO:HD2 | 14 | 0.3 |
| (2,1567) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:83:ASP:H | 12 | 0.3 |
| (2,1567) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:83:ASP:H | 14 | 0.3 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG21 | 7 | 0.3 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG22 | 7 | 0.3 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG23 | 7 | 0.3 |
| (2,1483) | 1:A:60:THR:HA | 1:A:63:GLU:HB2 | 3 | 0.3 |
| (2,1483) | 1:A:60:THR:HA | 1:A:63:GLU:HB2 | 11 | 0.3 |
| (2,1481) | 1:A:78:PRO:HA | 1:A:80:LEU:H | 12 | 0.3 |
| (2,1433) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:70:HIS:HD2 | 10 | 0.3 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG21 | 3 | 0.3 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG22 | 3 | 0.3 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG23 | 3 | 0.3 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG21 | 3 | 0.3 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG22 | 3 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG23 | 3 | 0.3 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG21 | 3 | 0.3 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG22 | 3 | 0.3 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG23 | 3 | 0.3 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG21 | 10 | 0.3 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG22 | 10 | 0.3 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG23 | 10 | 0.3 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG21 | 10 | 0.3 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG22 | 10 | 0.3 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG23 | 10 | 0.3 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG21 | 10 | 0.3 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG22 | 10 | 0.3 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG23 | 10 | 0.3 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HB | 5 | 0.3 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HB | 5 | 0.3 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HB | 5 | 0.3 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HB | 6 | 0.3 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HB | 6 | 0.3 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HB | 6 | 0.3 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HB | 10 | 0.3 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HB | 10 | 0.3 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HB | 10 | 0.3 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HB | 15 | 0.3 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HB | 15 | 0.3 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HB | 15 | 0.3 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD11 | 14 | 0.3 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD12 | 14 | 0.3 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD13 | 14 | 0.3 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 8 | 0.3 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 8 | 0.3 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 8 | 0.3 |
| (2,1228) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:63:GLU:H | 3 | 0.3 |
| (2,1228) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:63:GLU:H | 10 | 0.3 |
| (2,1228) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:63:GLU:H | 16 | 0.3 |
| (2,1219) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:60:THR:HG21 | 12 | 0.3 |
| (2,1219) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:60:THR:HG22 | 12 | 0.3 |
| (2,1219) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:60:THR:HG23 | 12 | 0.3 |
| (2,1204) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:59:LEU:HA | 6 | 0.3 |
| (2,1194) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 15 | 0.3 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB1 | 1:A:64:LEU:HB3 | 5 | 0.3 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB2 | 1:A:64:LEU:HB3 | 5 | 0.3 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB3 | 1:A:64:LEU:HB3 | 5 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB1 | 3 | 0.3 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB2 | 3 | 0.3 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB3 | 3 | 0.3 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB1 | 3 | 0.3 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB2 | 3 | 0.3 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB3 | 3 | 0.3 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB1 | 3 | 0.3 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB2 | 3 | 0.3 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB3 | 3 | 0.3 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB1 | 10 | 0.3 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB2 | 10 | 0.3 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB3 | 10 | 0.3 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB1 | 10 | 0.3 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB2 | 10 | 0.3 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB3 | 10 | 0.3 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB1 | 10 | 0.3 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB2 | 10 | 0.3 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB3 | 10 | 0.3 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB1 | 14 | 0.3 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB2 | 14 | 0.3 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB3 | 14 | 0.3 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB1 | 14 | 0.3 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB2 | 14 | 0.3 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB3 | 14 | 0.3 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB1 | 14 | 0.3 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB2 | 14 | 0.3 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB3 | 14 | 0.3 |
| (2,1157) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:60:THR:HB | 12 | 0.3 |
| (2,1157) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:60:THR:HB | 12 | 0.3 |
| (2,1157) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:60:THR:HB | 12 | 0.3 |
| (2,1157) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:60:THR:HB | 13 | 0.3 |
| (2,1157) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:60:THR:HB | 13 | 0.3 |
| (2,1157) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:60:THR:HB | 13 | 0.3 |
| (2,111) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:4:SER:HB3 | 2 | 0.3 |
| (2,111) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:4:SER:HB3 | 2 | 0.3 |
| (2,111) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:4:SER:HB3 | 2 | 0.3 |
| (2,1053) | 1:A:52:LYS:HG2 | 1:A:52:LYS:HA | 11 | 0.3 |
| (2,1047) | 1:A:52:LYS:HB2 | 1:A:53:ASP:H | 11 | 0.3 |
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD21 | 9 | 0.3 |
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD22 | 9 | 0.3 |
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD23 | 9 | 0.3 |
| (1,94) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:68:LEU:HA | 4 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,94) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:68:LEU:HA | 8 | 0.3 |
| (1,86) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:28:LEU:HD11 | 3 | 0.3 |
| (1,86) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:28:LEU:HD12 | 3 | 0.3 |
| (1,86) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:28:LEU:HD13 | 3 | 0.3 |
| (1,80) | 1:A:86:THR:H | 1:A:85:PRO:HD2 | 2 | 0.3 |
| (1,80) | 1:A:86:THR:H | 1:A:85:PRO:HD2 | 6 | 0.3 |
| (1,599) | 1:A:33:THR:H | 1:A:33:THR:HG1 | 3 | 0.3 |
| (1,599) | 1:A:33:THR:H | 1:A:33:THR:HG1 | 9 | 0.3 |
| (1,568) | 1:A:98:LEU:H | 1:A:98:LEU:HD11 | 7 | 0.3 |
| (1,568) | 1:A:98:LEU:H | 1:A:98:LEU:HD12 | 7 | 0.3 |
| (1,568) | 1:A:98:LEU:H | 1:A:98:LEU:HD13 | 7 | 0.3 |
| (1,566) | 1:A:98:LEU:H | 1:A:98:LEU:HB3 | 13 | 0.3 |
| (1,56) | 1:A:60:THR:H | 1:A:59:LEU:HB2 | 3 | 0.3 |
| (1,56) | 1:A:60:THR:H | 1:A:59:LEU:HB2 | 8 | 0.3 |
| (1,552) | 1:A:12:ARG:H | 1:A:12:ARG:HB3 | 1 | 0.3 |
| (1,552) | 1:A:12:ARG:H | 1:A:12:ARG:HB3 | 3 | 0.3 |
| (1,552) | 1:A:12:ARG:H | 1:A:12:ARG:HB3 | 8 | 0.3 |
| (1,552) | 1:A:12:ARG:H | 1:A:12:ARG:HB3 | 10 | 0.3 |
| (1,552) | 1:A:12:ARG:H | 1:A:12:ARG:HB3 | 15 | 0.3 |
| (1,552) | 1:A:12:ARG:H | 1:A:12:ARG:HB3 | 16 | 0.3 |
| (1,528) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HB3 | 4 | 0.3 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB1 | 7 | 0.3 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB2 | 7 | 0.3 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB3 | 7 | 0.3 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB1 | 11 | 0.3 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB2 | 11 | 0.3 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB3 | 11 | 0.3 |
| (1,44) | 1:A:79:THR:H | 1:A:78:PRO:HA | 9 | 0.3 |
| (1,390) | 1:A:65:ARG:HE | 1:A:65:ARG:HD3 | 2 | 0.3 |
| (1,342) | 1:A:66:ASN:H | 1:A:66:ASN:HB2 | 13 | 0.3 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD21 | 14 | 0.3 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD22 | 14 | 0.3 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD23 | 14 | 0.3 |
| (1,331) | 1:A:64:LEU:H | 1:A:64:LEU:HB2 | 3 | 0.3 |
| (1,331) | 1:A:64:LEU:H | 1:A:64:LEU:HB2 | 9 | 0.3 |
| (1,331) | 1:A:64:LEU:H | 1:A:64:LEU:HB2 | 13 | 0.3 |
| (1,331) | 1:A:64:LEU:H | 1:A:64:LEU:HB2 | 14 | 0.3 |
| (1,331) | 1:A:64:LEU:H | 1:A:64:LEU:HB2 | 15 | 0.3 |
| (1,33) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:55:GLY:H | 1 | 0.3 |
| (1,312) | 1:A:46:SER:H | 1:A:45:ILE:HG12 | 1 | 0.3 |
| (1,312) | 1:A:46:SER:H | 1:A:45:ILE:HG12 | 4 | 0.3 |
| (1,312) | 1:A:46:SER:H | 1:A:45:ILE:HG12 | 6 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,312) | 1:A:46:SER:H | 1:A:45:ILE:HG12 | 7 | 0.3 |
| (1,312) | 1:A:46:SER:H | 1:A:45:ILE:HG12 | 10 | 0.3 |
| (1,312) | 1:A:46:SER:H | 1:A:45:ILE:HG12 | 11 | 0.3 |
| (1,309) | 1:A:56:ILE:H | 1:A:51:PHE:HB2 | 16 | 0.3 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 5 | 0.3 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 5 | 0.3 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 5 | 0.3 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 11 | 0.3 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 11 | 0.3 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 11 | 0.3 |
| (1,286) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HB2 | 2 | 0.3 |
| (1,270) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:81:ILE:HG12 | 9 | 0.3 |
| (1,25) | 1:A:83:ASP:H | 1:A:84:HIS:H | 7 | 0.3 |
| (1,22) | 1:A:43:GLU:H | 1:A:44:SER:H | 2 | 0.3 |
| (1,22) | 1:A:43:GLU:H | 1:A:44:SER:H | 14 | 0.3 |
| (1,213) | 1:A:38:GLY:H | 1:A:38:GLY:HA2 | 1 | 0.3 |
| (1,213) | 1:A:38:GLY:H | 1:A:38:GLY:HA2 | 9 | 0.3 |
| (1,213) | 1:A:38:GLY:H | 1:A:38:GLY:HA2 | 11 | 0.3 |
| (1,21) | 1:A:7:THR:H | 1:A:6:ALA:H | 8 | 0.3 |
| (1,185) | 1:A:16:LEU:H | 1:A:16:LEU:HD21 | 11 | 0.3 |
| (1,185) | 1:A:16:LEU:H | 1:A:16:LEU:HD22 | 11 | 0.3 |
| (1,185) | 1:A:16:LEU:H | 1:A:16:LEU:HD23 | 11 | 0.3 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB1 | 7 | 0.3 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB2 | 7 | 0.3 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB3 | 7 | 0.3 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB1 | 14 | 0.3 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB2 | 14 | 0.3 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB3 | 14 | 0.3 |
| (1,110) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:52:LYS:HG3 | 7 | 0.3 |
| (2,997) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HG | 1 | 0.29 |
| (2,997) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HG | 1 | 0.29 |
| (2,997) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HG | 1 | 0.29 |
| (2,980) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:54:LEU:HG | 11 | 0.29 |
| (2,976) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:50:ALA:H | 3 | 0.29 |
| (2,976) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:50:ALA:H | 16 | 0.29 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB1 | 1:A:47:PRO:HA | 15 | 0.29 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB2 | 1:A:47:PRO:HA | 15 | 0.29 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB3 | 1:A:47:PRO:HA | 15 | 0.29 |
| (2,943) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:47:PRO:HG2 | 8 | 0.29 |
| (2,943) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:47:PRO:HG2 | 11 | 0.29 |
| (2,943) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:47:PRO:HG2 | 12 | 0.29 |
| (2,904) | 1:A:42:PRO:HG3 | 1:A:42:PRO:HD3 | 7 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,876) | 1:A:42:PRO:HB2 | 1:A:43:GLU:H | 3 | 0.29 |
| (2,876) | 1:A:42:PRO:HB2 | 1:A:43:GLU:H | 7 | 0.29 |
| (2,857) | 1:A:37:LEU:HD21 | 1:A:54:LEU:H | 1 | 0.29 |
| (2,857) | 1:A:37:LEU:HD22 | 1:A:54:LEU:H | 1 | 0.29 |
| (2,857) | 1:A:37:LEU:HD23 | 1:A:54:LEU:H | 1 | 0.29 |
| (2,857) | 1:A:37:LEU:HD21 | 1:A:54:LEU:H | 9 | 0.29 |
| (2,857) | 1:A:37:LEU:HD22 | 1:A:54:LEU:H | 9 | 0.29 |
| (2,857) | 1:A:37:LEU:HD23 | 1:A:54:LEU:H | 9 | 0.29 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:74:LEU:H | 1 | 0.29 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:74:LEU:H | 1 | 0.29 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:74:LEU:H | 1 | 0.29 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:74:LEU:H | 16 | 0.29 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:74:LEU:H | 16 | 0.29 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:74:LEU:H | 16 | 0.29 |
| (2,832) | 1:A:37:LEU:HB2 | 1:A:37:LEU:H | 9 | 0.29 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:33:THR:HA | 1 | 0.29 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:33:THR:HA | 1 | 0.29 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:33:THR:HA | 1 | 0.29 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG21 | 11 | 0.29 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG22 | 11 | 0.29 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG23 | 11 | 0.29 |
| (2,785) | 1:A:27:THR:HB | 1:A:23:GLN:HB2 | 1 | 0.29 |
| (2,785) | 1:A:27:THR:HB | 1:A:23:GLN:HB2 | 10 | 0.29 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB1 | 5 | 0.29 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB2 | 5 | 0.29 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB3 | 5 | 0.29 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB1 | 6 | 0.29 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB2 | 6 | 0.29 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB3 | 6 | 0.29 |
| (2,745) | 1:A:33:THR:HA | 1:A:30:ALA:HA | 3 | 0.29 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:34:ALA:HA | 4 | 0.29 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:34:ALA:HA | 4 | 0.29 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:34:ALA:HA | 4 | 0.29 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:34:ALA:HA | 11 | 0.29 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:34:ALA:HA | 11 | 0.29 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:34:ALA:HA | 11 | 0.29 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HA | 10 | 0.29 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HA | 10 | 0.29 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HA | 10 | 0.29 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG11 | 1:A:33:THR:HG1 | 1 | 0.29 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG12 | 1:A:33:THR:HG1 | 1 | 0.29 |
| (2,679) | 1:A:29:VAL:HG13 | 1:A:33:THR:HG1 | 1 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,641) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:54:LEU:HA | 3 | 0.29 |
| (2,641) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:54:LEU:HA | 6 | 0.29 |
| (2,641) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:54:LEU:HA | 8 | 0.29 |
| (2,641) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:54:LEU:HA | 12 | 0.29 |
| (2,641) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:54:LEU:HA | 14 | 0.29 |
| (2,624) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 7 | 0.29 |
| (2,624) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 8 | 0.29 |
| (2,624) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 11 | 0.29 |
| (2,624) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 13 | 0.29 |
| (2,624) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 15 | 0.29 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:71:ASN:HB3 | 3 | 0.29 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:71:ASN:HB3 | 3 | 0.29 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:71:ASN:HB3 | 3 | 0.29 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:71:ASN:HB3 | 7 | 0.29 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:71:ASN:HB3 | 7 | 0.29 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:71:ASN:HB3 | 7 | 0.29 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:71:ASN:HB3 | 10 | 0.29 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:71:ASN:HB3 | 10 | 0.29 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:71:ASN:HB3 | 10 | 0.29 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:29:VAL:HA | 11 | 0.29 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:29:VAL:HA | 11 | 0.29 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:29:VAL:HA | 11 | 0.29 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:29:VAL:HA | 12 | 0.29 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:29:VAL:HA | 12 | 0.29 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:29:VAL:HA | 12 | 0.29 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:29:VAL:HA | 15 | 0.29 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:29:VAL:HA | 15 | 0.29 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:29:VAL:HA | 15 | 0.29 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD11 | 12 | 0.29 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD12 | 12 | 0.29 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD13 | 12 | 0.29 |
| (2,533) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:25:LEU:HB2 | 5 | 0.29 |
| (2,511) | 1:A:23:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HA | 2 | 0.29 |
| (2,508) | 1:A:23:GLN:HB3 | 1:A:20:GLN:HA | 3 | 0.29 |
| (2,481) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:GLN:HA | 5 | 0.29 |
| (2,478) | 1:A:59:LEU:HG | 1:A:60:THR:H | 3 | 0.29 |
| (2,477) | 1:A:25:LEU:HG | 1:A:25:LEU:H | 12 | 0.29 |
| (2,477) | 1:A:25:LEU:HG | 1:A:25:LEU:H | 14 | 0.29 |
| (2,471) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HB3 | 6 | 0.29 |
| (2,471) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HB3 | 16 | 0.29 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:51:PHE:HD1 | 2 | 0.29 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:51:PHE:HD2 | 2 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:51:PHE:HD1 | 2 | 0.29 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:51:PHE:HD2 | 2 | 0.29 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:51:PHE:HD1 | 2 | 0.29 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:51:PHE:HD2 | 2 | 0.29 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:51:PHE:HD1 | 6 | 0.29 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:51:PHE:HD2 | 6 | 0.29 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:51:PHE:HD1 | 6 | 0.29 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:51:PHE:HD2 | 6 | 0.29 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:51:PHE:HD1 | 6 | 0.29 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:51:PHE:HD2 | 6 | 0.29 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:51:PHE:HD1 | 7 | 0.29 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:51:PHE:HD2 | 7 | 0.29 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:51:PHE:HD1 | 7 | 0.29 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:51:PHE:HD2 | 7 | 0.29 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:51:PHE:HD1 | 7 | 0.29 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:51:PHE:HD2 | 7 | 0.29 |
| (2,458) | 1:A:20:GLN:HB3 | 1:A:16:LEU:HB3 | 4 | 0.29 |
| (2,458) | 1:A:20:GLN:HB3 | 1:A:16:LEU:HB3 | 6 | 0.29 |
| (2,447) | 1:A:20:GLN:HB3 | 1:A:20:GLN:HA | 12 | 0.29 |
| (2,447) | 1:A:20:GLN:HB3 | 1:A:20:GLN:HA | 13 | 0.29 |
| (2,433) | 1:A:21:GLN:HG2 | 1:A:21:GLN:HA | 9 | 0.29 |
| (2,355) | 1:A:16:LEU:HG | 1:A:20:GLN:HG3 | 6 | 0.29 |
| (2,353) | 1:A:16:LEU:HG | 1:A:16:LEU:HA | 6 | 0.29 |
| (2,353) | 1:A:16:LEU:HG | 1:A:16:LEU:HA | 11 | 0.29 |
| (2,34) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:51:PHE:HZ | 3 | 0.29 |
| (2,34) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:51:PHE:HZ | 13 | 0.29 |
| (2,31) | 1:A:39:HIS:HD2 | 1:A:37:LEU:HB3 | 1 | 0.29 |
| (2,262) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:12:ARG:H | 1 | 0.29 |
| (2,262) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:12:ARG:H | 5 | 0.29 |
| (2,235) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:52:LYS:HE2 | 13 | 0.29 |
| (2,235) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:52:LYS:HE2 | 13 | 0.29 |
| (2,235) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:52:LYS:HE2 | 13 | 0.29 |
| (2,20) | 1:A:102:HIS:HB2 | 1:A:102:HIS:HD2 | 2 | 0.29 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB1 | 16 | 0.29 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB2 | 16 | 0.29 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB3 | 16 | 0.29 |
| (2,1915) | 1:A:91:THR:HB | 1:A:91:THR:H | 9 | 0.29 |
| (2,1915) | 1:A:91:THR:HB | 1:A:91:THR:H | 15 | 0.29 |
| (2,1915) | 1:A:91:THR:HB | 1:A:91:THR:H | 16 | 0.29 |
| (2,19) | 1:A:102:HIS:HB3 | 1:A:102:HIS:HD2 | 10 | 0.29 |
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HB3 | 4 | 0.29 |
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HB3 | 4 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HB3 | 4 | 0.29 |
| (2,1888) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:13:LEU:H | 1 | 0.29 |
| (2,1888) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:13:LEU:H | 7 | 0.29 |
| (2,1885) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:13:LEU:HA | 11 | 0.29 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD11 | 4 | 0.29 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD12 | 4 | 0.29 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD13 | 4 | 0.29 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD11 | 13 | 0.29 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD12 | 13 | 0.29 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD13 | 13 | 0.29 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD11 | 14 | 0.29 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD12 | 14 | 0.29 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD13 | 14 | 0.29 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD11 | 15 | 0.29 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD12 | 15 | 0.29 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD13 | 15 | 0.29 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD11 | 16 | 0.29 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD12 | 16 | 0.29 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD13 | 16 | 0.29 |
| (2,1741) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HB2 | 2 | 0.29 |
| (2,1720) | 1:A:92:GLN:HG3 | 1:A:89:ALA:HA | 5 | 0.29 |
| (2,1714) | 1:A:92:GLN:HG2 | 1:A:92:GLN:HA | 2 | 0.29 |
| (2,17) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:95:HIS:HB2 | 4 | 0.29 |
| (2,1688) | 1:A:91:THR:HB | 1:A:91:THR:HA | 2 | 0.29 |
| (2,1688) | 1:A:91:THR:HB | 1:A:91:THR:HA | 3 | 0.29 |
| (2,1688) | 1:A:91:THR:HB | 1:A:91:THR:HA | 4 | 0.29 |
| (2,1688) | 1:A:91:THR:HB | 1:A:91:THR:HA | 6 | 0.29 |
| (2,1688) | 1:A:91:THR:HB | 1:A:91:THR:HA | 10 | 0.29 |
| (2,1688) | 1:A:91:THR:HB | 1:A:91:THR:HA | 11 | 0.29 |
| (2,1688) | 1:A:91:THR:HB | 1:A:91:THR:HA | 12 | 0.29 |
| (2,1688) | 1:A:91:THR:HB | 1:A:91:THR:HA | 13 | 0.29 |
| (2,1688) | 1:A:91:THR:HB | 1:A:91:THR:HA | 14 | 0.29 |
| (2,1688) | 1:A:91:THR:HB | 1:A:91:THR:HA | 15 | 0.29 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD11 | 7 | 0.29 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD12 | 7 | 0.29 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD13 | 7 | 0.29 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD11 | 7 | 0.29 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD12 | 7 | 0.29 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD13 | 7 | 0.29 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD11 | 7 | 0.29 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD12 | 7 | 0.29 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD13 | 7 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HZ | 10 | 0.29 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HZ | 10 | 0.29 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HZ | 10 | 0.29 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:85:PRO:HD2 | 1 | 0.29 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:85:PRO:HD2 | 1 | 0.29 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:85:PRO:HD2 | 1 | 0.29 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:85:PRO:HD2 | 4 | 0.29 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:85:PRO:HD2 | 4 | 0.29 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:85:PRO:HD2 | 4 | 0.29 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:85:PRO:HD2 | 10 | 0.29 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:85:PRO:HD2 | 10 | 0.29 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:85:PRO:HD2 | 10 | 0.29 |
| (2,1630) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:51:PHE:H | 7 | 0.29 |
| (2,1630) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:51:PHE:H | 13 | 0.29 |
| (2,1601) | 1:A:86:THR:HB | 1:A:87:PRO:HD2 | 4 | 0.29 |
| (2,1601) | 1:A:86:THR:HB | 1:A:87:PRO:HD2 | 6 | 0.29 |
| (2,1601) | 1:A:86:THR:HB | 1:A:87:PRO:HD2 | 12 | 0.29 |
| (2,1601) | 1:A:86:THR:HB | 1:A:87:PRO:HD2 | 16 | 0.29 |
| (2,1589) | 1:A:85:PRO:HB3 | 1:A:85:PRO:HA | 1 | 0.29 |
| (2,1589) | 1:A:85:PRO:HB3 | 1:A:85:PRO:HA | 2 | 0.29 |
| (2,1589) | 1:A:85:PRO:HB3 | 1:A:85:PRO:HA | 5 | 0.29 |
| (2,1589) | 1:A:85:PRO:HB3 | 1:A:85:PRO:HA | 7 | 0.29 |
| (2,1589) | 1:A:85:PRO:HB3 | 1:A:85:PRO:HA | 8 | 0.29 |
| (2,1589) | 1:A:85:PRO:HB3 | 1:A:85:PRO:HA | 9 | 0.29 |
| (2,1589) | 1:A:85:PRO:HB3 | 1:A:85:PRO:HA | 10 | 0.29 |
| (2,1589) | 1:A:85:PRO:HB3 | 1:A:85:PRO:HA | 11 | 0.29 |
| (2,1589) | 1:A:85:PRO:HB3 | 1:A:85:PRO:HA | 13 | 0.29 |
| (2,1589) | 1:A:85:PRO:HB3 | 1:A:85:PRO:HA | 16 | 0.29 |
| (2,1586) | 1:A:85:PRO:HG2 | 1:A:85:PRO:HB2 | 1 | 0.29 |
| (2,1586) | 1:A:85:PRO:HG2 | 1:A:85:PRO:HB2 | 10 | 0.29 |
| (2,1567) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:83:ASP:H | 6 | 0.29 |
| (2,1538) | 1:A:98:LEU:HB3 | 1:A:99:THR:H | 1 | 0.29 |
| (2,1519) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:21:GLN:HG3 | 12 | 0.29 |
| (2,1481) | 1:A:78:PRO:HA | 1:A:80:LEU:H | 16 | 0.29 |
| (2,1433) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:70:HIS:HD2 | 13 | 0.29 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG21 | 14 | 0.29 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG22 | 14 | 0.29 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG23 | 14 | 0.29 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG21 | 14 | 0.29 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG22 | 14 | 0.29 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG23 | 14 | 0.29 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG21 | 14 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG22 | 14 | 0.29 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG23 | 14 | 0.29 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HB | 12 | 0.29 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HB | 12 | 0.29 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HB | 12 | 0.29 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD11 | 2 | 0.29 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD12 | 2 | 0.29 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD13 | 2 | 0.29 |
| (2,1377) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:74:LEU:HD21 | 1 | 0.29 |
| (2,1377) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:74:LEU:HD22 | 1 | 0.29 |
| (2,1377) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:74:LEU:HD23 | 1 | 0.29 |
| (2,1377) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:74:LEU:HD21 | 12 | 0.29 |
| (2,1377) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:74:LEU:HD22 | 12 | 0.29 |
| (2,1377) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:74:LEU:HD23 | 12 | 0.29 |
| (2,1367) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:98:LEU:H | 11 | 0.29 |
| (2,1367) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:98:LEU:H | 14 | 0.29 |
| (2,1363) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:93:HIS:H | 5 | 0.29 |
| (2,1363) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:93:HIS:H | 7 | 0.29 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD11 | 7 | 0.29 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD12 | 7 | 0.29 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD13 | 7 | 0.29 |
| (2,1318) | 1:A:68:LEU:HB3 | 1:A:68:LEU:HA | 12 | 0.29 |
| (2,1301) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:65:ARG:H | 2 | 0.29 |
| (2,1299) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:67:THR:H | 9 | 0.29 |
| (2,1293) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:65:ARG:H | 2 | 0.29 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 9 | 0.29 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 9 | 0.29 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 9 | 0.29 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 14 | 0.29 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 14 | 0.29 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 14 | 0.29 |
| (2,1228) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:63:GLU:H | 13 | 0.29 |
| (2,1194) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 11 | 0.29 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ALA:H | 14 | 0.29 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ALA:H | 14 | 0.29 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ALA:H | 14 | 0.29 |
| (2,1157) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:60:THR:HB | 9 | 0.29 |
| (2,1157) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:60:THR:HB | 9 | 0.29 |
| (2,1157) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:60:THR:HB | 9 | 0.29 |
| (2,1047) | 1:A:52:LYS:HB2 | 1:A:53:ASP:H | 6 | 0.29 |
| (2,1047) | 1:A:52:LYS:HB2 | 1:A:53:ASP:H | 10 | 0.29 |
| (2,1044) | 1:A:52:LYS:HB2 | 1:A:52:LYS:HE2 | 8 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD21 | 15 | 0.29 |
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD22 | 15 | 0.29 |
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD23 | 15 | 0.29 |
| (1,94) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:68:LEU:HA | 1 | 0.29 |
| (1,94) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:68:LEU:HA | 9 | 0.29 |
| (1,94) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:68:LEU:HA | 15 | 0.29 |
| (1,82) | 1:A:86:THR:H | 1:A:84:HIS:HB2 | 6 | 0.29 |
| (1,80) | 1:A:86:THR:H | 1:A:85:PRO:HD2 | 15 | 0.29 |
| (1,73) | 1:A:65:ARG:H | 1:A:64:LEU:H | 11 | 0.29 |
| (1,566) | 1:A:98:LEU:H | 1:A:98:LEU:HB3 | 6 | 0.29 |
| (1,566) | 1:A:98:LEU:H | 1:A:98:LEU:HB3 | 7 | 0.29 |
| (1,561) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:21:GLN:HB2 | 10 | 0.29 |
| (1,56) | 1:A:60:THR:H | 1:A:59:LEU:HB2 | 1 | 0.29 |
| (1,56) | 1:A:60:THR:H | 1:A:59:LEU:HB2 | 5 | 0.29 |
| (1,56) | 1:A:60:THR:H | 1:A:59:LEU:HB2 | 6 | 0.29 |
| (1,56) | 1:A:60:THR:H | 1:A:59:LEU:HB2 | 15 | 0.29 |
| (1,552) | 1:A:12:ARG:H | 1:A:12:ARG:HB3 | 4 | 0.29 |
| (1,552) | 1:A:12:ARG:H | 1:A:12:ARG:HB3 | 5 | 0.29 |
| (1,552) | 1:A:12:ARG:H | 1:A:12:ARG:HB3 | 7 | 0.29 |
| (1,552) | 1:A:12:ARG:H | 1:A:12:ARG:HB3 | 13 | 0.29 |
| (1,552) | 1:A:12:ARG:H | 1:A:12:ARG:HB3 | 14 | 0.29 |
| (1,528) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HB3 | 1 | 0.29 |
| (1,500) | 1:A:100:GLN:H | 1:A:100:GLN:HB3 | 4 | 0.29 |
| (1,493) | 1:A:25:LEU:H | 1:A:26:ALA:H | 10 | 0.29 |
| (1,445) | 1:A:3:ALA:H | 1:A:3:ALA:HA | 9 | 0.29 |
| (1,445) | 1:A:3:ALA:H | 1:A:3:ALA:HA | 12 | 0.29 |
| (1,445) | 1:A:3:ALA:H | 1:A:3:ALA:HA | 13 | 0.29 |
| (1,44) | 1:A:79:THR:H | 1:A:78:PRO:HA | 6 | 0.29 |
| (1,44) | 1:A:79:THR:H | 1:A:78:PRO:HA | 10 | 0.29 |
| (1,390) | 1:A:65:ARG:HE | 1:A:65:ARG:HD3 | 16 | 0.29 |
| (1,342) | 1:A:66:ASN:H | 1:A:66:ASN:HB2 | 5 | 0.29 |
| (1,342) | 1:A:66:ASN:H | 1:A:66:ASN:HB2 | 8 | 0.29 |
| (1,342) | 1:A:66:ASN:H | 1:A:66:ASN:HB2 | 12 | 0.29 |
| (1,312) | 1:A:46:SER:H | 1:A:45:ILE:HG12 | 2 | 0.29 |
| (1,312) | 1:A:46:SER:H | 1:A:45:ILE:HG12 | 8 | 0.29 |
| (1,312) | 1:A:46:SER:H | 1:A:45:ILE:HG12 | 12 | 0.29 |
| (1,312) | 1:A:46:SER:H | 1:A:45:ILE:HG12 | 14 | 0.29 |
| (1,312) | 1:A:46:SER:H | 1:A:45:ILE:HG12 | 15 | 0.29 |
| (1,304) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HB2 | 10 | 0.29 |
| (1,292) | 1:A:37:LEU:H | 1:A:36:VAL:HG11 | 8 | 0.29 |
| (1,292) | 1:A:37:LEU:H | 1:A:36:VAL:HG12 | 8 | 0.29 |
| (1,292) | 1:A:37:LEU:H | 1:A:36:VAL:HG13 | 8 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 14 | 0.29 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 14 | 0.29 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 14 | 0.29 |
| (1,286) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HB2 | 1 | 0.29 |
| (1,258) | 1:A:72:THR:H | 1:A:71:ASN:HB2 | 12 | 0.29 |
| (1,258) | 1:A:72:THR:H | 1:A:71:ASN:HB2 | 13 | 0.29 |
| (1,239) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG13 | 12 | 0.29 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG21 | 4 | 0.29 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG22 | 4 | 0.29 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG23 | 4 | 0.29 |
| (1,233) | 1:A:102:HIS:H | 1:A:102:HIS:HB2 | 1 | 0.29 |
| (1,213) | 1:A:38:GLY:H | 1:A:38:GLY:HA2 | 2 | 0.29 |
| (1,213) | 1:A:38:GLY:H | 1:A:38:GLY:HA2 | 4 | 0.29 |
| (1,213) | 1:A:38:GLY:H | 1:A:38:GLY:HA2 | 5 | 0.29 |
| (1,213) | 1:A:38:GLY:H | 1:A:38:GLY:HA2 | 8 | 0.29 |
| (1,17) | 1:A:100:GLN:H | 1:A:99:THR:H | 1 | 0.29 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB1 | 8 | 0.29 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB2 | 8 | 0.29 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB3 | 8 | 0.29 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB1 | 9 | 0.29 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB2 | 9 | 0.29 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB3 | 9 | 0.29 |
| (2,976) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:50:ALA:H | 13 | 0.28 |
| (2,904) | 1:A:42:PRO:HG3 | 1:A:42:PRO:HD3 | 2 | 0.28 |
| (2,904) | 1:A:42:PRO:HG3 | 1:A:42:PRO:HD3 | 3 | 0.28 |
| (2,904) | 1:A:42:PRO:HG3 | 1:A:42:PRO:HD3 | 8 | 0.28 |
| (2,904) | 1:A:42:PRO:HG3 | 1:A:42:PRO:HD3 | 9 | 0.28 |
| (2,904) | 1:A:42:PRO:HG3 | 1:A:42:PRO:HD3 | 15 | 0.28 |
| (2,896) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:42:PRO:HD2 | 13 | 0.28 |
| (2,896) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:42:PRO:HD2 | 13 | 0.28 |
| (2,896) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:42:PRO:HD2 | 13 | 0.28 |
| (2,889) | 1:A:42:PRO:HD2 | 1:A:41:THR:HA | 3 | 0.28 |
| (2,876) | 1:A:42:PRO:HB2 | 1:A:43:GLU:H | 15 | 0.28 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:74:LEU:H | 4 | 0.28 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:74:LEU:H | 4 | 0.28 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:74:LEU:H | 4 | 0.28 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG21 | 12 | 0.28 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG22 | 12 | 0.28 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG23 | 12 | 0.28 |
| (2,832) | 1:A:37:LEU:HB2 | 1:A:37:LEU:H | 2 | 0.28 |
| (2,832) | 1:A:37:LEU:HB2 | 1:A:37:LEU:H | 6 | 0.28 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:64:LEU:H | 13 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:64:LEU:H | 13 | 0.28 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:64:LEU:H | 13 | 0.28 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:33:THR:HA | 9 | 0.28 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:33:THR:HA | 9 | 0.28 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:33:THR:HA | 9 | 0.28 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG21 | 14 | 0.28 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG22 | 14 | 0.28 |
| (2,816) | 1:A:36:VAL:HB | 1:A:60:THR:HG23 | 14 | 0.28 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB1 | 1 | 0.28 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB2 | 1 | 0.28 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB3 | 1 | 0.28 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB1 | 15 | 0.28 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB2 | 15 | 0.28 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB3 | 15 | 0.28 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:34:ALA:HA | 13 | 0.28 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:34:ALA:HA | 13 | 0.28 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:34:ALA:HA | 13 | 0.28 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HA | 1 | 0.28 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HA | 1 | 0.28 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HA | 1 | 0.28 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HA | 12 | 0.28 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HA | 12 | 0.28 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HA | 12 | 0.28 |
| (2,641) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:54:LEU:HA | 2 | 0.28 |
| (2,624) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 1 | 0.28 |
| (2,624) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 2 | 0.28 |
| (2,624) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 3 | 0.28 |
| (2,624) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 4 | 0.28 |
| (2,624) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 9 | 0.28 |
| (2,624) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 10 | 0.28 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:28:LEU:H | 9 | 0.28 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:28:LEU:H | 9 | 0.28 |
| (2,580) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 9 | 0.28 |
| (2,571) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:ALA:H | 3 | 0.28 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:71:ASN:HB3 | 6 | 0.28 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:71:ASN:HB3 | 6 | 0.28 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:71:ASN:HB3 | 6 | 0.28 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:71:ASN:HB3 | 15 | 0.28 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:71:ASN:HB3 | 15 | 0.28 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:71:ASN:HB3 | 15 | 0.28 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:29:VAL:HA | 1 | 0.28 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:29:VAL:HA | 1 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:29:VAL:HA | 1 | 0.28 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:29:VAL:HA | 4 | 0.28 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:29:VAL:HA | 4 | 0.28 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:29:VAL:HA | 4 | 0.28 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:29:VAL:HA | 6 | 0.28 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:29:VAL:HA | 6 | 0.28 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:29:VAL:HA | 6 | 0.28 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:29:VAL:HA | 7 | 0.28 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:29:VAL:HA | 7 | 0.28 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:29:VAL:HA | 7 | 0.28 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD11 | 10 | 0.28 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD12 | 10 | 0.28 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD13 | 10 | 0.28 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD11 | 11 | 0.28 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD12 | 11 | 0.28 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD13 | 11 | 0.28 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD11 | 13 | 0.28 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD12 | 13 | 0.28 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD13 | 13 | 0.28 |
| (2,511) | 1:A:23:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HA | 9 | 0.28 |
| (2,506) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:24:THR:H | 15 | 0.28 |
| (2,492) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:19:GLN:HA | 12 | 0.28 |
| (2,473) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HD11 | 3 | 0.28 |
| (2,473) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HD12 | 3 | 0.28 |
| (2,473) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HD13 | 3 | 0.28 |
| (2,473) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HD11 | 10 | 0.28 |
| (2,473) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HD12 | 10 | 0.28 |
| (2,473) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HD13 | 10 | 0.28 |
| (2,471) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HB3 | 13 | 0.28 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:51:PHE:HD1 | 3 | 0.28 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:51:PHE:HD2 | 3 | 0.28 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:51:PHE:HD1 | 3 | 0.28 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:51:PHE:HD2 | 3 | 0.28 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:51:PHE:HD1 | 3 | 0.28 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:51:PHE:HD2 | 3 | 0.28 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:51:PHE:HD1 | 11 | 0.28 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:51:PHE:HD2 | 11 | 0.28 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:51:PHE:HD1 | 11 | 0.28 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:51:PHE:HD2 | 11 | 0.28 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:51:PHE:HD1 | 11 | 0.28 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:51:PHE:HD2 | 11 | 0.28 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:51:PHE:HD1 | 13 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:51:PHE:HD2 | 13 | 0.28 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:51:PHE:HD1 | 13 | 0.28 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:51:PHE:HD2 | 13 | 0.28 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:51:PHE:HD1 | 13 | 0.28 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:51:PHE:HD2 | 13 | 0.28 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:51:PHE:HD1 | 15 | 0.28 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:51:PHE:HD2 | 15 | 0.28 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:51:PHE:HD1 | 15 | 0.28 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:51:PHE:HD2 | 15 | 0.28 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:51:PHE:HD1 | 15 | 0.28 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:51:PHE:HD2 | 15 | 0.28 |
| (2,447) | 1:A:20:GLN:HB3 | 1:A:20:GLN:HA | 9 | 0.28 |
| (2,447) | 1:A:20:GLN:HB3 | 1:A:20:GLN:HA | 10 | 0.28 |
| (2,403) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:20:GLN:H | 8 | 0.28 |
| (2,403) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:20:GLN:H | 12 | 0.28 |
| (2,388) | 1:A:45:ILE:HA | 1:A:46:SER:H | 15 | 0.28 |
| (2,342) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:15:GLY:H | 12 | 0.28 |
| (2,34) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:51:PHE:HZ | 7 | 0.28 |
| (2,34) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:51:PHE:HZ | 11 | 0.28 |
| (2,269) | 1:A:12:ARG:HG2 | 1:A:13:LEU:H | 5 | 0.28 |
| (2,262) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:12:ARG:H | 10 | 0.28 |
| (2,204) | 1:A:9:LEU:HB3 | 1:A:10:ALA:H | 9 | 0.28 |
| (2,20) | 1:A:102:HIS:HB2 | 1:A:102:HIS:HD2 | 12 | 0.28 |
| (2,1915) | 1:A:91:THR:HB | 1:A:91:THR:H | 4 | 0.28 |
| (2,1915) | 1:A:91:THR:HB | 1:A:91:THR:H | 11 | 0.28 |
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HB3 | 2 | 0.28 |
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HB3 | 2 | 0.28 |
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HB3 | 2 | 0.28 |
| (2,1888) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:13:LEU:H | 4 | 0.28 |
| (2,1888) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:13:LEU:H | 14 | 0.28 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:H | 7 | 0.28 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:H | 7 | 0.28 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:H | 7 | 0.28 |
| (2,1848) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:22:GLN:H | 12 | 0.28 |
| (2,1801) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:96:THR:HG21 | 3 | 0.28 |
| (2,1801) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:96:THR:HG22 | 3 | 0.28 |
| (2,1801) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:96:THR:HG23 | 3 | 0.28 |
| (2,18) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:95:HIS:HD2 | 6 | 0.28 |
| (2,18) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:95:HIS:HD2 | 12 | 0.28 |
| (2,1792) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:98:LEU:HB3 | 2 | 0.28 |
| (2,1792) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:98:LEU:HB3 | 2 | 0.28 |
| (2,1792) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:98:LEU:HB3 | 2 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,1771) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:98:LEU:H | 1 | 0.28 |
| (2,1771) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:98:LEU:H | 12 | 0.28 |
| (2,1729) | 1:A:93:HIS:HA | 1:A:90:LEU:HA | 2 | 0.28 |
| (2,1722) | 1:A:92:GLN:HG3 | 1:A:92:GLN:H | 4 | 0.28 |
| (2,1722) | 1:A:92:GLN:HG3 | 1:A:92:GLN:H | 6 | 0.28 |
| (2,1722) | 1:A:92:GLN:HG3 | 1:A:92:GLN:H | 8 | 0.28 |
| (2,1720) | 1:A:92:GLN:HG3 | 1:A:89:ALA:HA | 7 | 0.28 |
| (2,1716) | 1:A:92:GLN:HG2 | 1:A:91:THR:HB | 9 | 0.28 |
| (2,17) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:95:HIS:HB2 | 6 | 0.28 |
| (2,17) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:95:HIS:HB2 | 16 | 0.28 |
| (2,1688) | 1:A:91:THR:HB | 1:A:91:THR:HA | 1 | 0.28 |
| (2,1688) | 1:A:91:THR:HB | 1:A:91:THR:HA | 5 | 0.28 |
| (2,1688) | 1:A:91:THR:HB | 1:A:91:THR:HA | 7 | 0.28 |
| (2,1688) | 1:A:91:THR:HB | 1:A:91:THR:HA | 8 | 0.28 |
| (2,1688) | 1:A:91:THR:HB | 1:A:91:THR:HA | 9 | 0.28 |
| (2,1688) | 1:A:91:THR:HB | 1:A:91:THR:HA | 16 | 0.28 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HE1 | 14 | 0.28 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HE2 | 14 | 0.28 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HE1 | 14 | 0.28 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HE2 | 14 | 0.28 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HE1 | 14 | 0.28 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HE2 | 14 | 0.28 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:85:PRO:HD2 | 2 | 0.28 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:85:PRO:HD2 | 2 | 0.28 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:85:PRO:HD2 | 2 | 0.28 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:85:PRO:HD2 | 8 | 0.28 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:85:PRO:HD2 | 8 | 0.28 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:85:PRO:HD2 | 8 | 0.28 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:85:PRO:HD2 | 9 | 0.28 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:85:PRO:HD2 | 9 | 0.28 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:85:PRO:HD2 | 9 | 0.28 |
| (2,1601) | 1:A:86:THR:HB | 1:A:87:PRO:HD2 | 3 | 0.28 |
| (2,1595) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HB3 | 1 | 0.28 |
| (2,1595) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HB3 | 2 | 0.28 |
| (2,1595) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HB3 | 4 | 0.28 |
| (2,1595) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HB3 | 5 | 0.28 |
| (2,1595) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HB3 | 8 | 0.28 |
| (2,1595) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HB3 | 9 | 0.28 |
| (2,1595) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HB3 | 10 | 0.28 |
| (2,1595) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HB3 | 11 | 0.28 |
| (2,1595) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HB3 | 12 | 0.28 |
| (2,1595) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HB3 | 14 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1595) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HB3 | 15 | 0.28 |
| (2,1589) | 1:A:85:PRO:HB3 | 1:A:85:PRO:HA | 3 | 0.28 |
| (2,1589) | 1:A:85:PRO:HB3 | 1:A:85:PRO:HA | 4 | 0.28 |
| (2,1589) | 1:A:85:PRO:HB3 | 1:A:85:PRO:HA | 6 | 0.28 |
| (2,1589) | 1:A:85:PRO:HB3 | 1:A:85:PRO:HA | 12 | 0.28 |
| (2,1589) | 1:A:85:PRO:HB3 | 1:A:85:PRO:HA | 14 | 0.28 |
| (2,1589) | 1:A:85:PRO:HB3 | 1:A:85:PRO:HA | 15 | 0.28 |
| (2,1586) | 1:A:85:PRO:HG2 | 1:A:85:PRO:HB2 | 2 | 0.28 |
| (2,1586) | 1:A:85:PRO:HG2 | 1:A:85:PRO:HB2 | 4 | 0.28 |
| (2,1586) | 1:A:85:PRO:HG2 | 1:A:85:PRO:HB2 | 5 | 0.28 |
| (2,1586) | 1:A:85:PRO:HG2 | 1:A:85:PRO:HB2 | 6 | 0.28 |
| (2,1586) | 1:A:85:PRO:HG2 | 1:A:85:PRO:HB2 | 7 | 0.28 |
| (2,1586) | 1:A:85:PRO:HG2 | 1:A:85:PRO:HB2 | 8 | 0.28 |
| (2,1586) | 1:A:85:PRO:HG2 | 1:A:85:PRO:HB2 | 9 | 0.28 |
| (2,1586) | 1:A:85:PRO:HG2 | 1:A:85:PRO:HB2 | 11 | 0.28 |
| (2,1586) | 1:A:85:PRO:HG2 | 1:A:85:PRO:HB2 | 12 | 0.28 |
| (2,1586) | 1:A:85:PRO:HG2 | 1:A:85:PRO:HB2 | 13 | 0.28 |
| (2,1586) | 1:A:85:PRO:HG2 | 1:A:85:PRO:HB2 | 14 | 0.28 |
| (2,1586) | 1:A:85:PRO:HG2 | 1:A:85:PRO:HB2 | 15 | 0.28 |
| (2,1586) | 1:A:85:PRO:HG2 | 1:A:85:PRO:HB2 | 16 | 0.28 |
| (2,1567) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:83:ASP:H | 4 | 0.28 |
| (2,1567) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:83:ASP:H | 9 | 0.28 |
| (2,1543) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:51:PHE:HD1 | 11 | 0.28 |
| (2,1543) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:51:PHE:HD2 | 11 | 0.28 |
| (2,1540) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:95:HIS:HA | 2 | 0.28 |
| (2,1534) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD21 | 2 | 0.28 |
| (2,1534) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD22 | 2 | 0.28 |
| (2,1534) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD23 | 2 | 0.28 |
| (2,1534) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD21 | 12 | 0.28 |
| (2,1534) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD22 | 12 | 0.28 |
| (2,1534) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD23 | 12 | 0.28 |
| (2,1534) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD21 | 14 | 0.28 |
| (2,1534) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD22 | 14 | 0.28 |
| (2,1534) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD23 | 14 | 0.28 |
| (2,1534) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD21 | 15 | 0.28 |
| (2,1534) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD22 | 15 | 0.28 |
| (2,1534) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD23 | 15 | 0.28 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HB | 4 | 0.28 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HB | 4 | 0.28 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HB | 4 | 0.28 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD11 | 12 | 0.28 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD12 | 12 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD13 | 12 | 0.28 |
| (2,1318) | 1:A:68:LEU:HB3 | 1:A:68:LEU:HA | 3 | 0.28 |
| (2,1318) | 1:A:68:LEU:HB3 | 1:A:68:LEU:HA | 7 | 0.28 |
| (2,1301) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:65:ARG:H | 14 | 0.28 |
| (2,1293) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:65:ARG:H | 14 | 0.28 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 14 | 0.28 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 14 | 0.28 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 14 | 0.28 |
| (2,1272) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 2 | 0.28 |
| (2,1272) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 2 | 0.28 |
| (2,1272) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 2 | 0.28 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 1 | 0.28 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 1 | 0.28 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 1 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HB2 | 1 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HB2 | 1 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HB2 | 1 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HB2 | 2 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HB2 | 2 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HB2 | 2 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HB2 | 3 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HB2 | 3 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HB2 | 3 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HB2 | 4 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HB2 | 4 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HB2 | 4 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HB2 | 5 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HB2 | 5 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HB2 | 5 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HB2 | 6 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HB2 | 6 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HB2 | 6 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HB2 | 7 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HB2 | 7 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HB2 | 7 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HB2 | 8 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HB2 | 8 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HB2 | 8 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HB2 | 9 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HB2 | 9 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HB2 | 9 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HB2 | 10 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HB2 | 10 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HB2 | 10 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HB2 | 11 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HB2 | 11 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HB2 | 11 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HB2 | 12 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HB2 | 12 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HB2 | 12 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HB2 | 13 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HB2 | 13 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HB2 | 13 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HB2 | 14 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HB2 | 14 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HB2 | 14 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HB2 | 15 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HB2 | 15 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HB2 | 15 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HB2 | 16 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HB2 | 16 | 0.28 |
| (2,1256) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HB2 | 16 | 0.28 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 5 | 0.28 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 5 | 0.28 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 5 | 0.28 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 6 | 0.28 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 6 | 0.28 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 6 | 0.28 |
| (2,1228) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:63:GLU:H | 1 | 0.28 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG11 | 4 | 0.28 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG12 | 4 | 0.28 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG13 | 4 | 0.28 |
| (2,1204) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:59:LEU:HA | 11 | 0.28 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB1 | 16 | 0.28 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB2 | 16 | 0.28 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB3 | 16 | 0.28 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB1 | 16 | 0.28 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB2 | 16 | 0.28 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB3 | 16 | 0.28 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB1 | 16 | 0.28 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB2 | 16 | 0.28 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB3 | 16 | 0.28 |
| (2,114) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:7:THR:H | 3 | 0.28 |
| (2,114) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:7:THR:H | 3 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,114) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:7:THR:H | 3 | 0.28 |
| (2,115) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD11 | 6 | 0.28 |
| (2,115) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD12 | 6 | 0.28 |
| (2,115) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD13 | 6 | 0.28 |
| (2,115) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD11 | 6 | 0.28 |
| (2,115) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD12 | 6 | 0.28 |
| (2,115) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD13 | 6 | 0.28 |
| (2,115) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD11 | 6 | 0.28 |
| (2,115) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD12 | 6 | 0.28 |
| (2,115) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD13 | 6 | 0.28 |
| (2,1053) | 1:A:52:LYS:HG2 | 1:A:52:LYS:HA | 13 | 0.28 |
| (2,1047) | 1:A:52:LYS:HB2 | 1:A:53:ASP:H | 2 | 0.28 |
| (2,1047) | 1:A:52:LYS:HB2 | 1:A:53:ASP:H | 4 | 0.28 |
| (2,1047) | 1:A:52:LYS:HB2 | 1:A:53:ASP:H | 14 | 0.28 |
| (2,1044) | 1:A:52:LYS:HB2 | 1:A:52:LYS:HE2 | 5 | 0.28 |
| (2,1030) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG13 | 6 | 0.28 |
| (2,1030) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG13 | 10 | 0.28 |
| (2,1030) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG13 | 12 | 0.28 |
| (2,1023) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HB3 | 2 | 0.28 |
| (2,1023) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HB3 | 4 | 0.28 |
| (2,1023) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HB3 | 5 | 0.28 |
| (2,1023) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HB3 | 6 | 0.28 |
| (2,1023) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HB3 | 7 | 0.28 |
| (2,1023) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HB3 | 8 | 0.28 |
| (2,1023) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HB3 | 9 | 0.28 |
| (2,1023) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HB3 | 12 | 0.28 |
| (2,1023) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HB3 | 14 | 0.28 |
| (1,94) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:68:LEU:HA | 5 | 0.28 |
| (1,94) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:68:LEU:HA | 14 | 0.28 |
| (1,94) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:68:LEU:HA | 16 | 0.28 |
| (1,80) | 1:A:86:THR:H | 1:A:85:PRO:HD2 | 12 | 0.28 |
| (1,80) | 1:A:86:THR:H | 1:A:85:PRO:HD2 | 13 | 0.28 |
| (1,7) | 1:A:61:ALA:H | 1:A:57:ASP:H | 16 | 0.28 |
| (1,590) | 1:A:96:THR:H | 1:A:97:ARG:H | 8 | 0.28 |
| (1,566) | 1:A:98:LEU:H | 1:A:98:LEU:HB3 | 1 | 0.28 |
| (1,566) | 1:A:98:LEU:H | 1:A:98:LEU:HB3 | 16 | 0.28 |
| (1,561) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:21:GLN:HB2 | 9 | 0.28 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 16 | 0.28 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 16 | 0.28 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 16 | 0.28 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB1 | 9 | 0.28 |
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB2 | 9 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,505) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:26:ALA:HB3 | 9 | 0.28 |
| (1,493) | 1:A:25:LEU:H | 1:A:26:ALA:H | 1 | 0.28 |
| (1,493) | 1:A:25:LEU:H | 1:A:26:ALA:H | 3 | 0.28 |
| (1,493) | 1:A:25:LEU:H | 1:A:26:ALA:H | 13 | 0.28 |
| (1,493) | 1:A:25:LEU:H | 1:A:26:ALA:H | 15 | 0.28 |
| (1,445) | 1:A:3:ALA:H | 1:A:3:ALA:HA | 3 | 0.28 |
| (1,445) | 1:A:3:ALA:H | 1:A:3:ALA:HA | 11 | 0.28 |
| (1,390) | 1:A:65:ARG:HE | 1:A:65:ARG:HD3 | 4 | 0.28 |
| (1,376) | 1:A:58:SER:H | 1:A:58:SER:HB3 | 4 | 0.28 |
| (1,342) | 1:A:66:ASN:H | 1:A:66:ASN:HB2 | 14 | 0.28 |
| (1,342) | 1:A:66:ASN:H | 1:A:66:ASN:HB2 | 15 | 0.28 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD21 | 4 | 0.28 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD22 | 4 | 0.28 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD23 | 4 | 0.28 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD21 | 5 | 0.28 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD22 | 5 | 0.28 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD23 | 5 | 0.28 |
| (1,312) | 1:A:46:SER:H | 1:A:45:ILE:HG12 | 3 | 0.28 |
| (1,312) | 1:A:46:SER:H | 1:A:45:ILE:HG12 | 5 | 0.28 |
| (1,309) | 1:A:56:ILE:H | 1:A:51:PHE:HB2 | 6 | 0.28 |
| (1,304) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HB2 | 11 | 0.28 |
| (1,25) | 1:A:83:ASP:H | 1:A:84:HIS:H | 1 | 0.28 |
| (1,25) | 1:A:83:ASP:H | 1:A:84:HIS:H | 16 | 0.28 |
| (1,249) | 1:A:99:THR:H | 1:A:98:LEU:HB2 | 16 | 0.28 |
| (1,239) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG13 | 14 | 0.28 |
| (1,239) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG13 | 16 | 0.28 |
| (1,23) | 1:A:44:SER:H | 1:A:45:ILE:H | 9 | 0.28 |
| (1,145) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:50:ALA:HA | 2 | 0.28 |
| (1,145) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:50:ALA:HA | 4 | 0.28 |
| (1,145) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:50:ALA:HA | 6 | 0.28 |
| (1,145) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:50:ALA:HA | 7 | 0.28 |
| (1,145) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:50:ALA:HA | 8 | 0.28 |
| (1,145) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:50:ALA:HA | 11 | 0.28 |
| (1,145) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:50:ALA:HA | 12 | 0.28 |
| (1,145) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:50:ALA:HA | 13 | 0.28 |
| (1,145) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:50:ALA:HA | 14 | 0.28 |
| (1,145) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:50:ALA:HA | 15 | 0.28 |
| (2,997) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HG | 5 | 0.27 |
| (2,997) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HG | 5 | 0.27 |
| (2,997) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HG | 5 | 0.27 |
| (2,976) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:50:ALA:H | 4 | 0.27 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB1 | 1:A:47:PRO:HA | 8 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB2 | 1:A:47:PRO:HA | 8 | 0.27 |
| (2,950) | 1:A:48:ALA:HB3 | 1:A:47:PRO:HA | 8 | 0.27 |
| (2,904) | 1:A:42:PRO:HG3 | 1:A:42:PRO:HD3 | 10 | 0.27 |
| (2,904) | 1:A:42:PRO:HG3 | 1:A:42:PRO:HD3 | 11 | 0.27 |
| (2,904) | 1:A:42:PRO:HG3 | 1:A:42:PRO:HD3 | 14 | 0.27 |
| (2,897) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:44:SER:HB3 | 9 | 0.27 |
| (2,897) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:44:SER:HB3 | 9 | 0.27 |
| (2,897) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:44:SER:HB3 | 9 | 0.27 |
| (2,896) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:42:PRO:HD2 | 16 | 0.27 |
| (2,896) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:42:PRO:HD2 | 16 | 0.27 |
| (2,896) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:42:PRO:HD2 | 16 | 0.27 |
| (2,870) | 1:A:42:PRO:HG2 | 1:A:42:PRO:HA | 8 | 0.27 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:74:LEU:H | 3 | 0.27 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:74:LEU:H | 3 | 0.27 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:74:LEU:H | 3 | 0.27 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:74:LEU:H | 13 | 0.27 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:74:LEU:H | 13 | 0.27 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:74:LEU:H | 13 | 0.27 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:36:VAL:H | 3 | 0.27 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:36:VAL:H | 3 | 0.27 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:36:VAL:H | 3 | 0.27 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG21 | 15 | 0.27 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG22 | 15 | 0.27 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG23 | 15 | 0.27 |
| (2,832) | 1:A:37:LEU:HB2 | 1:A:37:LEU:H | 5 | 0.27 |
| (2,831) | 1:A:37:LEU:HA | 1:A:37:LEU:HB3 | 10 | 0.27 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:33:THR:HA | 3 | 0.27 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:33:THR:HA | 3 | 0.27 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:33:THR:HA | 3 | 0.27 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:33:THR:HA | 15 | 0.27 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:33:THR:HA | 15 | 0.27 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:33:THR:HA | 15 | 0.27 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG21 | 6 | 0.27 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG22 | 6 | 0.27 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG23 | 6 | 0.27 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG21 | 14 | 0.27 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG22 | 14 | 0.27 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG23 | 14 | 0.27 |
| (2,785) | 1:A:27:THR:HB | 1:A:23:GLN:HB2 | 15 | 0.27 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB1 | 2 | 0.27 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB2 | 2 | 0.27 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB3 | 2 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB1 | 8 | 0.27 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB2 | 8 | 0.27 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB3 | 8 | 0.27 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB1 | 10 | 0.27 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB2 | 10 | 0.27 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB3 | 10 | 0.27 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB1 | 14 | 0.27 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB2 | 14 | 0.27 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB3 | 14 | 0.27 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:34:ALA:HA | 1 | 0.27 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:34:ALA:HA | 1 | 0.27 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:34:ALA:HA | 1 | 0.27 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:34:ALA:HA | 14 | 0.27 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:34:ALA:HA | 14 | 0.27 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:34:ALA:HA | 14 | 0.27 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HA | 14 | 0.27 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HA | 14 | 0.27 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HA | 14 | 0.27 |
| (2,7) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:71:ASN:HA | 1 | 0.27 |
| (2,7) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:71:ASN:HA | 1 | 0.27 |
| (2,7) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:71:ASN:HA | 1 | 0.27 |
| (2,641) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:54:LEU:HA | 13 | 0.27 |
| (2,624) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 5 | 0.27 |
| (2,624) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 6 | 0.27 |
| (2,624) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 12 | 0.27 |
| (2,624) | 1:A:28:LEU:HB3 | 1:A:28:LEU:H | 14 | 0.27 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD11 | 11 | 0.27 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD12 | 11 | 0.27 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD13 | 11 | 0.27 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD11 | 11 | 0.27 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD12 | 11 | 0.27 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD13 | 11 | 0.27 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD11 | 11 | 0.27 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD12 | 11 | 0.27 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD13 | 11 | 0.27 |
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG21 | 16 | 0.27 |
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG22 | 16 | 0.27 |
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG23 | 16 | 0.27 |
| (2,571) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:ALA:H | 5 | 0.27 |
| (2,571) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:ALA:H | 9 | 0.27 |
| (2,571) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:ALA:H | 15 | 0.27 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG21 | 15 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG22 | 15 | 0.27 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG23 | 15 | 0.27 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG21 | 15 | 0.27 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG22 | 15 | 0.27 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG23 | 15 | 0.27 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG21 | 15 | 0.27 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG22 | 15 | 0.27 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG23 | 15 | 0.27 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:29:VAL:HA | 3 | 0.27 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:29:VAL:HA | 3 | 0.27 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:29:VAL:HA | 3 | 0.27 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:29:VAL:HA | 5 | 0.27 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:29:VAL:HA | 5 | 0.27 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:29:VAL:HA | 5 | 0.27 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:29:VAL:HA | 8 | 0.27 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:29:VAL:HA | 8 | 0.27 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:29:VAL:HA | 8 | 0.27 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:29:VAL:HA | 13 | 0.27 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:29:VAL:HA | 13 | 0.27 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:29:VAL:HA | 13 | 0.27 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:64:LEU:HD11 | 7 | 0.27 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:64:LEU:HD12 | 7 | 0.27 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:64:LEU:HD13 | 7 | 0.27 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:64:LEU:HD11 | 7 | 0.27 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:64:LEU:HD12 | 7 | 0.27 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:64:LEU:HD13 | 7 | 0.27 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD11 | 5 | 0.27 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD12 | 5 | 0.27 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD13 | 5 | 0.27 |
| (2,533) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:25:LEU:HB2 | 8 | 0.27 |
| (2,511) | 1:A:23:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HA | 6 | 0.27 |
| (2,511) | 1:A:23:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HA | 15 | 0.27 |
| (2,511) | 1:A:23:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HA | 16 | 0.27 |
| (2,506) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:24:THR:H | 1 | 0.27 |
| (2,506) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:24:THR:H | 3 | 0.27 |
| (2,506) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:24:THR:H | 10 | 0.27 |
| (2,477) | 1:A:25:LEU:HG | 1:A:25:LEU:H | 5 | 0.27 |
| (2,473) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HD11 | 2 | 0.27 |
| (2,473) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HD12 | 2 | 0.27 |
| (2,473) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HD13 | 2 | 0.27 |
| (2,473) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HD11 | 4 | 0.27 |
| (2,473) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HD12 | 4 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,473) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HD13 | 4 | 0.27 |
| (2,471) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HB3 | 12 | 0.27 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:51:PHE:HD1 | 4 | 0.27 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:51:PHE:HD2 | 4 | 0.27 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:51:PHE:HD1 | 4 | 0.27 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:51:PHE:HD2 | 4 | 0.27 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:51:PHE:HD1 | 4 | 0.27 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:51:PHE:HD2 | 4 | 0.27 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:51:PHE:HD1 | 5 | 0.27 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:51:PHE:HD2 | 5 | 0.27 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:51:PHE:HD1 | 5 | 0.27 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:51:PHE:HD2 | 5 | 0.27 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:51:PHE:HD1 | 5 | 0.27 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:51:PHE:HD2 | 5 | 0.27 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:51:PHE:HD1 | 12 | 0.27 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:51:PHE:HD2 | 12 | 0.27 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:51:PHE:HD1 | 12 | 0.27 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:51:PHE:HD2 | 12 | 0.27 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:51:PHE:HD1 | 12 | 0.27 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:51:PHE:HD2 | 12 | 0.27 |
| (2,458) | 1:A:20:GLN:HB3 | 1:A:16:LEU:HB3 | 2 | 0.27 |
| (2,447) | 1:A:20:GLN:HB3 | 1:A:20:GLN:HA | 1 | 0.27 |
| (2,447) | 1:A:20:GLN:HB3 | 1:A:20:GLN:HA | 3 | 0.27 |
| (2,433) | 1:A:21:GLN:HG2 | 1:A:21:GLN:HA | 14 | 0.27 |
| (2,418) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 1 | 0.27 |
| (2,402) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:23:GLN:H | 6 | 0.27 |
| (2,388) | 1:A:45:ILE:HA | 1:A:46:SER:H | 1 | 0.27 |
| (2,36) | 1:A:82:PHE:HZ | 1:A:58:SER:HA | 1 | 0.27 |
| (2,337) | 1:A:11:ALA:HA | 1:A:14:ASN:HB2 | 1 | 0.27 |
| (2,31) | 1:A:39:HIS:HD2 | 1:A:37:LEU:HB3 | 7 | 0.27 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG21 | 9 | 0.27 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG22 | 9 | 0.27 |
| (2,29) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:35:THR:HG23 | 9 | 0.27 |
| (2,262) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:12:ARG:H | 8 | 0.27 |
| (2,262) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:12:ARG:H | 11 | 0.27 |
| (2,262) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:12:ARG:H | 12 | 0.27 |
| (2,22) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:40:HIS:HB2 | 9 | 0.27 |
| (2,201) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HB3 | 1 | 0.27 |
| (2,1915) | 1:A:91:THR:HB | 1:A:91:THR:H | 3 | 0.27 |
| (2,1915) | 1:A:91:THR:HB | 1:A:91:THR:H | 6 | 0.27 |
| (2,1915) | 1:A:91:THR:HB | 1:A:91:THR:H | 7 | 0.27 |
| (2,1915) | 1:A:91:THR:HB | 1:A:91:THR:H | 12 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HB3 | 15 | 0.27 |
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HB3 | 15 | 0.27 |
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HB3 | 15 | 0.27 |
| (2,1885) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:13:LEU:HA | 14 | 0.27 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:99:THR:H | 2 | 0.27 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:99:THR:H | 2 | 0.27 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:99:THR:H | 2 | 0.27 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD21 | 7 | 0.27 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD22 | 7 | 0.27 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD23 | 7 | 0.27 |
| (2,1789) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:H | 3 | 0.27 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG21 | 14 | 0.27 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG22 | 14 | 0.27 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG23 | 14 | 0.27 |
| (2,1729) | 1:A:93:HIS:HA | 1:A:90:LEU:HA | 9 | 0.27 |
| (2,1720) | 1:A:92:GLN:HG3 | 1:A:89:ALA:HA | 8 | 0.27 |
| (2,1714) | 1:A:92:GLN:HG2 | 1:A:92:GLN:HA | 7 | 0.27 |
| (2,17) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:95:HIS:HB2 | 1 | 0.27 |
| (2,17) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:95:HIS:HB2 | 12 | 0.27 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD11 | 13 | 0.27 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD12 | 13 | 0.27 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD13 | 13 | 0.27 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD11 | 13 | 0.27 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD12 | 13 | 0.27 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD13 | 13 | 0.27 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD11 | 13 | 0.27 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD12 | 13 | 0.27 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD13 | 13 | 0.27 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD11 | 16 | 0.27 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD12 | 16 | 0.27 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD13 | 16 | 0.27 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD11 | 16 | 0.27 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD12 | 16 | 0.27 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD13 | 16 | 0.27 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD11 | 16 | 0.27 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD12 | 16 | 0.27 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD13 | 16 | 0.27 |
| (2,1630) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:51:PHE:H | 3 | 0.27 |
| (2,1601) | 1:A:86:THR:HB | 1:A:87:PRO:HD2 | 2 | 0.27 |
| (2,1601) | 1:A:86:THR:HB | 1:A:87:PRO:HD2 | 13 | 0.27 |
| (2,1595) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HB3 | 3 | 0.27 |
| (2,1595) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HB3 | 6 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1595) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HB3 | 7 | 0.27 |
| (2,1595) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HB3 | 13 | 0.27 |
| (2,1595) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HB3 | 16 | 0.27 |
| (2,1586) | 1:A:85:PRO:HG2 | 1:A:85:PRO:HB2 | 3 | 0.27 |
| (2,1569) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:84:HIS:H | 10 | 0.27 |
| (2,1542) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:84:HIS:H | 8 | 0.27 |
| (2,1534) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD21 | 3 | 0.27 |
| (2,1534) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD22 | 3 | 0.27 |
| (2,1534) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD23 | 3 | 0.27 |
| (2,1534) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD21 | 4 | 0.27 |
| (2,1534) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD22 | 4 | 0.27 |
| (2,1534) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD23 | 4 | 0.27 |
| (2,1534) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD21 | 10 | 0.27 |
| (2,1534) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD22 | 10 | 0.27 |
| (2,1534) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD23 | 10 | 0.27 |
| (2,1534) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD21 | 13 | 0.27 |
| (2,1534) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD22 | 13 | 0.27 |
| (2,1534) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD23 | 13 | 0.27 |
| (2,1445) | 1:A:88:HIS:HB2 | 1:A:88:HIS:H | 6 | 0.27 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG21 | 6 | 0.27 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG22 | 6 | 0.27 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG23 | 6 | 0.27 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG21 | 6 | 0.27 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG22 | 6 | 0.27 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG23 | 6 | 0.27 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG21 | 6 | 0.27 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG22 | 6 | 0.27 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG23 | 6 | 0.27 |
| (2,1363) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:93:HIS:H | 1 | 0.27 |
| (2,1363) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:93:HIS:H | 8 | 0.27 |
| (2,1363) | 1:A:93:HIS:HB3 | 1:A:93:HIS:H | 10 | 0.27 |
| (2,1318) | 1:A:68:LEU:HB3 | 1:A:68:LEU:HA | 11 | 0.27 |
| (2,1299) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:67:THR:H | 1 | 0.27 |
| (2,1293) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:65:ARG:H | 1 | 0.27 |
| (2,1293) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:65:ARG:H | 4 | 0.27 |
| (2,1293) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:65:ARG:H | 5 | 0.27 |
| (2,1293) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:65:ARG:H | 6 | 0.27 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 4 | 0.27 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 4 | 0.27 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 4 | 0.27 |
| (2,1281) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:65:ARG:HA | 11 | 0.27 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 14 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 14 | 0.27 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 14 | 0.27 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 1 | 0.27 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 1 | 0.27 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 1 | 0.27 |
| (2,1228) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:63:GLU:H | 6 | 0.27 |
| (2,1228) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:63:GLU:H | 14 | 0.27 |
| (2,1228) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:63:GLU:H | 15 | 0.27 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG11 | 5 | 0.27 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG12 | 5 | 0.27 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG13 | 5 | 0.27 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG11 | 15 | 0.27 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG12 | 15 | 0.27 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG13 | 15 | 0.27 |
| (2,1219) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:60:THR:HG21 | 14 | 0.27 |
| (2,1219) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:60:THR:HG22 | 14 | 0.27 |
| (2,1219) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:60:THR:HG23 | 14 | 0.27 |
| (2,1204) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:59:LEU:HA | 7 | 0.27 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB1 | 1:A:64:LEU:HB3 | 4 | 0.27 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB2 | 1:A:64:LEU:HB3 | 4 | 0.27 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB3 | 1:A:64:LEU:HB3 | 4 | 0.27 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB1 | 1:A:64:LEU:HB3 | 6 | 0.27 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB2 | 1:A:64:LEU:HB3 | 6 | 0.27 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB3 | 1:A:64:LEU:HB3 | 6 | 0.27 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ALA:H | 1 | 0.27 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ALA:H | 1 | 0.27 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ALA:H | 1 | 0.27 |
| (2,1133) | 1:A:58:SER:HB3 | 1:A:59:LEU:HG | 11 | 0.27 |
| (2,1053) | 1:A:52:LYS:HG2 | 1:A:52:LYS:HA | 2 | 0.27 |
| (2,1047) | 1:A:52:LYS:HB2 | 1:A:53:ASP:H | 1 | 0.27 |
| (2,1047) | 1:A:52:LYS:HB2 | 1:A:53:ASP:H | 8 | 0.27 |
| (2,1030) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG13 | 5 | 0.27 |
| (2,1030) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG13 | 14 | 0.27 |
| (2,1029) | 1:A:51:PHE:HB3 | 1:A:52:LYS:HG2 | 7 | 0.27 |
| (2,1023) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HB3 | 1 | 0.27 |
| (2,1023) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HB3 | 3 | 0.27 |
| (2,1023) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HB3 | 10 | 0.27 |
| (2,1023) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HB3 | 13 | 0.27 |
| (2,1023) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HB3 | 15 | 0.27 |
| (1,94) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:68:LEU:HA | 2 | 0.27 |
| (1,94) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:68:LEU:HA | 6 | 0.27 |
| (1,7) | 1:A:61:ALA:H | 1:A:57:ASP:H | 15 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,566) | 1:A:98:LEU:H | 1:A:98:LEU:HB3 | 3 | 0.27 |
| (1,566) | 1:A:98:LEU:H | 1:A:98:LEU:HB3 | 4 | 0.27 |
| (1,561) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:21:GLN:HB2 | 3 | 0.27 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 11 | 0.27 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 11 | 0.27 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 11 | 0.27 |
| (1,56) | 1:A:60:THR:H | 1:A:59:LEU:HB2 | 12 | 0.27 |
| (1,56) | 1:A:60:THR:H | 1:A:59:LEU:HB2 | 13 | 0.27 |
| (1,552) | 1:A:12:ARG:H | 1:A:12:ARG:HB3 | 2 | 0.27 |
| (1,552) | 1:A:12:ARG:H | 1:A:12:ARG:HB3 | 6 | 0.27 |
| (1,500) | 1:A:100:GLN:H | 1:A:100:GLN:HB3 | 8 | 0.27 |
| (1,493) | 1:A:25:LEU:H | 1:A:26:ALA:H | 4 | 0.27 |
| (1,493) | 1:A:25:LEU:H | 1:A:26:ALA:H | 6 | 0.27 |
| (1,493) | 1:A:25:LEU:H | 1:A:26:ALA:H | 7 | 0.27 |
| (1,493) | 1:A:25:LEU:H | 1:A:26:ALA:H | 8 | 0.27 |
| (1,493) | 1:A:25:LEU:H | 1:A:26:ALA:H | 9 | 0.27 |
| (1,493) | 1:A:25:LEU:H | 1:A:26:ALA:H | 11 | 0.27 |
| (1,493) | 1:A:25:LEU:H | 1:A:26:ALA:H | 12 | 0.27 |
| (1,438) | 1:A:75:ASP:H | 1:A:76:LEU:H | 2 | 0.27 |
| (1,40) | 1:A:16:LEU:H | 1:A:15:GLY:H | 12 | 0.27 |
| (1,390) | 1:A:65:ARG:HE | 1:A:65:ARG:HD3 | 3 | 0.27 |
| (1,342) | 1:A:66:ASN:H | 1:A:66:ASN:HB2 | 6 | 0.27 |
| (1,34) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:72:THR:H | 10 | 0.27 |
| (1,331) | 1:A:64:LEU:H | 1:A:64:LEU:HB2 | 11 | 0.27 |
| (1,312) | 1:A:46:SER:H | 1:A:45:ILE:HG12 | 9 | 0.27 |
| (1,312) | 1:A:46:SER:H | 1:A:45:ILE:HG12 | 16 | 0.27 |
| (1,309) | 1:A:56:ILE:H | 1:A:51:PHE:HB2 | 5 | 0.27 |
| (1,309) | 1:A:56:ILE:H | 1:A:51:PHE:HB2 | 12 | 0.27 |
| (1,286) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HB2 | 4 | 0.27 |
| (1,275) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:82:PHE:H | 13 | 0.27 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG21 | 2 | 0.27 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG22 | 2 | 0.27 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG23 | 2 | 0.27 |
| (1,25) | 1:A:83:ASP:H | 1:A:84:HIS:H | 10 | 0.27 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG21 | 13 | 0.27 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG22 | 13 | 0.27 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG23 | 13 | 0.27 |
| (1,23) | 1:A:44:SER:H | 1:A:45:ILE:H | 11 | 0.27 |
| (1,213) | 1:A:38:GLY:H | 1:A:38:GLY:HA2 | 6 | 0.27 |
| (1,21) | 1:A:7:THR:H | 1:A:6:ALA:H | 11 | 0.27 |
| (1,17) | 1:A:100:GLN:H | 1:A:99:THR:H | 6 | 0.27 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB1 | 5 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB2 | 5 | 0.27 |
| (1,161) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HB3 | 5 | 0.27 |
| (1,145) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:50:ALA:HA | 1 | 0.27 |
| (1,145) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:50:ALA:HA | 3 | 0.27 |
| (1,145) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:50:ALA:HA | 5 | 0.27 |
| (1,145) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:50:ALA:HA | 9 | 0.27 |
| (1,145) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:50:ALA:HA | 10 | 0.27 |
| (1,145) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:50:ALA:HA | 16 | 0.27 |
| (1,110) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:52:LYS:HG3 | 9 | 0.27 |
| (1,110) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:52:LYS:HG3 | 11 | 0.27 |
| (1,11) | 1:A:96:THR:H | 1:A:95:HIS:H | 10 | 0.27 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD11 | 2 | 0.26 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD12 | 2 | 0.26 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD13 | 2 | 0.26 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD11 | 2 | 0.26 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD12 | 2 | 0.26 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD13 | 2 | 0.26 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD11 | 2 | 0.26 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD12 | 2 | 0.26 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD13 | 2 | 0.26 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD11 | 10 | 0.26 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD12 | 10 | 0.26 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD13 | 10 | 0.26 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD11 | 10 | 0.26 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD12 | 10 | 0.26 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD13 | 10 | 0.26 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD11 | 10 | 0.26 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD12 | 10 | 0.26 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD13 | 10 | 0.26 |
| (2,980) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:54:LEU:HG | 5 | 0.26 |
| (2,980) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:54:LEU:HG | 15 | 0.26 |
| (2,976) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:50:ALA:H | 2 | 0.26 |
| (2,976) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:50:ALA:H | 12 | 0.26 |
| (2,932) | 1:A:45:ILE:HG13 | 1:A:42:PRO:HA | 8 | 0.26 |
| (2,917) | 1:A:44:SER:HA | 1:A:41:THR:HG21 | 10 | 0.26 |
| (2,917) | 1:A:44:SER:HA | 1:A:41:THR:HG22 | 10 | 0.26 |
| (2,917) | 1:A:44:SER:HA | 1:A:41:THR:HG23 | 10 | 0.26 |
| (2,897) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:44:SER:HB3 | 10 | 0.26 |
| (2,897) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:44:SER:HB3 | 10 | 0.26 |
| (2,897) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:44:SER:HB3 | 10 | 0.26 |
| (2,897) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:44:SER:HB3 | 15 | 0.26 |
| (2,897) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:44:SER:HB3 | 15 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,897) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:44:SER:HB3 | 15 | 0.26 |
| (2,896) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:42:PRO:HD2 | 12 | 0.26 |
| (2,896) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:42:PRO:HD2 | 12 | 0.26 |
| (2,896) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:42:PRO:HD2 | 12 | 0.26 |
| (2,870) | 1:A:42:PRO:HG2 | 1:A:42:PRO:HA | 9 | 0.26 |
| (2,870) | 1:A:42:PRO:HG2 | 1:A:42:PRO:HA | 10 | 0.26 |
| (2,870) | 1:A:42:PRO:HG2 | 1:A:42:PRO:HA | 11 | 0.26 |
| (2,870) | 1:A:42:PRO:HG2 | 1:A:42:PRO:HA | 14 | 0.26 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:33:THR:HG21 | 6 | 0.26 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:33:THR:HG22 | 6 | 0.26 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:33:THR:HG23 | 6 | 0.26 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:33:THR:HG21 | 6 | 0.26 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:33:THR:HG22 | 6 | 0.26 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:33:THR:HG23 | 6 | 0.26 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:33:THR:HG21 | 6 | 0.26 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:33:THR:HG22 | 6 | 0.26 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:33:THR:HG23 | 6 | 0.26 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:33:THR:HG21 | 13 | 0.26 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:33:THR:HG22 | 13 | 0.26 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:33:THR:HG23 | 13 | 0.26 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:33:THR:HG21 | 13 | 0.26 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:33:THR:HG22 | 13 | 0.26 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:33:THR:HG23 | 13 | 0.26 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:33:THR:HG21 | 13 | 0.26 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:33:THR:HG22 | 13 | 0.26 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:33:THR:HG23 | 13 | 0.26 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG21 | 2 | 0.26 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG22 | 2 | 0.26 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG23 | 2 | 0.26 |
| (2,832) | 1:A:37:LEU:HB2 | 1:A:37:LEU:H | 4 | 0.26 |
| (2,832) | 1:A:37:LEU:HB2 | 1:A:37:LEU:H | 15 | 0.26 |
| (2,832) | 1:A:37:LEU:HB2 | 1:A:37:LEU:H | 16 | 0.26 |
| (2,831) | 1:A:37:LEU:HA | 1:A:37:LEU:HB3 | 7 | 0.26 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:64:LEU:H | 6 | 0.26 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:64:LEU:H | 6 | 0.26 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:64:LEU:H | 6 | 0.26 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG21 | 8 | 0.26 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG22 | 8 | 0.26 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG23 | 8 | 0.26 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG21 | 16 | 0.26 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG22 | 16 | 0.26 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG23 | 16 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB1 | 11 | 0.26 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB2 | 11 | 0.26 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB3 | 11 | 0.26 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB1 | 12 | 0.26 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB2 | 12 | 0.26 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB3 | 12 | 0.26 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:34:ALA:HA | 8 | 0.26 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:34:ALA:HA | 8 | 0.26 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:34:ALA:HA | 8 | 0.26 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:34:ALA:HA | 15 | 0.26 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:34:ALA:HA | 15 | 0.26 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:34:ALA:HA | 15 | 0.26 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HA | 4 | 0.26 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HA | 4 | 0.26 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HA | 4 | 0.26 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HA | 6 | 0.26 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HA | 6 | 0.26 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HA | 6 | 0.26 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HA | 13 | 0.26 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HA | 13 | 0.26 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HA | 13 | 0.26 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HA | 16 | 0.26 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HA | 16 | 0.26 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HA | 16 | 0.26 |
| (2,641) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:54:LEU:HA | 7 | 0.26 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB1 | 16 | 0.26 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB2 | 16 | 0.26 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB3 | 16 | 0.26 |
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG21 | 6 | 0.26 |
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG22 | 6 | 0.26 |
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG23 | 6 | 0.26 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG21 | 5 | 0.26 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG22 | 5 | 0.26 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG23 | 5 | 0.26 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG21 | 5 | 0.26 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG22 | 5 | 0.26 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG23 | 5 | 0.26 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG21 | 5 | 0.26 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG22 | 5 | 0.26 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG23 | 5 | 0.26 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG21 | 9 | 0.26 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG22 | 9 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG23 | 9 | 0.26 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG21 | 9 | 0.26 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG22 | 9 | 0.26 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG23 | 9 | 0.26 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG21 | 9 | 0.26 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG22 | 9 | 0.26 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG23 | 9 | 0.26 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:71:ASN:HB3 | 4 | 0.26 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:71:ASN:HB3 | 4 | 0.26 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:71:ASN:HB3 | 4 | 0.26 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD11 | 9 | 0.26 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD12 | 9 | 0.26 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD13 | 9 | 0.26 |
| (2,547) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:29:VAL:H | 9 | 0.26 |
| (2,533) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:25:LEU:HB2 | 6 | 0.26 |
| (2,506) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:24:THR:H | 7 | 0.26 |
| (2,506) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:24:THR:H | 9 | 0.26 |
| (2,506) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:24:THR:H | 11 | 0.26 |
| (2,506) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:24:THR:H | 13 | 0.26 |
| (2,490) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:22:GLN:HA | 13 | 0.26 |
| (2,483) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 13 | 0.26 |
| (2,478) | 1:A:59:LEU:HG | 1:A:60:THR:H | 10 | 0.26 |
| (2,477) | 1:A:25:LEU:HG | 1:A:25:LEU:H | 2 | 0.26 |
| (2,477) | 1:A:25:LEU:HG | 1:A:25:LEU:H | 4 | 0.26 |
| (2,473) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HD11 | 16 | 0.26 |
| (2,473) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HD12 | 16 | 0.26 |
| (2,473) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HD13 | 16 | 0.26 |
| (2,471) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HB3 | 3 | 0.26 |
| (2,471) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HB3 | 11 | 0.26 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:51:PHE:HD1 | 9 | 0.26 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:51:PHE:HD2 | 9 | 0.26 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:51:PHE:HD1 | 9 | 0.26 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:51:PHE:HD2 | 9 | 0.26 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:51:PHE:HD1 | 9 | 0.26 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:51:PHE:HD2 | 9 | 0.26 |
| (2,447) | 1:A:20:GLN:HB3 | 1:A:20:GLN:HA | 2 | 0.26 |
| (2,447) | 1:A:20:GLN:HB3 | 1:A:20:GLN:HA | 5 | 0.26 |
| (2,447) | 1:A:20:GLN:HB3 | 1:A:20:GLN:HA | 6 | 0.26 |
| (2,447) | 1:A:20:GLN:HB3 | 1:A:20:GLN:HA | 8 | 0.26 |
| (2,447) | 1:A:20:GLN:HB3 | 1:A:20:GLN:HA | 14 | 0.26 |
| (2,447) | 1:A:20:GLN:HB3 | 1:A:20:GLN:HA | 15 | 0.26 |
| (2,433) | 1:A:21:GLN:HG2 | 1:A:21:GLN:HA | 10 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,433) | 1:A:21:GLN:HG2 | 1:A:21:GLN:HA | 12 | 0.26 |
| (2,433) | 1:A:21:GLN:HG2 | 1:A:21:GLN:HA | 13 | 0.26 |
| (2,433) | 1:A:21:GLN:HG2 | 1:A:21:GLN:HA | 15 | 0.26 |
| (2,418) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 8 | 0.26 |
| (2,388) | 1:A:45:ILE:HA | 1:A:46:SER:H | 8 | 0.26 |
| (2,366) | 1:A:17:SER:HB3 | 1:A:17:SER:HA | 16 | 0.26 |
| (2,364) | 1:A:17:SER:HB2 | 1:A:17:SER:H | 10 | 0.26 |
| (2,325) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 4 | 0.26 |
| (2,325) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 4 | 0.26 |
| (2,325) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 4 | 0.26 |
| (2,298) | 1:A:94:LEU:HB2 | 1:A:94:LEU:H | 14 | 0.26 |
| (2,269) | 1:A:12:ARG:HG2 | 1:A:13:LEU:H | 14 | 0.26 |
| (2,262) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:12:ARG:H | 9 | 0.26 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD11 | 15 | 0.26 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD12 | 15 | 0.26 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD13 | 15 | 0.26 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD11 | 15 | 0.26 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD12 | 15 | 0.26 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD13 | 15 | 0.26 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD11 | 15 | 0.26 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD12 | 15 | 0.26 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD13 | 15 | 0.26 |
| (2,201) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HB3 | 14 | 0.26 |
| (2,20) | 1:A:102:HIS:HB2 | 1:A:102:HIS:HD2 | 1 | 0.26 |
| (2,20) | 1:A:102:HIS:HB2 | 1:A:102:HIS:HD2 | 7 | 0.26 |
| (2,1915) | 1:A:91:THR:HB | 1:A:91:THR:H | 1 | 0.26 |
| (2,19) | 1:A:102:HIS:HB3 | 1:A:102:HIS:HD2 | 15 | 0.26 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:61:ALA:HB1 | 6 | 0.26 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:61:ALA:HB2 | 6 | 0.26 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:61:ALA:HB3 | 6 | 0.26 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE2 | 1:A:61:ALA:HB1 | 6 | 0.26 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE2 | 1:A:61:ALA:HB2 | 6 | 0.26 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE2 | 1:A:61:ALA:HB3 | 6 | 0.26 |
| (2,1888) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:13:LEU:H | 2 | 0.26 |
| (2,1888) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:13:LEU:H | 6 | 0.26 |
| (2,1888) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:13:LEU:H | 15 | 0.26 |
| (2,1848) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:22:GLN:H | 3 | 0.26 |
| (2,1848) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:22:GLN:H | 11 | 0.26 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG21 | 3 | 0.26 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG22 | 3 | 0.26 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG23 | 3 | 0.26 |
| (2,1793) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:99:THR:HG21 | 2 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1793) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:99:THR:HG22 | 2 | 0.26 |
| (2,1793) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:99:THR:HG23 | 2 | 0.26 |
| (2,1729) | 1:A:93:HIS:HA | 1:A:90:LEU:HA | 11 | 0.26 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HE1 | 2 | 0.26 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HE2 | 2 | 0.26 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HE1 | 2 | 0.26 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HE2 | 2 | 0.26 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HE1 | 2 | 0.26 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HE2 | 2 | 0.26 |
| (2,1663) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:84:HIS:HB3 | 10 | 0.26 |
| (2,1663) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:84:HIS:HB3 | 12 | 0.26 |
| (2,1630) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:51:PHE:H | 12 | 0.26 |
| (2,1630) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:51:PHE:H | 16 | 0.26 |
| (2,1567) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:83:ASP:H | 2 | 0.26 |
| (2,1540) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:95:HIS:HA | 12 | 0.26 |
| (2,1534) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD21 | 6 | 0.26 |
| (2,1534) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD22 | 6 | 0.26 |
| (2,1534) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD23 | 6 | 0.26 |
| (2,1534) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD21 | 16 | 0.26 |
| (2,1534) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD22 | 16 | 0.26 |
| (2,1534) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD23 | 16 | 0.26 |
| (2,1483) | 1:A:60:THR:HA | 1:A:63:GLU:HB2 | 7 | 0.26 |
| (2,1453) | 1:A:40:HIS:HA | 1:A:40:HIS:HB2 | 8 | 0.26 |
| (2,1453) | 1:A:40:HIS:HA | 1:A:40:HIS:HB2 | 14 | 0.26 |
| (2,1453) | 1:A:40:HIS:HA | 1:A:40:HIS:HB2 | 15 | 0.26 |
| (2,1453) | 1:A:40:HIS:HA | 1:A:40:HIS:HB2 | 16 | 0.26 |
| (2,1445) | 1:A:88:HIS:HB2 | 1:A:88:HIS:H | 7 | 0.26 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG21 | 11 | 0.26 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG22 | 11 | 0.26 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG23 | 11 | 0.26 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG21 | 11 | 0.26 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG22 | 11 | 0.26 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG23 | 11 | 0.26 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG21 | 11 | 0.26 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG22 | 11 | 0.26 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG23 | 11 | 0.26 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG21 | 16 | 0.26 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG22 | 16 | 0.26 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG23 | 16 | 0.26 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG21 | 16 | 0.26 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG22 | 16 | 0.26 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG23 | 16 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG21 | 16 | 0.26 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG22 | 16 | 0.26 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG23 | 16 | 0.26 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HB | 14 | 0.26 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HB | 14 | 0.26 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HB | 14 | 0.26 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD11 | 1 | 0.26 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD12 | 1 | 0.26 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD13 | 1 | 0.26 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD11 | 16 | 0.26 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD12 | 16 | 0.26 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD13 | 16 | 0.26 |
| (2,1367) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:98:LEU:H | 5 | 0.26 |
| (2,1318) | 1:A:68:LEU:HB3 | 1:A:68:LEU:HA | 10 | 0.26 |
| (2,1301) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:65:ARG:H | 5 | 0.26 |
| (2,1293) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:65:ARG:H | 9 | 0.26 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 1 | 0.26 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 1 | 0.26 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 1 | 0.26 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 2 | 0.26 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 2 | 0.26 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 2 | 0.26 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 13 | 0.26 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 13 | 0.26 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 13 | 0.26 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 16 | 0.26 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 16 | 0.26 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 16 | 0.26 |
| (2,1272) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 6 | 0.26 |
| (2,1272) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 6 | 0.26 |
| (2,1272) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 6 | 0.26 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 12 | 0.26 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 12 | 0.26 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 12 | 0.26 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 13 | 0.26 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 13 | 0.26 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 13 | 0.26 |
| (2,1228) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:63:GLU:H | 2 | 0.26 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB1 | 6 | 0.26 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB2 | 6 | 0.26 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:61:ALA:HB3 | 6 | 0.26 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB1 | 6 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB2 | 6 | 0.26 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:61:ALA:HB3 | 6 | 0.26 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB1 | 6 | 0.26 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB2 | 6 | 0.26 |
| (2,1168) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:61:ALA:HB3 | 6 | 0.26 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ALA:H | 9 | 0.26 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ALA:H | 9 | 0.26 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ALA:H | 9 | 0.26 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD11 | 3 | 0.26 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD12 | 3 | 0.26 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD13 | 3 | 0.26 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD11 | 3 | 0.26 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD12 | 3 | 0.26 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD13 | 3 | 0.26 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD11 | 3 | 0.26 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD12 | 3 | 0.26 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD13 | 3 | 0.26 |
| (2,1047) | 1:A:52:LYS:HB2 | 1:A:53:ASP:H | 5 | 0.26 |
| (2,1030) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG13 | 8 | 0.26 |
| (2,1023) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HB3 | 11 | 0.26 |
| (2,1023) | 1:A:51:PHE:HA | 1:A:51:PHE:HB3 | 16 | 0.26 |
| (1,94) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:68:LEU:HA | 3 | 0.26 |
| (1,7) | 1:A:61:ALA:H | 1:A:57:ASP:H | 4 | 0.26 |
| (1,590) | 1:A:96:THR:H | 1:A:97:ARG:H | 5 | 0.26 |
| (1,566) | 1:A:98:LEU:H | 1:A:98:LEU:HB3 | 12 | 0.26 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 6 | 0.26 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 6 | 0.26 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 6 | 0.26 |
| (1,527) | 1:A:93:HIS:H | 1:A:92:GLN:HB3 | 1 | 0.26 |
| (1,493) | 1:A:25:LEU:H | 1:A:26:ALA:H | 2 | 0.26 |
| (1,493) | 1:A:25:LEU:H | 1:A:26:ALA:H | 5 | 0.26 |
| (1,493) | 1:A:25:LEU:H | 1:A:26:ALA:H | 14 | 0.26 |
| (1,445) | 1:A:3:ALA:H | 1:A:3:ALA:HA | 2 | 0.26 |
| (1,443) | 1:A:75:ASP:H | 1:A:74:LEU:HB2 | 3 | 0.26 |
| (1,44) | 1:A:79:THR:H | 1:A:78:PRO:HA | 5 | 0.26 |
| (1,44) | 1:A:79:THR:H | 1:A:78:PRO:HA | 8 | 0.26 |
| (1,416) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 11 | 0.26 |
| (1,416) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 11 | 0.26 |
| (1,416) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 11 | 0.26 |
| (1,390) | 1:A:65:ARG:HE | 1:A:65:ARG:HD3 | 1 | 0.26 |
| (1,390) | 1:A:65:ARG:HE | 1:A:65:ARG:HD3 | 7 | 0.26 |
| (1,390) | 1:A:65:ARG:HE | 1:A:65:ARG:HD3 | 10 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,390) | 1:A:65:ARG:HE | 1:A:65:ARG:HD3 | 12 | 0.26 |
| (1,376) | 1:A:58:SER:H | 1:A:58:SER:HB3 | 14 | 0.26 |
| (1,342) | 1:A:66:ASN:H | 1:A:66:ASN:HB2 | 2 | 0.26 |
| (1,342) | 1:A:66:ASN:H | 1:A:66:ASN:HB2 | 10 | 0.26 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD21 | 1 | 0.26 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD22 | 1 | 0.26 |
| (1,340) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:90:LEU:HD23 | 1 | 0.26 |
| (1,34) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:72:THR:H | 3 | 0.26 |
| (1,275) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:82:PHE:H | 5 | 0.26 |
| (1,275) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:82:PHE:H | 11 | 0.26 |
| (1,249) | 1:A:99:THR:H | 1:A:98:LEU:HB2 | 14 | 0.26 |
| (1,23) | 1:A:44:SER:H | 1:A:45:ILE:H | 14 | 0.26 |
| (2,976) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:50:ALA:H | 8 | 0.25 |
| (2,976) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:50:ALA:H | 15 | 0.25 |
| (2,960) | 1:A:47:PRO:HD2 | 1:A:46:SER:HB3 | 10 | 0.25 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB1 | 11 | 0.25 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB2 | 11 | 0.25 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB3 | 11 | 0.25 |
| (2,932) | 1:A:45:ILE:HG13 | 1:A:42:PRO:HA | 14 | 0.25 |
| (2,921) | 1:A:44:SER:HB2 | 1:A:44:SER:HB3 | 1 | 0.25 |
| (2,896) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:42:PRO:HD2 | 5 | 0.25 |
| (2,896) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:42:PRO:HD2 | 5 | 0.25 |
| (2,896) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:42:PRO:HD2 | 5 | 0.25 |
| (2,876) | 1:A:42:PRO:HB2 | 1:A:43:GLU:H | 14 | 0.25 |
| (2,872) | 1:A:42:PRO:HA | 1:A:30:ALA:HB1 | 3 | 0.25 |
| (2,872) | 1:A:42:PRO:HA | 1:A:30:ALA:HB2 | 3 | 0.25 |
| (2,872) | 1:A:42:PRO:HA | 1:A:30:ALA:HB3 | 3 | 0.25 |
| (2,870) | 1:A:42:PRO:HG2 | 1:A:42:PRO:HA | 2 | 0.25 |
| (2,870) | 1:A:42:PRO:HG2 | 1:A:42:PRO:HA | 3 | 0.25 |
| (2,870) | 1:A:42:PRO:HG2 | 1:A:42:PRO:HA | 7 | 0.25 |
| (2,870) | 1:A:42:PRO:HG2 | 1:A:42:PRO:HA | 13 | 0.25 |
| (2,870) | 1:A:42:PRO:HG2 | 1:A:42:PRO:HA | 15 | 0.25 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:33:THR:HG21 | 4 | 0.25 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:33:THR:HG22 | 4 | 0.25 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:33:THR:HG23 | 4 | 0.25 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:33:THR:HG21 | 4 | 0.25 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:33:THR:HG22 | 4 | 0.25 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:33:THR:HG23 | 4 | 0.25 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:33:THR:HG21 | 4 | 0.25 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:33:THR:HG22 | 4 | 0.25 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:33:THR:HG23 | 4 | 0.25 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:33:THR:HG21 | 7 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:33:THR:HG22 | 7 | 0.25 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:33:THR:HG23 | 7 | 0.25 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:33:THR:HG21 | 7 | 0.25 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:33:THR:HG22 | 7 | 0.25 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:33:THR:HG23 | 7 | 0.25 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:33:THR:HG21 | 7 | 0.25 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:33:THR:HG22 | 7 | 0.25 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:33:THR:HG23 | 7 | 0.25 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:33:THR:HG21 | 14 | 0.25 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:33:THR:HG22 | 14 | 0.25 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:33:THR:HG23 | 14 | 0.25 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:33:THR:HG21 | 14 | 0.25 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:33:THR:HG22 | 14 | 0.25 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:33:THR:HG23 | 14 | 0.25 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:33:THR:HG21 | 14 | 0.25 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:33:THR:HG22 | 14 | 0.25 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:33:THR:HG23 | 14 | 0.25 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:36:VAL:H | 15 | 0.25 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:36:VAL:H | 15 | 0.25 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:36:VAL:H | 15 | 0.25 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:36:VAL:H | 16 | 0.25 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:36:VAL:H | 16 | 0.25 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:36:VAL:H | 16 | 0.25 |
| (2,832) | 1:A:37:LEU:HB2 | 1:A:37:LEU:H | 8 | 0.25 |
| (2,832) | 1:A:37:LEU:HB2 | 1:A:37:LEU:H | 14 | 0.25 |
| (2,831) | 1:A:37:LEU:HA | 1:A:37:LEU:HB3 | 1 | 0.25 |
| (2,831) | 1:A:37:LEU:HA | 1:A:37:LEU:HB3 | 8 | 0.25 |
| (2,831) | 1:A:37:LEU:HA | 1:A:37:LEU:HB3 | 11 | 0.25 |
| (2,831) | 1:A:37:LEU:HA | 1:A:37:LEU:HB3 | 12 | 0.25 |
| (2,831) | 1:A:37:LEU:HA | 1:A:37:LEU:HB3 | 13 | 0.25 |
| (2,831) | 1:A:37:LEU:HA | 1:A:37:LEU:HB3 | 14 | 0.25 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG21 | 2 | 0.25 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG22 | 2 | 0.25 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG23 | 2 | 0.25 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG21 | 3 | 0.25 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG22 | 3 | 0.25 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG23 | 3 | 0.25 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:34:ALA:HA | 7 | 0.25 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:34:ALA:HA | 7 | 0.25 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:34:ALA:HA | 7 | 0.25 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:34:ALA:HA | 10 | 0.25 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:34:ALA:HA | 10 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:34:ALA:HA | 10 | 0.25 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HA | 5 | 0.25 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HA | 5 | 0.25 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HA | 5 | 0.25 |
| (2,7) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:71:ASN:HA | 2 | 0.25 |
| (2,7) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:71:ASN:HA | 2 | 0.25 |
| (2,7) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:71:ASN:HA | 2 | 0.25 |
| (2,641) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:54:LEU:HA | 10 | 0.25 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD11 | 3 | 0.25 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD12 | 3 | 0.25 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:HD13 | 3 | 0.25 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD11 | 3 | 0.25 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD12 | 3 | 0.25 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:HD13 | 3 | 0.25 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD11 | 3 | 0.25 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD12 | 3 | 0.25 |
| (2,61) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:HD13 | 3 | 0.25 |
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG21 | 1 | 0.25 |
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG22 | 1 | 0.25 |
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG23 | 1 | 0.25 |
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG21 | 5 | 0.25 |
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG22 | 5 | 0.25 |
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG23 | 5 | 0.25 |
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG21 | 14 | 0.25 |
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG22 | 14 | 0.25 |
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG23 | 14 | 0.25 |
| (2,571) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:ALA:H | 4 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG21 | 6 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG22 | 6 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG23 | 6 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG21 | 6 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG22 | 6 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG23 | 6 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG21 | 6 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG22 | 6 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG23 | 6 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG21 | 7 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG22 | 7 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG23 | 7 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG21 | 7 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG22 | 7 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG23 | 7 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG21 | 7 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG22 | 7 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG23 | 7 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG21 | 8 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG22 | 8 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG23 | 8 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG21 | 8 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG22 | 8 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG23 | 8 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG21 | 8 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG22 | 8 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG23 | 8 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG21 | 11 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG22 | 11 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG23 | 11 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG21 | 11 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG22 | 11 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG23 | 11 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG21 | 11 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG22 | 11 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG23 | 11 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG21 | 13 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG22 | 13 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG23 | 13 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG21 | 13 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG22 | 13 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG23 | 13 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG21 | 13 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG22 | 13 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG23 | 13 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG21 | 14 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG22 | 14 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG23 | 14 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG21 | 14 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG22 | 14 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG23 | 14 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG21 | 14 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG22 | 14 | 0.25 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG23 | 14 | 0.25 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:29:VAL:HA | 2 | 0.25 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:29:VAL:HA | 2 | 0.25 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:29:VAL:HA | 2 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD11 | 7 | 0.25 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD12 | 7 | 0.25 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD13 | 7 | 0.25 |
| (2,533) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:25:LEU:HB2 | 1 | 0.25 |
| (2,533) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:25:LEU:HB2 | 7 | 0.25 |
| (2,511) | 1:A:23:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HA | 5 | 0.25 |
| (2,506) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:24:THR:H | 8 | 0.25 |
| (2,494) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:23:GLN:H | 2 | 0.25 |
| (2,477) | 1:A:25:LEU:HG | 1:A:25:LEU:H | 8 | 0.25 |
| (2,458) | 1:A:20:GLN:HB3 | 1:A:16:LEU:HB3 | 8 | 0.25 |
| (2,458) | 1:A:20:GLN:HB3 | 1:A:16:LEU:HB3 | 15 | 0.25 |
| (2,418) | 1:A:21:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 7 | 0.25 |
| (2,411) | 1:A:19:GLN:HB3 | 1:A:19:GLN:H | 5 | 0.25 |
| (2,411) | 1:A:19:GLN:HB3 | 1:A:19:GLN:H | 16 | 0.25 |
| (2,403) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:20:GLN:H | 1 | 0.25 |
| (2,403) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:20:GLN:H | 6 | 0.25 |
| (2,402) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:23:GLN:H | 14 | 0.25 |
| (2,383) | 1:A:18:PRO:HB3 | 1:A:18:PRO:HG3 | 6 | 0.25 |
| (2,298) | 1:A:94:LEU:HB2 | 1:A:94:LEU:H | 2 | 0.25 |
| (2,298) | 1:A:94:LEU:HB2 | 1:A:94:LEU:H | 6 | 0.25 |
| (2,298) | 1:A:94:LEU:HB2 | 1:A:94:LEU:H | 15 | 0.25 |
| (2,274) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:12:ARG:HD3 | 1 | 0.25 |
| (2,269) | 1:A:12:ARG:HG2 | 1:A:13:LEU:H | 9 | 0.25 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD11 | 13 | 0.25 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD12 | 13 | 0.25 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD13 | 13 | 0.25 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD11 | 13 | 0.25 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD12 | 13 | 0.25 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD13 | 13 | 0.25 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD11 | 13 | 0.25 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD12 | 13 | 0.25 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD13 | 13 | 0.25 |
| (2,22) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:40:HIS:HB2 | 3 | 0.25 |
| (2,1915) | 1:A:91:THR:HB | 1:A:91:THR:H | 8 | 0.25 |
| (2,1888) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:13:LEU:H | 16 | 0.25 |
| (2,1885) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:13:LEU:HA | 8 | 0.25 |
| (2,1848) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:22:GLN:H | 2 | 0.25 |
| (2,1848) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:22:GLN:H | 6 | 0.25 |
| (2,18) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:95:HIS:HD2 | 11 | 0.25 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG21 | 1:A:99:THR:H | 5 | 0.25 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG22 | 1:A:99:THR:H | 5 | 0.25 |
| (2,1798) | 1:A:99:THR:HG23 | 1:A:99:THR:H | 5 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:40:HIS:HB2 | 11 | 0.25 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:40:HIS:HB2 | 11 | 0.25 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:40:HIS:HB2 | 11 | 0.25 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:40:HIS:HB2 | 13 | 0.25 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:40:HIS:HB2 | 13 | 0.25 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:40:HIS:HB2 | 13 | 0.25 |
| (2,1755) | 1:A:92:GLN:HA | 1:A:95:HIS:HB3 | 13 | 0.25 |
| (2,1714) | 1:A:92:GLN:HG2 | 1:A:92:GLN:HA | 3 | 0.25 |
| (2,17) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:95:HIS:HB2 | 10 | 0.25 |
| (2,17) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:95:HIS:HB2 | 11 | 0.25 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HE1 | 13 | 0.25 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HE2 | 13 | 0.25 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HE1 | 13 | 0.25 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HE2 | 13 | 0.25 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HE1 | 13 | 0.25 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HE2 | 13 | 0.25 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HE1 | 15 | 0.25 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HE2 | 15 | 0.25 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HE1 | 15 | 0.25 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HE2 | 15 | 0.25 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HE1 | 15 | 0.25 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HE2 | 15 | 0.25 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HE1 | 16 | 0.25 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HE2 | 16 | 0.25 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HE1 | 16 | 0.25 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HE2 | 16 | 0.25 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HE1 | 16 | 0.25 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HE2 | 16 | 0.25 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HZ | 12 | 0.25 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HZ | 12 | 0.25 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HZ | 12 | 0.25 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HB2 | 2 | 0.25 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:HB2 | 2 | 0.25 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:HB2 | 2 | 0.25 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HB2 | 5 | 0.25 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:HB2 | 5 | 0.25 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:HB2 | 5 | 0.25 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HB2 | 14 | 0.25 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:HB2 | 14 | 0.25 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:HB2 | 14 | 0.25 |
| (2,1663) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:84:HIS:HB3 | 4 | 0.25 |
| (2,1663) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:84:HIS:HB3 | 7 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1663) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:84:HIS:HB3 | 15 | 0.25 |
| (2,1560) | 1:A:82:PHE:HB2 | 1:A:83:ASP:H | 14 | 0.25 |
| (2,1543) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:51:PHE:HD1 | 5 | 0.25 |
| (2,1543) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:51:PHE:HD2 | 5 | 0.25 |
| (2,1543) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:51:PHE:HD1 | 6 | 0.25 |
| (2,1543) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:51:PHE:HD2 | 6 | 0.25 |
| (2,1543) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:51:PHE:HD1 | 12 | 0.25 |
| (2,1543) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:51:PHE:HD2 | 12 | 0.25 |
| (2,1542) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:84:HIS:H | 1 | 0.25 |
| (2,1453) | 1:A:40:HIS:HA | 1:A:40:HIS:HB2 | 10 | 0.25 |
| (2,1445) | 1:A:88:HIS:HB2 | 1:A:88:HIS:H | 1 | 0.25 |
| (2,1445) | 1:A:88:HIS:HB2 | 1:A:88:HIS:H | 10 | 0.25 |
| (2,1444) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:88:HIS:H | 2 | 0.25 |
| (2,1444) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:88:HIS:H | 9 | 0.25 |
| (2,1402) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:44:SER:HB3 | 2 | 0.25 |
| (2,1402) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:44:SER:HB3 | 2 | 0.25 |
| (2,1402) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:44:SER:HB3 | 2 | 0.25 |
| (2,1377) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:74:LEU:HD21 | 9 | 0.25 |
| (2,1377) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:74:LEU:HD22 | 9 | 0.25 |
| (2,1377) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:74:LEU:HD23 | 9 | 0.25 |
| (2,1334) | 1:A:69:THR:HA | 1:A:74:LEU:H | 15 | 0.25 |
| (2,1301) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:65:ARG:H | 1 | 0.25 |
| (2,1301) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:65:ARG:H | 6 | 0.25 |
| (2,1301) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:65:ARG:H | 9 | 0.25 |
| (2,1299) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:67:THR:H | 3 | 0.25 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 11 | 0.25 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 11 | 0.25 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 11 | 0.25 |
| (2,1274) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:65:ARG:HG2 | 15 | 0.25 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 3 | 0.25 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 3 | 0.25 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 3 | 0.25 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 2 | 0.25 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 2 | 0.25 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 2 | 0.25 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 10 | 0.25 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 10 | 0.25 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 10 | 0.25 |
| (2,1219) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:60:THR:HG21 | 2 | 0.25 |
| (2,1219) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:60:THR:HG22 | 2 | 0.25 |
| (2,1219) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:60:THR:HG23 | 2 | 0.25 |
| (2,1204) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:59:LEU:HA | 10 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1204) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:59:LEU:HA | 14 | 0.25 |
| (2,1195) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:63:GLU:HB3 | 3 | 0.25 |
| (2,1195) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:63:GLU:HB3 | 4 | 0.25 |
| (2,1195) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:63:GLU:HB3 | 6 | 0.25 |
| (2,1195) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:63:GLU:HB3 | 7 | 0.25 |
| (2,1195) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:63:GLU:HB3 | 9 | 0.25 |
| (2,1195) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:63:GLU:HB3 | 10 | 0.25 |
| (2,1195) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:63:GLU:HB3 | 11 | 0.25 |
| (2,1195) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:63:GLU:HB3 | 12 | 0.25 |
| (2,1195) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:63:GLU:HB3 | 13 | 0.25 |
| (2,1195) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:63:GLU:HB3 | 15 | 0.25 |
| (2,1195) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:63:GLU:HB3 | 16 | 0.25 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB1 | 1:A:64:LEU:HB3 | 7 | 0.25 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB2 | 1:A:64:LEU:HB3 | 7 | 0.25 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB3 | 1:A:64:LEU:HB3 | 7 | 0.25 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD11 | 10 | 0.25 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD12 | 10 | 0.25 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD13 | 10 | 0.25 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD11 | 10 | 0.25 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD12 | 10 | 0.25 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD13 | 10 | 0.25 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD11 | 10 | 0.25 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD12 | 10 | 0.25 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD13 | 10 | 0.25 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD11 | 14 | 0.25 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD12 | 14 | 0.25 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD13 | 14 | 0.25 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD11 | 14 | 0.25 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD12 | 14 | 0.25 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD13 | 14 | 0.25 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD11 | 14 | 0.25 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD12 | 14 | 0.25 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD13 | 14 | 0.25 |
| (2,1100) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:90:LEU:HB2 | 1 | 0.25 |
| (2,1100) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:90:LEU:HB2 | 1 | 0.25 |
| (2,1100) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:90:LEU:HB2 | 1 | 0.25 |
| (2,1100) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:90:LEU:HB2 | 4 | 0.25 |
| (2,1100) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:90:LEU:HB2 | 4 | 0.25 |
| (2,1100) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:90:LEU:HB2 | 4 | 0.25 |
| (2,1047) | 1:A:52:LYS:HB2 | 1:A:53:ASP:H | 3 | 0.25 |
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD21 | 14 | 0.25 |
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD22 | 14 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD23 | 14 | 0.25 |
| (1,89) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:71:ASN:HB3 | 12 | 0.25 |
| (1,86) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:28:LEU:HD11 | 5 | 0.25 |
| (1,86) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:28:LEU:HD12 | 5 | 0.25 |
| (1,86) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:28:LEU:HD13 | 5 | 0.25 |
| (1,56) | 1:A:60:THR:H | 1:A:59:LEU:HB2 | 16 | 0.25 |
| (1,493) | 1:A:25:LEU:H | 1:A:26:ALA:H | 16 | 0.25 |
| (1,445) | 1:A:3:ALA:H | 1:A:3:ALA:HA | 4 | 0.25 |
| (1,445) | 1:A:3:ALA:H | 1:A:3:ALA:HA | 16 | 0.25 |
| (1,443) | 1:A:75:ASP:H | 1:A:74:LEU:HB2 | 5 | 0.25 |
| (1,390) | 1:A:65:ARG:HE | 1:A:65:ARG:HD3 | 5 | 0.25 |
| (1,390) | 1:A:65:ARG:HE | 1:A:65:ARG:HD3 | 8 | 0.25 |
| (1,390) | 1:A:65:ARG:HE | 1:A:65:ARG:HD3 | 13 | 0.25 |
| (1,390) | 1:A:65:ARG:HE | 1:A:65:ARG:HD3 | 15 | 0.25 |
| (1,38) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:74:LEU:H | 2 | 0.25 |
| (1,376) | 1:A:58:SER:H | 1:A:58:SER:HB3 | 8 | 0.25 |
| (1,34) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:72:THR:H | 15 | 0.25 |
| (1,34) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:72:THR:H | 16 | 0.25 |
| (1,309) | 1:A:56:ILE:H | 1:A:51:PHE:HB2 | 1 | 0.25 |
| (1,309) | 1:A:56:ILE:H | 1:A:51:PHE:HB2 | 13 | 0.25 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 8 | 0.25 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 8 | 0.25 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 8 | 0.25 |
| (1,275) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:82:PHE:H | 1 | 0.25 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG21 | 5 | 0.25 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG22 | 5 | 0.25 |
| (1,250) | 1:A:99:THR:H | 1:A:99:THR:HG23 | 5 | 0.25 |
| (1,25) | 1:A:83:ASP:H | 1:A:84:HIS:H | 3 | 0.25 |
| (1,219) | 1:A:7:THR:H | 1:A:6:ALA:HB1 | 15 | 0.25 |
| (1,219) | 1:A:7:THR:H | 1:A:6:ALA:HB2 | 15 | 0.25 |
| (1,219) | 1:A:7:THR:H | 1:A:6:ALA:HB3 | 15 | 0.25 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD11 | 3 | 0.24 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD12 | 3 | 0.24 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD13 | 3 | 0.24 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD11 | 3 | 0.24 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD12 | 3 | 0.24 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD13 | 3 | 0.24 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD11 | 3 | 0.24 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD12 | 3 | 0.24 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD13 | 3 | 0.24 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD11 | 6 | 0.24 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD12 | 6 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD13 | 6 | 0.24 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD11 | 6 | 0.24 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD12 | 6 | 0.24 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD13 | 6 | 0.24 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD11 | 6 | 0.24 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD12 | 6 | 0.24 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD13 | 6 | 0.24 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD11 | 11 | 0.24 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD12 | 11 | 0.24 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD13 | 11 | 0.24 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD11 | 11 | 0.24 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD12 | 11 | 0.24 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD13 | 11 | 0.24 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD11 | 11 | 0.24 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD12 | 11 | 0.24 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD13 | 11 | 0.24 |
| (2,976) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:50:ALA:H | 6 | 0.24 |
| (2,960) | 1:A:47:PRO:HD2 | 1:A:46:SER:HB3 | 5 | 0.24 |
| (2,932) | 1:A:45:ILE:HG13 | 1:A:42:PRO:HA | 3 | 0.24 |
| (2,922) | 1:A:44:SER:HB2 | 1:A:41:THR:HG21 | 5 | 0.24 |
| (2,922) | 1:A:44:SER:HB2 | 1:A:41:THR:HG22 | 5 | 0.24 |
| (2,922) | 1:A:44:SER:HB2 | 1:A:41:THR:HG23 | 5 | 0.24 |
| (2,921) | 1:A:44:SER:HB2 | 1:A:44:SER:HB3 | 2 | 0.24 |
| (2,921) | 1:A:44:SER:HB2 | 1:A:44:SER:HB3 | 3 | 0.24 |
| (2,921) | 1:A:44:SER:HB2 | 1:A:44:SER:HB3 | 4 | 0.24 |
| (2,921) | 1:A:44:SER:HB2 | 1:A:44:SER:HB3 | 5 | 0.24 |
| (2,921) | 1:A:44:SER:HB2 | 1:A:44:SER:HB3 | 6 | 0.24 |
| (2,921) | 1:A:44:SER:HB2 | 1:A:44:SER:HB3 | 7 | 0.24 |
| (2,921) | 1:A:44:SER:HB2 | 1:A:44:SER:HB3 | 8 | 0.24 |
| (2,921) | 1:A:44:SER:HB2 | 1:A:44:SER:HB3 | 9 | 0.24 |
| (2,921) | 1:A:44:SER:HB2 | 1:A:44:SER:HB3 | 10 | 0.24 |
| (2,921) | 1:A:44:SER:HB2 | 1:A:44:SER:HB3 | 11 | 0.24 |
| (2,921) | 1:A:44:SER:HB2 | 1:A:44:SER:HB3 | 12 | 0.24 |
| (2,921) | 1:A:44:SER:HB2 | 1:A:44:SER:HB3 | 13 | 0.24 |
| (2,921) | 1:A:44:SER:HB2 | 1:A:44:SER:HB3 | 14 | 0.24 |
| (2,921) | 1:A:44:SER:HB2 | 1:A:44:SER:HB3 | 15 | 0.24 |
| (2,921) | 1:A:44:SER:HB2 | 1:A:44:SER:HB3 | 16 | 0.24 |
| (2,917) | 1:A:44:SER:HA | 1:A:41:THR:HG21 | 7 | 0.24 |
| (2,917) | 1:A:44:SER:HA | 1:A:41:THR:HG22 | 7 | 0.24 |
| (2,917) | 1:A:44:SER:HA | 1:A:41:THR:HG23 | 7 | 0.24 |
| (2,900) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:43:GLU:HB3 | 16 | 0.24 |
| (2,900) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:43:GLU:HB3 | 16 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,900) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:43:GLU:HB3 | 16 | 0.24 |
| (2,897) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:44:SER:HB3 | 2 | 0.24 |
| (2,897) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:44:SER:HB3 | 2 | 0.24 |
| (2,897) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:44:SER:HB3 | 2 | 0.24 |
| (2,897) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:44:SER:HB3 | 14 | 0.24 |
| (2,897) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:44:SER:HB3 | 14 | 0.24 |
| (2,897) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:44:SER:HB3 | 14 | 0.24 |
| (2,896) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:42:PRO:HD2 | 4 | 0.24 |
| (2,896) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:42:PRO:HD2 | 4 | 0.24 |
| (2,896) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:42:PRO:HD2 | 4 | 0.24 |
| (2,896) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:42:PRO:HD2 | 6 | 0.24 |
| (2,896) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:42:PRO:HD2 | 6 | 0.24 |
| (2,896) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:42:PRO:HD2 | 6 | 0.24 |
| (2,894) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:43:GLU:HB2 | 8 | 0.24 |
| (2,889) | 1:A:42:PRO:HD2 | 1:A:41:THR:HA | 2 | 0.24 |
| (2,889) | 1:A:42:PRO:HD2 | 1:A:41:THR:HA | 8 | 0.24 |
| (2,876) | 1:A:42:PRO:HB2 | 1:A:43:GLU:H | 10 | 0.24 |
| (2,870) | 1:A:42:PRO:HG2 | 1:A:42:PRO:HA | 1 | 0.24 |
| (2,870) | 1:A:42:PRO:HG2 | 1:A:42:PRO:HA | 4 | 0.24 |
| (2,870) | 1:A:42:PRO:HG2 | 1:A:42:PRO:HA | 6 | 0.24 |
| (2,870) | 1:A:42:PRO:HG2 | 1:A:42:PRO:HA | 12 | 0.24 |
| (2,870) | 1:A:42:PRO:HG2 | 1:A:42:PRO:HA | 16 | 0.24 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:36:VAL:H | 9 | 0.24 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:36:VAL:H | 9 | 0.24 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:36:VAL:H | 9 | 0.24 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG21 | 16 | 0.24 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG22 | 16 | 0.24 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG23 | 16 | 0.24 |
| (2,831) | 1:A:37:LEU:HA | 1:A:37:LEU:HB3 | 4 | 0.24 |
| (2,831) | 1:A:37:LEU:HA | 1:A:37:LEU:HB3 | 15 | 0.24 |
| (2,831) | 1:A:37:LEU:HA | 1:A:37:LEU:HB3 | 16 | 0.24 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:64:LEU:H | 15 | 0.24 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:64:LEU:H | 15 | 0.24 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:64:LEU:H | 15 | 0.24 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:33:THR:HA | 12 | 0.24 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:33:THR:HA | 12 | 0.24 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:33:THR:HA | 12 | 0.24 |
| (2,785) | 1:A:27:THR:HB | 1:A:23:GLN:HB2 | 8 | 0.24 |
| (2,785) | 1:A:27:THR:HB | 1:A:23:GLN:HB2 | 14 | 0.24 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:34:ALA:HA | 2 | 0.24 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:34:ALA:HA | 2 | 0.24 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:34:ALA:HA | 2 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:34:ALA:HA | 16 | 0.24 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:34:ALA:HA | 16 | 0.24 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:34:ALA:HA | 16 | 0.24 |
| (2,571) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:ALA:H | 1 | 0.24 |
| (2,571) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:ALA:H | 6 | 0.24 |
| (2,571) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:ALA:H | 16 | 0.24 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG21 | 10 | 0.24 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG22 | 10 | 0.24 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG23 | 10 | 0.24 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG21 | 10 | 0.24 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG22 | 10 | 0.24 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG23 | 10 | 0.24 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG21 | 10 | 0.24 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG22 | 10 | 0.24 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG23 | 10 | 0.24 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:29:VAL:HA | 14 | 0.24 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:29:VAL:HA | 14 | 0.24 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:29:VAL:HA | 14 | 0.24 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:64:LEU:HD11 | 15 | 0.24 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:64:LEU:HD12 | 15 | 0.24 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:64:LEU:HD13 | 15 | 0.24 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:64:LEU:HD11 | 15 | 0.24 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:64:LEU:HD12 | 15 | 0.24 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:64:LEU:HD13 | 15 | 0.24 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD11 | 4 | 0.24 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD12 | 4 | 0.24 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD13 | 4 | 0.24 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD11 | 8 | 0.24 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD12 | 8 | 0.24 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD13 | 8 | 0.24 |
| (2,533) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:25:LEU:HB2 | 11 | 0.24 |
| (2,483) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 2 | 0.24 |
| (2,473) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HD11 | 15 | 0.24 |
| (2,473) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HD12 | 15 | 0.24 |
| (2,473) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HD13 | 15 | 0.24 |
| (2,471) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HB3 | 9 | 0.24 |
| (2,447) | 1:A:20:GLN:HB3 | 1:A:20:GLN:HA | 4 | 0.24 |
| (2,447) | 1:A:20:GLN:HB3 | 1:A:20:GLN:HA | 7 | 0.24 |
| (2,447) | 1:A:20:GLN:HB3 | 1:A:20:GLN:HA | 11 | 0.24 |
| (2,447) | 1:A:20:GLN:HB3 | 1:A:20:GLN:HA | 16 | 0.24 |
| (2,411) | 1:A:19:GLN:HB3 | 1:A:19:GLN:H | 1 | 0.24 |
| (2,402) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:23:GLN:H | 2 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,402) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:23:GLN:H | 3 | 0.24 |
| (2,402) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:23:GLN:H | 5 | 0.24 |
| (2,388) | 1:A:45:ILE:HA | 1:A:46:SER:H | 14 | 0.24 |
| (2,385) | 1:A:18:PRO:HB3 | 1:A:18:PRO:HB2 | 6 | 0.24 |
| (2,377) | 1:A:18:PRO:HA | 1:A:18:PRO:HB3 | 6 | 0.24 |
| (2,372) | 1:A:18:PRO:HA | 1:A:18:PRO:HD3 | 11 | 0.24 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD21 | 7 | 0.24 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD22 | 7 | 0.24 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD23 | 7 | 0.24 |
| (2,325) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 16 | 0.24 |
| (2,325) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 16 | 0.24 |
| (2,325) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 16 | 0.24 |
| (2,31) | 1:A:39:HIS:HD2 | 1:A:37:LEU:HB3 | 11 | 0.24 |
| (2,298) | 1:A:94:LEU:HB2 | 1:A:94:LEU:H | 4 | 0.24 |
| (2,298) | 1:A:94:LEU:HB2 | 1:A:94:LEU:H | 7 | 0.24 |
| (2,298) | 1:A:94:LEU:HB2 | 1:A:94:LEU:H | 12 | 0.24 |
| (2,298) | 1:A:94:LEU:HB2 | 1:A:94:LEU:H | 13 | 0.24 |
| (2,279) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:12:ARG:HA | 7 | 0.24 |
| (2,276) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:9:LEU:HD11 | 3 | 0.24 |
| (2,276) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:9:LEU:HD12 | 3 | 0.24 |
| (2,276) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:9:LEU:HD13 | 3 | 0.24 |
| (2,274) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:12:ARG:HD3 | 15 | 0.24 |
| (2,24) | 1:A:39:HIS:HD2 | 1:A:39:HIS:HB2 | 16 | 0.24 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HB2 | 11 | 0.24 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HB2 | 11 | 0.24 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HB2 | 11 | 0.24 |
| (2,220) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:10:ALA:HA | 2 | 0.24 |
| (2,220) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:10:ALA:HA | 2 | 0.24 |
| (2,220) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:10:ALA:HA | 2 | 0.24 |
| (2,22) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:40:HIS:HB2 | 2 | 0.24 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB1 | 11 | 0.24 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB2 | 11 | 0.24 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB3 | 11 | 0.24 |
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HB3 | 10 | 0.24 |
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HB3 | 10 | 0.24 |
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HB3 | 10 | 0.24 |
| (2,1848) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:22:GLN:H | 5 | 0.24 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG21 | 13 | 0.24 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG22 | 13 | 0.24 |
| (2,1805) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:96:THR:HG23 | 13 | 0.24 |
| (2,18) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:95:HIS:HD2 | 2 | 0.24 |
| (2,1771) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:98:LEU:H | 5 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1771) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:98:LEU:H | 14 | 0.24 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:40:HIS:HB2 | 12 | 0.24 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:40:HIS:HB2 | 12 | 0.24 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:40:HIS:HB2 | 12 | 0.24 |
| (2,1755) | 1:A:92:GLN:HA | 1:A:95:HIS:HB3 | 3 | 0.24 |
| (2,1714) | 1:A:92:GLN:HG2 | 1:A:92:GLN:HA | 13 | 0.24 |
| (2,17) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:95:HIS:HB2 | 7 | 0.24 |
| (2,17) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:95:HIS:HB2 | 8 | 0.24 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD11 | 15 | 0.24 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD12 | 15 | 0.24 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD13 | 15 | 0.24 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD11 | 15 | 0.24 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD12 | 15 | 0.24 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD13 | 15 | 0.24 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD11 | 15 | 0.24 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD12 | 15 | 0.24 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD13 | 15 | 0.24 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HE1 | 12 | 0.24 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HE2 | 12 | 0.24 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HE1 | 12 | 0.24 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HE2 | 12 | 0.24 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HE1 | 12 | 0.24 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HE2 | 12 | 0.24 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HZ | 7 | 0.24 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HZ | 7 | 0.24 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HZ | 7 | 0.24 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HB2 | 1 | 0.24 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:HB2 | 1 | 0.24 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:HB2 | 1 | 0.24 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HB2 | 4 | 0.24 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:HB2 | 4 | 0.24 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:HB2 | 4 | 0.24 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HB2 | 6 | 0.24 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:HB2 | 6 | 0.24 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:HB2 | 6 | 0.24 |
| (2,1663) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:84:HIS:HB3 | 6 | 0.24 |
| (2,1663) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:84:HIS:HB3 | 11 | 0.24 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:85:PRO:HD2 | 11 | 0.24 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:85:PRO:HD2 | 11 | 0.24 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:85:PRO:HD2 | 11 | 0.24 |
| (2,1630) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:51:PHE:H | 6 | 0.24 |
| (2,1566) | 1:A:83:ASP:HB2 | 1:A:83:ASP:H | 4 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1566) | 1:A:83:ASP:HB2 | 1:A:83:ASP:H | 6 | 0.24 |
| (2,1548) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:81:ILE:HB | 4 | 0.24 |
| (2,1548) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:81:ILE:HB | 16 | 0.24 |
| (2,1543) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:51:PHE:HD1 | 2 | 0.24 |
| (2,1543) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:51:PHE:HD2 | 2 | 0.24 |
| (2,1540) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:95:HIS:HA | 15 | 0.24 |
| (2,1540) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:95:HIS:HA | 16 | 0.24 |
| (2,1499) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:78:PRO:HB3 | 8 | 0.24 |
| (2,1499) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:78:PRO:HB3 | 11 | 0.24 |
| (2,1493) | 1:A:79:THR:HB | 1:A:82:PHE:HB2 | 8 | 0.24 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG21 | 1 | 0.24 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG22 | 1 | 0.24 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG23 | 1 | 0.24 |
| (2,1445) | 1:A:88:HIS:HB2 | 1:A:88:HIS:H | 16 | 0.24 |
| (2,1444) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:88:HIS:H | 5 | 0.24 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG21 | 12 | 0.24 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG22 | 12 | 0.24 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG23 | 12 | 0.24 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG21 | 12 | 0.24 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG22 | 12 | 0.24 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG23 | 12 | 0.24 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG21 | 12 | 0.24 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG22 | 12 | 0.24 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG23 | 12 | 0.24 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HB | 2 | 0.24 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HB | 2 | 0.24 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HB | 2 | 0.24 |
| (2,1402) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:44:SER:HB3 | 10 | 0.24 |
| (2,1402) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:44:SER:HB3 | 10 | 0.24 |
| (2,1402) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:44:SER:HB3 | 10 | 0.24 |
| (2,1377) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:74:LEU:HD21 | 7 | 0.24 |
| (2,1377) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:74:LEU:HD22 | 7 | 0.24 |
| (2,1377) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:74:LEU:HD23 | 7 | 0.24 |
| (2,1299) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:67:THR:H | 6 | 0.24 |
| (2,1299) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:67:THR:H | 10 | 0.24 |
| (2,1293) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:65:ARG:H | 16 | 0.24 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 6 | 0.24 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 6 | 0.24 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 6 | 0.24 |
| (2,1272) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 13 | 0.24 |
| (2,1272) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 13 | 0.24 |
| (2,1272) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 13 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1272) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 14 | 0.24 |
| (2,1272) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 14 | 0.24 |
| (2,1272) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 14 | 0.24 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 4 | 0.24 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 4 | 0.24 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 4 | 0.24 |
| (2,1228) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:63:GLU:H | 12 | 0.24 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG11 | 1 | 0.24 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG12 | 1 | 0.24 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG13 | 1 | 0.24 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG11 | 13 | 0.24 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG12 | 13 | 0.24 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG13 | 13 | 0.24 |
| (2,1204) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:59:LEU:HA | 4 | 0.24 |
| (2,1195) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:63:GLU:HB3 | 1 | 0.24 |
| (2,1195) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:63:GLU:HB3 | 2 | 0.24 |
| (2,1195) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:63:GLU:HB3 | 5 | 0.24 |
| (2,1195) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:63:GLU:HB3 | 14 | 0.24 |
| (2,1185) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:H | 4 | 0.24 |
| (2,1157) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:60:THR:HB | 5 | 0.24 |
| (2,1157) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:60:THR:HB | 5 | 0.24 |
| (2,1157) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:60:THR:HB | 5 | 0.24 |
| (2,1096) | 1:A:56:ILE:HG12 | 1:A:64:LEU:HD11 | 9 | 0.24 |
| (2,1096) | 1:A:56:ILE:HG12 | 1:A:64:LEU:HD12 | 9 | 0.24 |
| (2,1096) | 1:A:56:ILE:HG12 | 1:A:64:LEU:HD13 | 9 | 0.24 |
| (2,1054) | 1:A:52:LYS:HG2 | 1:A:53:ASP:H | 2 | 0.24 |
| (2,1053) | 1:A:52:LYS:HG2 | 1:A:52:LYS:HA | 9 | 0.24 |
| (2,1047) | 1:A:52:LYS:HB2 | 1:A:53:ASP:H | 15 | 0.24 |
| (2,1030) | 1:A:51:PHE:HB2 | 1:A:81:ILE:HG13 | 2 | 0.24 |
| (2,1029) | 1:A:51:PHE:HB3 | 1:A:52:LYS:HG2 | 2 | 0.24 |
| (2,1007) | 1:A:39:HIS:HA | 1:A:39:HIS:HD2 | 10 | 0.24 |
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD21 | 11 | 0.24 |
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD22 | 11 | 0.24 |
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD23 | 11 | 0.24 |
| (1,94) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:68:LEU:HA | 7 | 0.24 |
| (1,80) | 1:A:86:THR:H | 1:A:85:PRO:HD2 | 3 | 0.24 |
| (1,561) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:21:GLN:HB2 | 15 | 0.24 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 3 | 0.24 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 3 | 0.24 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 3 | 0.24 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 14 | 0.24 |
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 14 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,560) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 14 | 0.24 |
| (1,56) | 1:A:60:THR:H | 1:A:59:LEU:HB2 | 11 | 0.24 |
| (1,532) | 1:A:93:HIS:H | 1:A:93:HIS:HD2 | 1 | 0.24 |
| (1,532) | 1:A:93:HIS:H | 1:A:93:HIS:HD2 | 10 | 0.24 |
| (1,478) | 1:A:68:LEU:H | 1:A:68:LEU:HB3 | 11 | 0.24 |
| (1,443) | 1:A:75:ASP:H | 1:A:74:LEU:HB2 | 10 | 0.24 |
| (1,416) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 14 | 0.24 |
| (1,416) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 14 | 0.24 |
| (1,416) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 14 | 0.24 |
| (1,38) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:74:LEU:H | 6 | 0.24 |
| (1,342) | 1:A:66:ASN:H | 1:A:66:ASN:HB2 | 9 | 0.24 |
| (1,34) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:72:THR:H | 5 | 0.24 |
| (1,34) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:72:THR:H | 11 | 0.24 |
| (1,309) | 1:A:56:ILE:H | 1:A:51:PHE:HB2 | 2 | 0.24 |
| (1,309) | 1:A:56:ILE:H | 1:A:51:PHE:HB2 | 4 | 0.24 |
| (1,309) | 1:A:56:ILE:H | 1:A:51:PHE:HB2 | 7 | 0.24 |
| (1,309) | 1:A:56:ILE:H | 1:A:51:PHE:HB2 | 10 | 0.24 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 3 | 0.24 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 3 | 0.24 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 3 | 0.24 |
| (1,286) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HB2 | 7 | 0.24 |
| (1,286) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HB2 | 12 | 0.24 |
| (1,275) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:82:PHE:H | 2 | 0.24 |
| (1,275) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:82:PHE:H | 7 | 0.24 |
| (1,275) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:82:PHE:H | 10 | 0.24 |
| (1,275) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:82:PHE:H | 14 | 0.24 |
| (1,275) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:82:PHE:H | 16 | 0.24 |
| (1,258) | 1:A:72:THR:H | 1:A:71:ASN:HB2 | 11 | 0.24 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD21 | 3 | 0.24 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD22 | 3 | 0.24 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD23 | 3 | 0.24 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD11 | 9 | 0.23 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD12 | 9 | 0.23 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD13 | 9 | 0.23 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD11 | 9 | 0.23 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD12 | 9 | 0.23 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD13 | 9 | 0.23 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD11 | 9 | 0.23 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD12 | 9 | 0.23 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD13 | 9 | 0.23 |
| (2,900) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:43:GLU:HB3 | 12 | 0.23 |
| (2,900) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:43:GLU:HB3 | 12 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,900) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:43:GLU:HB3 | 12 | 0.23 |
| (2,897) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:44:SER:HB3 | 7 | 0.23 |
| (2,897) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:44:SER:HB3 | 7 | 0.23 |
| (2,897) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:44:SER:HB3 | 7 | 0.23 |
| (2,897) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:44:SER:HB3 | 13 | 0.23 |
| (2,897) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:44:SER:HB3 | 13 | 0.23 |
| (2,897) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:44:SER:HB3 | 13 | 0.23 |
| (2,889) | 1:A:42:PRO:HD2 | 1:A:41:THR:HA | 9 | 0.23 |
| (2,872) | 1:A:42:PRO:HA | 1:A:30:ALA:HB1 | 2 | 0.23 |
| (2,872) | 1:A:42:PRO:HA | 1:A:30:ALA:HB2 | 2 | 0.23 |
| (2,872) | 1:A:42:PRO:HA | 1:A:30:ALA:HB3 | 2 | 0.23 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:33:THR:HG21 | 5 | 0.23 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:33:THR:HG22 | 5 | 0.23 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:33:THR:HG23 | 5 | 0.23 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:33:THR:HG21 | 5 | 0.23 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:33:THR:HG22 | 5 | 0.23 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:33:THR:HG23 | 5 | 0.23 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:33:THR:HG21 | 5 | 0.23 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:33:THR:HG22 | 5 | 0.23 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:33:THR:HG23 | 5 | 0.23 |
| (2,832) | 1:A:37:LEU:HB2 | 1:A:37:LEU:H | 1 | 0.23 |
| (2,832) | 1:A:37:LEU:HB2 | 1:A:37:LEU:H | 11 | 0.23 |
| (2,832) | 1:A:37:LEU:HB2 | 1:A:37:LEU:H | 13 | 0.23 |
| (2,831) | 1:A:37:LEU:HA | 1:A:37:LEU:HB3 | 2 | 0.23 |
| (2,831) | 1:A:37:LEU:HA | 1:A:37:LEU:HB3 | 5 | 0.23 |
| (2,831) | 1:A:37:LEU:HA | 1:A:37:LEU:HB3 | 6 | 0.23 |
| (2,831) | 1:A:37:LEU:HA | 1:A:37:LEU:HB3 | 9 | 0.23 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:64:LEU:H | 14 | 0.23 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:64:LEU:H | 14 | 0.23 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:64:LEU:H | 14 | 0.23 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:33:THR:HA | 7 | 0.23 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:33:THR:HA | 7 | 0.23 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:33:THR:HA | 7 | 0.23 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB1 | 9 | 0.23 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB2 | 9 | 0.23 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB3 | 9 | 0.23 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB1 | 16 | 0.23 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB2 | 16 | 0.23 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB3 | 16 | 0.23 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:34:ALA:HA | 12 | 0.23 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:34:ALA:HA | 12 | 0.23 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:34:ALA:HA | 12 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG21 | 1 | 0.23 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG22 | 1 | 0.23 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG23 | 1 | 0.23 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG21 | 1 | 0.23 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG22 | 1 | 0.23 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG23 | 1 | 0.23 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG21 | 1 | 0.23 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG22 | 1 | 0.23 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG23 | 1 | 0.23 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG21 | 3 | 0.23 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG22 | 3 | 0.23 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG23 | 3 | 0.23 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG21 | 3 | 0.23 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG22 | 3 | 0.23 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG23 | 3 | 0.23 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG21 | 3 | 0.23 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG22 | 3 | 0.23 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG23 | 3 | 0.23 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG21 | 4 | 0.23 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG22 | 4 | 0.23 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG23 | 4 | 0.23 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG21 | 4 | 0.23 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG22 | 4 | 0.23 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG23 | 4 | 0.23 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG21 | 4 | 0.23 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG22 | 4 | 0.23 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG23 | 4 | 0.23 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:29:VAL:HA | 9 | 0.23 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:29:VAL:HA | 9 | 0.23 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:29:VAL:HA | 9 | 0.23 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:29:VAL:HA | 10 | 0.23 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:29:VAL:HA | 10 | 0.23 |
| (2,563) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:29:VAL:HA | 10 | 0.23 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:64:LEU:HD11 | 12 | 0.23 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:64:LEU:HD12 | 12 | 0.23 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:64:LEU:HD13 | 12 | 0.23 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:64:LEU:HD11 | 12 | 0.23 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:64:LEU:HD12 | 12 | 0.23 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:64:LEU:HD13 | 12 | 0.23 |
| (2,533) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:25:LEU:HB2 | 4 | 0.23 |
| (2,533) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:25:LEU:HB2 | 10 | 0.23 |
| (2,528) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:35:THR:H | 13 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,511) | 1:A:23:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HA | 7 | 0.23 |
| (2,511) | 1:A:23:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HA | 8 | 0.23 |
| (2,483) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 3 | 0.23 |
| (2,477) | 1:A:25:LEU:HG | 1:A:25:LEU:H | 7 | 0.23 |
| (2,458) | 1:A:20:GLN:HB3 | 1:A:16:LEU:HB3 | 14 | 0.23 |
| (2,433) | 1:A:21:GLN:HG2 | 1:A:21:GLN:HA | 4 | 0.23 |
| (2,411) | 1:A:19:GLN:HB3 | 1:A:19:GLN:H | 14 | 0.23 |
| (2,388) | 1:A:45:ILE:HA | 1:A:46:SER:H | 4 | 0.23 |
| (2,388) | 1:A:45:ILE:HA | 1:A:46:SER:H | 6 | 0.23 |
| (2,385) | 1:A:18:PRO:HB3 | 1:A:18:PRO:HB2 | 1 | 0.23 |
| (2,385) | 1:A:18:PRO:HB3 | 1:A:18:PRO:HB2 | 2 | 0.23 |
| (2,385) | 1:A:18:PRO:HB3 | 1:A:18:PRO:HB2 | 3 | 0.23 |
| (2,385) | 1:A:18:PRO:HB3 | 1:A:18:PRO:HB2 | 4 | 0.23 |
| (2,385) | 1:A:18:PRO:HB3 | 1:A:18:PRO:HB2 | 5 | 0.23 |
| (2,385) | 1:A:18:PRO:HB3 | 1:A:18:PRO:HB2 | 7 | 0.23 |
| (2,385) | 1:A:18:PRO:HB3 | 1:A:18:PRO:HB2 | 8 | 0.23 |
| (2,385) | 1:A:18:PRO:HB3 | 1:A:18:PRO:HB2 | 9 | 0.23 |
| (2,385) | 1:A:18:PRO:HB3 | 1:A:18:PRO:HB2 | 10 | 0.23 |
| (2,385) | 1:A:18:PRO:HB3 | 1:A:18:PRO:HB2 | 11 | 0.23 |
| (2,385) | 1:A:18:PRO:HB3 | 1:A:18:PRO:HB2 | 12 | 0.23 |
| (2,385) | 1:A:18:PRO:HB3 | 1:A:18:PRO:HB2 | 13 | 0.23 |
| (2,385) | 1:A:18:PRO:HB3 | 1:A:18:PRO:HB2 | 14 | 0.23 |
| (2,385) | 1:A:18:PRO:HB3 | 1:A:18:PRO:HB2 | 15 | 0.23 |
| (2,385) | 1:A:18:PRO:HB3 | 1:A:18:PRO:HB2 | 16 | 0.23 |
| (2,33) | 1:A:84:HIS:HB2 | 1:A:84:HIS:HD2 | 6 | 0.23 |
| (2,325) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 5 | 0.23 |
| (2,325) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 5 | 0.23 |
| (2,325) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 5 | 0.23 |
| (2,325) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 13 | 0.23 |
| (2,325) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 13 | 0.23 |
| (2,325) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 13 | 0.23 |
| (2,31) | 1:A:39:HIS:HD2 | 1:A:37:LEU:HB3 | 9 | 0.23 |
| (2,31) | 1:A:39:HIS:HD2 | 1:A:37:LEU:HB3 | 15 | 0.23 |
| (2,298) | 1:A:94:LEU:HB2 | 1:A:94:LEU:H | 1 | 0.23 |
| (2,298) | 1:A:94:LEU:HB2 | 1:A:94:LEU:H | 5 | 0.23 |
| (2,298) | 1:A:94:LEU:HB2 | 1:A:94:LEU:H | 10 | 0.23 |
| (2,298) | 1:A:94:LEU:HB2 | 1:A:94:LEU:H | 16 | 0.23 |
| (2,279) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:12:ARG:HA | 16 | 0.23 |
| (2,269) | 1:A:12:ARG:HG2 | 1:A:13:LEU:H | 10 | 0.23 |
| (2,269) | 1:A:12:ARG:HG2 | 1:A:13:LEU:H | 13 | 0.23 |
| (2,220) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:10:ALA:HA | 10 | 0.23 |
| (2,220) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:10:ALA:HA | 10 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,220) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:10:ALA:HA | 10 | 0.23 |
| (2,220) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:10:ALA:HA | 16 | 0.23 |
| (2,220) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:10:ALA:HA | 16 | 0.23 |
| (2,220) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:10:ALA:HA | 16 | 0.23 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:61:ALA:HB1 | 2 | 0.23 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:61:ALA:HB2 | 2 | 0.23 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:61:ALA:HB3 | 2 | 0.23 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE2 | 1:A:61:ALA:HB1 | 2 | 0.23 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE2 | 1:A:61:ALA:HB2 | 2 | 0.23 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE2 | 1:A:61:ALA:HB3 | 2 | 0.23 |
| (2,1885) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:13:LEU:HA | 3 | 0.23 |
| (2,1881) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HG | 9 | 0.23 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:H | 15 | 0.23 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:H | 15 | 0.23 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:H | 15 | 0.23 |
| (2,1868) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:ASN:H | 7 | 0.23 |
| (2,1848) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:22:GLN:H | 4 | 0.23 |
| (2,1844) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:14:ASN:HB2 | 7 | 0.23 |
| (2,1819) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:8:ASP:HB2 | 5 | 0.23 |
| (2,1819) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:8:ASP:HB2 | 5 | 0.23 |
| (2,1819) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:8:ASP:HB2 | 5 | 0.23 |
| (2,18) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:95:HIS:HD2 | 5 | 0.23 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD21 | 1 | 0.23 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD22 | 1 | 0.23 |
| (2,1791) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:HD23 | 1 | 0.23 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD11 | 2 | 0.23 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD12 | 2 | 0.23 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD13 | 2 | 0.23 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HB2 | 13 | 0.23 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:HB2 | 13 | 0.23 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:HB2 | 13 | 0.23 |
| (2,1668) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 7 | 0.23 |
| (2,1668) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 7 | 0.23 |
| (2,1668) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 7 | 0.23 |
| (2,1663) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:84:HIS:HB3 | 5 | 0.23 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:85:PRO:HD2 | 6 | 0.23 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:85:PRO:HD2 | 6 | 0.23 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:85:PRO:HD2 | 6 | 0.23 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:85:PRO:HD2 | 12 | 0.23 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:85:PRO:HD2 | 12 | 0.23 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:85:PRO:HD2 | 12 | 0.23 |
| (2,1630) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:51:PHE:H | 14 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1602) | 1:A:86:THR:HB | 1:A:88:HIS:H | 5 | 0.23 |
| (2,1598) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HG2 | 1 | 0.23 |
| (2,1598) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HG2 | 2 | 0.23 |
| (2,1598) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HG2 | 3 | 0.23 |
| (2,1598) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HG2 | 4 | 0.23 |
| (2,1598) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HG2 | 5 | 0.23 |
| (2,1598) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HG2 | 6 | 0.23 |
| (2,1598) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HG2 | 7 | 0.23 |
| (2,1598) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HG2 | 8 | 0.23 |
| (2,1598) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HG2 | 9 | 0.23 |
| (2,1598) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HG2 | 10 | 0.23 |
| (2,1598) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HG2 | 11 | 0.23 |
| (2,1598) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HG2 | 12 | 0.23 |
| (2,1598) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HG2 | 13 | 0.23 |
| (2,1598) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HG2 | 14 | 0.23 |
| (2,1598) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HG2 | 15 | 0.23 |
| (2,1598) | 1:A:85:PRO:HG3 | 1:A:85:PRO:HG2 | 16 | 0.23 |
| (2,1569) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:84:HIS:H | 6 | 0.23 |
| (2,1562) | 1:A:82:PHE:HB2 | 1:A:82:PHE:H | 2 | 0.23 |
| (2,1562) | 1:A:82:PHE:HB2 | 1:A:82:PHE:H | 3 | 0.23 |
| (2,1562) | 1:A:82:PHE:HB2 | 1:A:82:PHE:H | 14 | 0.23 |
| (2,1548) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:81:ILE:HB | 2 | 0.23 |
| (2,1548) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:81:ILE:HB | 3 | 0.23 |
| (2,1548) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:81:ILE:HB | 6 | 0.23 |
| (2,1548) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:81:ILE:HB | 7 | 0.23 |
| (2,1548) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:81:ILE:HB | 12 | 0.23 |
| (2,1542) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:84:HIS:H | 9 | 0.23 |
| (2,1540) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:95:HIS:HA | 10 | 0.23 |
| (2,1534) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD21 | 11 | 0.23 |
| (2,1534) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD22 | 11 | 0.23 |
| (2,1534) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD23 | 11 | 0.23 |
| (2,1523) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:16:LEU:HA | 2 | 0.23 |
| (2,1523) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:16:LEU:HA | 8 | 0.23 |
| (2,1523) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:16:LEU:HA | 12 | 0.23 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:68:LEU:HB2 | 13 | 0.23 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:68:LEU:HB2 | 13 | 0.23 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:68:LEU:HB2 | 13 | 0.23 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG21 | 15 | 0.23 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG22 | 15 | 0.23 |
| (2,1488) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:HG23 | 15 | 0.23 |
| (2,1453) | 1:A:40:HIS:HA | 1:A:40:HIS:HB2 | 11 | 0.23 |
| (2,1444) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:88:HIS:H | 8 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1444) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:88:HIS:H | 15 | 0.23 |
| (2,1426) | 1:A:88:HIS:HD2 | 1:A:92:GLN:HG3 | 1 | 0.23 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG21 | 13 | 0.23 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG22 | 13 | 0.23 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG23 | 13 | 0.23 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG21 | 13 | 0.23 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG22 | 13 | 0.23 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG23 | 13 | 0.23 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG21 | 13 | 0.23 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG22 | 13 | 0.23 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG23 | 13 | 0.23 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HB | 11 | 0.23 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HB | 11 | 0.23 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HB | 11 | 0.23 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HB | 16 | 0.23 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HB | 16 | 0.23 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HB | 16 | 0.23 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD11 | 3 | 0.23 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD12 | 3 | 0.23 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD13 | 3 | 0.23 |
| (2,1339) | 1:A:69:THR:HA | 1:A:74:LEU:HB2 | 6 | 0.23 |
| (2,1334) | 1:A:69:THR:HA | 1:A:74:LEU:H | 11 | 0.23 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD11 | 10 | 0.23 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD12 | 10 | 0.23 |
| (2,1323) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HD13 | 10 | 0.23 |
| (2,1301) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:65:ARG:H | 3 | 0.23 |
| (2,1299) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:67:THR:H | 8 | 0.23 |
| (2,1299) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:67:THR:H | 14 | 0.23 |
| (2,1293) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:65:ARG:H | 13 | 0.23 |
| (2,1293) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:65:ARG:H | 15 | 0.23 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 5 | 0.23 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 5 | 0.23 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 5 | 0.23 |
| (2,1272) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 1 | 0.23 |
| (2,1272) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 1 | 0.23 |
| (2,1272) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 1 | 0.23 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD21 | 7 | 0.23 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD22 | 7 | 0.23 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD23 | 7 | 0.23 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 16 | 0.23 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 16 | 0.23 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 16 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 9 | 0.23 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 9 | 0.23 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 9 | 0.23 |
| (2,1219) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:60:THR:HG21 | 6 | 0.23 |
| (2,1219) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:60:THR:HG22 | 6 | 0.23 |
| (2,1219) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:60:THR:HG23 | 6 | 0.23 |
| (2,1195) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:63:GLU:HB3 | 8 | 0.23 |
| (2,1185) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:H | 7 | 0.23 |
| (2,1133) | 1:A:58:SER:HB3 | 1:A:59:LEU:HG | 5 | 0.23 |
| (2,1011) | 1:A:75:ASP:HA | 1:A:74:LEU:HG | 9 | 0.23 |
| (2,1007) | 1:A:39:HIS:HA | 1:A:39:HIS:HD2 | 7 | 0.23 |
| (2,1007) | 1:A:39:HIS:HA | 1:A:39:HIS:HD2 | 15 | 0.23 |
| (1,89) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:71:ASN:HB3 | 13 | 0.23 |
| (1,86) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:28:LEU:HD11 | 15 | 0.23 |
| (1,86) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:28:LEU:HD12 | 15 | 0.23 |
| (1,86) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:28:LEU:HD13 | 15 | 0.23 |
| (1,74) | 1:A:89:ALA:H | 1:A:88:HIS:H | 1 | 0.23 |
| (1,566) | 1:A:98:LEU:H | 1:A:98:LEU:HB3 | 15 | 0.23 |
| (1,516) | 1:A:82:PHE:H | 1:A:82:PHE:HB2 | 2 | 0.23 |
| (1,516) | 1:A:82:PHE:H | 1:A:82:PHE:HB2 | 3 | 0.23 |
| (1,516) | 1:A:82:PHE:H | 1:A:82:PHE:HB2 | 14 | 0.23 |
| (1,445) | 1:A:3:ALA:H | 1:A:3:ALA:HA | 7 | 0.23 |
| (1,409) | 1:A:4:SER:H | 1:A:4:SER:HB2 | 4 | 0.23 |
| (1,350) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HB3 | 13 | 0.23 |
| (1,34) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:72:THR:H | 7 | 0.23 |
| (1,309) | 1:A:56:ILE:H | 1:A:51:PHE:HB2 | 14 | 0.23 |
| (1,29) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:61:ALA:H | 9 | 0.23 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 9 | 0.23 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 9 | 0.23 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 9 | 0.23 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 10 | 0.23 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 10 | 0.23 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 10 | 0.23 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 13 | 0.23 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 13 | 0.23 |
| (1,287) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 13 | 0.23 |
| (1,275) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:82:PHE:H | 6 | 0.23 |
| (1,275) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:82:PHE:H | 8 | 0.23 |
| (1,275) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:82:PHE:H | 12 | 0.23 |
| (1,25) | 1:A:83:ASP:H | 1:A:84:HIS:H | 11 | 0.23 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG21 | 12 | 0.23 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG22 | 12 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG23 | 12 | 0.23 |
| (1,134) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:25:LEU:HB2 | 12 | 0.23 |
| (1,1) | 1:A:57:ASP:H | 1:A:60:THR:H | 1 | 0.23 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD11 | 8 | 0.22 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD12 | 8 | 0.22 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD13 | 8 | 0.22 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD11 | 8 | 0.22 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD12 | 8 | 0.22 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD13 | 8 | 0.22 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD11 | 8 | 0.22 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD12 | 8 | 0.22 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD13 | 8 | 0.22 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD11 | 12 | 0.22 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD12 | 12 | 0.22 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD13 | 12 | 0.22 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD11 | 12 | 0.22 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD12 | 12 | 0.22 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD13 | 12 | 0.22 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD11 | 12 | 0.22 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD12 | 12 | 0.22 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD13 | 12 | 0.22 |
| (2,976) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:50:ALA:H | 7 | 0.22 |
| (2,976) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:50:ALA:H | 10 | 0.22 |
| (2,976) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:50:ALA:H | 14 | 0.22 |
| (2,963) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:93:HIS:HA | 2 | 0.22 |
| (2,963) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:93:HIS:HA | 3 | 0.22 |
| (2,963) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:93:HIS:HA | 4 | 0.22 |
| (2,963) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:93:HIS:HA | 11 | 0.22 |
| (2,963) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:93:HIS:HA | 12 | 0.22 |
| (2,963) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:93:HIS:HA | 13 | 0.22 |
| (2,963) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:93:HIS:HA | 16 | 0.22 |
| (2,960) | 1:A:47:PRO:HD2 | 1:A:46:SER:HB3 | 1 | 0.22 |
| (2,96) | 1:A:4:SER:HB3 | 1:A:7:THR:HB | 2 | 0.22 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:40:HIS:HD2 | 1 | 0.22 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:40:HIS:HD2 | 1 | 0.22 |
| (2,901) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:40:HIS:HD2 | 1 | 0.22 |
| (2,876) | 1:A:42:PRO:HB2 | 1:A:43:GLU:H | 5 | 0.22 |
| (2,876) | 1:A:42:PRO:HB2 | 1:A:43:GLU:H | 6 | 0.22 |
| (2,870) | 1:A:42:PRO:HG2 | 1:A:42:PRO:HA | 5 | 0.22 |
| (2,857) | 1:A:37:LEU:HD21 | 1:A:54:LEU:H | 2 | 0.22 |
| (2,857) | 1:A:37:LEU:HD22 | 1:A:54:LEU:H | 2 | 0.22 |
| (2,857) | 1:A:37:LEU:HD23 | 1:A:54:LEU:H | 2 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,857) | 1:A:37:LEU:HD21 | 1:A:54:LEU:H | 12 | 0.22 |
| (2,857) | 1:A:37:LEU:HD22 | 1:A:54:LEU:H | 12 | 0.22 |
| (2,857) | 1:A:37:LEU:HD23 | 1:A:54:LEU:H | 12 | 0.22 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:74:LEU:H | 5 | 0.22 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:74:LEU:H | 5 | 0.22 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:74:LEU:H | 5 | 0.22 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:74:LEU:H | 8 | 0.22 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:74:LEU:H | 8 | 0.22 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:74:LEU:H | 8 | 0.22 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:74:LEU:H | 14 | 0.22 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:74:LEU:H | 14 | 0.22 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:74:LEU:H | 14 | 0.22 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:33:THR:HG21 | 11 | 0.22 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:33:THR:HG22 | 11 | 0.22 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:33:THR:HG23 | 11 | 0.22 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:33:THR:HG21 | 11 | 0.22 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:33:THR:HG22 | 11 | 0.22 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:33:THR:HG23 | 11 | 0.22 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:33:THR:HG21 | 11 | 0.22 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:33:THR:HG22 | 11 | 0.22 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:33:THR:HG23 | 11 | 0.22 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG21 | 3 | 0.22 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG22 | 3 | 0.22 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG23 | 3 | 0.22 |
| (2,832) | 1:A:37:LEU:HB2 | 1:A:37:LEU:H | 12 | 0.22 |
| (2,831) | 1:A:37:LEU:HA | 1:A:37:LEU:HB3 | 3 | 0.22 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:33:THR:HA | 2 | 0.22 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:33:THR:HA | 2 | 0.22 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:33:THR:HA | 2 | 0.22 |
| (2,785) | 1:A:27:THR:HB | 1:A:23:GLN:HB2 | 3 | 0.22 |
| (2,785) | 1:A:27:THR:HB | 1:A:23:GLN:HB2 | 7 | 0.22 |
| (2,785) | 1:A:27:THR:HB | 1:A:23:GLN:HB2 | 11 | 0.22 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:34:ALA:HA | 5 | 0.22 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:34:ALA:HA | 5 | 0.22 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:34:ALA:HA | 5 | 0.22 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:34:ALA:HA | 6 | 0.22 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:34:ALA:HA | 6 | 0.22 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:34:ALA:HA | 6 | 0.22 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HA | 2 | 0.22 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HA | 2 | 0.22 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HA | 2 | 0.22 |
| (2,7) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:71:ASN:HA | 6 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,7) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:71:ASN:HA | 6 | 0.22 |
| (2,7) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:71:ASN:HA | 6 | 0.22 |
| (2,682) | 1:A:62:LEU:HD11 | 1:A:78:PRO:HB2 | 1 | 0.22 |
| (2,682) | 1:A:62:LEU:HD12 | 1:A:78:PRO:HB2 | 1 | 0.22 |
| (2,682) | 1:A:62:LEU:HD13 | 1:A:78:PRO:HB2 | 1 | 0.22 |
| (2,612) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HB2 | 11 | 0.22 |
| (2,612) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HB2 | 13 | 0.22 |
| (2,571) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:ALA:H | 12 | 0.22 |
| (2,571) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:ALA:H | 14 | 0.22 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:64:LEU:HD11 | 3 | 0.22 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:64:LEU:HD12 | 3 | 0.22 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:64:LEU:HD13 | 3 | 0.22 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:64:LEU:HD11 | 3 | 0.22 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:64:LEU:HD12 | 3 | 0.22 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:64:LEU:HD13 | 3 | 0.22 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:64:LEU:HD11 | 13 | 0.22 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:64:LEU:HD12 | 13 | 0.22 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:64:LEU:HD13 | 13 | 0.22 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:64:LEU:HD11 | 13 | 0.22 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:64:LEU:HD12 | 13 | 0.22 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:64:LEU:HD13 | 13 | 0.22 |
| (2,533) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:25:LEU:HB2 | 16 | 0.22 |
| (2,528) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:35:THR:H | 3 | 0.22 |
| (2,528) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:35:THR:H | 4 | 0.22 |
| (2,528) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:35:THR:H | 7 | 0.22 |
| (2,528) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:35:THR:H | 15 | 0.22 |
| (2,525) | 1:A:96:THR:HB | 1:A:96:THR:H | 3 | 0.22 |
| (2,525) | 1:A:96:THR:HB | 1:A:96:THR:H | 9 | 0.22 |
| (2,525) | 1:A:96:THR:HB | 1:A:96:THR:H | 15 | 0.22 |
| (2,52) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:85:PRO:HA | 8 | 0.22 |
| (2,52) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:85:PRO:HA | 8 | 0.22 |
| (2,52) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:85:PRO:HA | 13 | 0.22 |
| (2,52) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:85:PRO:HA | 13 | 0.22 |
| (2,506) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:24:THR:H | 2 | 0.22 |
| (2,492) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:19:GLN:HA | 4 | 0.22 |
| (2,483) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 9 | 0.22 |
| (2,477) | 1:A:25:LEU:HG | 1:A:25:LEU:H | 6 | 0.22 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:51:PHE:HD1 | 16 | 0.22 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:51:PHE:HD2 | 16 | 0.22 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:51:PHE:HD1 | 16 | 0.22 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:51:PHE:HD2 | 16 | 0.22 |
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:51:PHE:HD1 | 16 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,47) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:51:PHE:HD2 | 16 | 0.22 |
| (2,458) | 1:A:20:GLN:HB3 | 1:A:16:LEU:HB3 | 10 | 0.22 |
| (2,458) | 1:A:20:GLN:HB3 | 1:A:16:LEU:HB3 | 16 | 0.22 |
| (2,435) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:20:GLN:HA | 14 | 0.22 |
| (2,411) | 1:A:19:GLN:HB3 | 1:A:19:GLN:H | 9 | 0.22 |
| (2,403) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:20:GLN:H | 2 | 0.22 |
| (2,401) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:23:GLN:H | 1 | 0.22 |
| (2,388) | 1:A:45:ILE:HA | 1:A:46:SER:H | 12 | 0.22 |
| (2,388) | 1:A:45:ILE:HA | 1:A:46:SER:H | 13 | 0.22 |
| (2,383) | 1:A:18:PRO:HB3 | 1:A:18:PRO:HG3 | 11 | 0.22 |
| (2,361) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:17:SER:H | 7 | 0.22 |
| (2,361) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:17:SER:H | 7 | 0.22 |
| (2,361) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:17:SER:H | 7 | 0.22 |
| (2,33) | 1:A:84:HIS:HB2 | 1:A:84:HIS:HD2 | 4 | 0.22 |
| (2,325) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 2 | 0.22 |
| (2,325) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 2 | 0.22 |
| (2,325) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 2 | 0.22 |
| (2,325) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 6 | 0.22 |
| (2,325) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 6 | 0.22 |
| (2,325) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 6 | 0.22 |
| (2,298) | 1:A:94:LEU:HB2 | 1:A:94:LEU:H | 9 | 0.22 |
| (2,279) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:12:ARG:HA | 12 | 0.22 |
| (2,269) | 1:A:12:ARG:HG2 | 1:A:13:LEU:H | 11 | 0.22 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD11 | 12 | 0.22 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD12 | 12 | 0.22 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD13 | 12 | 0.22 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD11 | 12 | 0.22 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD12 | 12 | 0.22 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD13 | 12 | 0.22 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD11 | 12 | 0.22 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD12 | 12 | 0.22 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD13 | 12 | 0.22 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HB2 | 3 | 0.22 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HB2 | 3 | 0.22 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HB2 | 3 | 0.22 |
| (2,201) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HB3 | 7 | 0.22 |
| (2,198) | 1:A:9:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD21 | 4 | 0.22 |
| (2,198) | 1:A:9:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD22 | 4 | 0.22 |
| (2,198) | 1:A:9:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD23 | 4 | 0.22 |
| (2,198) | 1:A:9:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD21 | 12 | 0.22 |
| (2,198) | 1:A:9:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD22 | 12 | 0.22 |
| (2,198) | 1:A:9:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD23 | 12 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HB3 | 14 | 0.22 |
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HB3 | 14 | 0.22 |
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HB3 | 14 | 0.22 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:61:ALA:HB1 | 10 | 0.22 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:61:ALA:HB2 | 10 | 0.22 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:61:ALA:HB3 | 10 | 0.22 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE2 | 1:A:61:ALA:HB1 | 10 | 0.22 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE2 | 1:A:61:ALA:HB2 | 10 | 0.22 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE2 | 1:A:61:ALA:HB3 | 10 | 0.22 |
| (2,1885) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:13:LEU:HA | 5 | 0.22 |
| (2,1885) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:13:LEU:HA | 10 | 0.22 |
| (2,1885) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:13:LEU:HA | 15 | 0.22 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:H | 11 | 0.22 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:H | 11 | 0.22 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:H | 11 | 0.22 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:H | 16 | 0.22 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:H | 16 | 0.22 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:H | 16 | 0.22 |
| (2,1850) | 1:A:70:HIS:HD2 | 1:A:70:HIS:HB3 | 12 | 0.22 |
| (2,1803) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:100:GLN:H | 9 | 0.22 |
| (2,18) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:95:HIS:HD2 | 1 | 0.22 |
| (2,18) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:95:HIS:HD2 | 3 | 0.22 |
| (2,18) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:95:HIS:HD2 | 4 | 0.22 |
| (2,1789) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:H | 14 | 0.22 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD11 | 8 | 0.22 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD12 | 8 | 0.22 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD13 | 8 | 0.22 |
| (2,1726) | 1:A:92:GLN:HG2 | 1:A:91:THR:HG21 | 9 | 0.22 |
| (2,1726) | 1:A:92:GLN:HG2 | 1:A:91:THR:HG22 | 9 | 0.22 |
| (2,1726) | 1:A:92:GLN:HG2 | 1:A:91:THR:HG23 | 9 | 0.22 |
| (2,1714) | 1:A:92:GLN:HG2 | 1:A:92:GLN:HA | 11 | 0.22 |
| (2,17) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:95:HIS:HB2 | 3 | 0.22 |
| (2,17) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:95:HIS:HB2 | 9 | 0.22 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HB2 | 15 | 0.22 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:HB2 | 15 | 0.22 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:HB2 | 15 | 0.22 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HB2 | 16 | 0.22 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:HB2 | 16 | 0.22 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:HB2 | 16 | 0.22 |
| (2,1656) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:51:PHE:HE1 | 9 | 0.22 |
| (2,1656) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:51:PHE:HE2 | 9 | 0.22 |
| (2,1656) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:51:PHE:HE1 | 9 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1656) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:51:PHE:HE2 | 9 | 0.22 |
| (2,1656) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:51:PHE:HE1 | 9 | 0.22 |
| (2,1656) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:51:PHE:HE2 | 9 | 0.22 |
| (2,1569) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:84:HIS:H | 11 | 0.22 |
| (2,1562) | 1:A:82:PHE:HB2 | 1:A:82:PHE:H | 5 | 0.22 |
| (2,1560) | 1:A:82:PHE:HB2 | 1:A:83:ASP:H | 4 | 0.22 |
| (2,156) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:71:ASN:HD22 | 9 | 0.22 |
| (2,1548) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:81:ILE:HB | 5 | 0.22 |
| (2,1548) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:81:ILE:HB | 10 | 0.22 |
| (2,1548) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:81:ILE:HB | 11 | 0.22 |
| (2,1548) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:81:ILE:HB | 13 | 0.22 |
| (2,1548) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:81:ILE:HB | 14 | 0.22 |
| (2,1548) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:81:ILE:HB | 15 | 0.22 |
| (2,1544) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:84:HIS:HB2 | 8 | 0.22 |
| (2,1543) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:51:PHE:HD1 | 4 | 0.22 |
| (2,1543) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:51:PHE:HD2 | 4 | 0.22 |
| (2,1540) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:95:HIS:HA | 3 | 0.22 |
| (2,1523) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:16:LEU:HA | 1 | 0.22 |
| (2,1523) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:16:LEU:HA | 4 | 0.22 |
| (2,1523) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:16:LEU:HA | 5 | 0.22 |
| (2,1523) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:16:LEU:HA | 7 | 0.22 |
| (2,1523) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:16:LEU:HA | 10 | 0.22 |
| (2,1523) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:16:LEU:HA | 13 | 0.22 |
| (2,1523) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:16:LEU:HA | 14 | 0.22 |
| (2,1523) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:16:LEU:HA | 15 | 0.22 |
| (2,1523) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:16:LEU:HA | 16 | 0.22 |
| (2,1481) | 1:A:78:PRO:HA | 1:A:80:LEU:H | 9 | 0.22 |
| (2,1445) | 1:A:88:HIS:HB2 | 1:A:88:HIS:H | 4 | 0.22 |
| (2,1445) | 1:A:88:HIS:HB2 | 1:A:88:HIS:H | 11 | 0.22 |
| (2,1445) | 1:A:88:HIS:HB2 | 1:A:88:HIS:H | 14 | 0.22 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG21 | 4 | 0.22 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG22 | 4 | 0.22 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG23 | 4 | 0.22 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG21 | 4 | 0.22 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG22 | 4 | 0.22 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG23 | 4 | 0.22 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG21 | 4 | 0.22 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG22 | 4 | 0.22 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG23 | 4 | 0.22 |
| (2,1402) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:44:SER:HB3 | 14 | 0.22 |
| (2,1402) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:44:SER:HB3 | 14 | 0.22 |
| (2,1402) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:44:SER:HB3 | 14 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1402) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:44:SER:HB3 | 16 | 0.22 |
| (2,1402) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:44:SER:HB3 | 16 | 0.22 |
| (2,1402) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:44:SER:HB3 | 16 | 0.22 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD11 | 5 | 0.22 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD12 | 5 | 0.22 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD13 | 5 | 0.22 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD11 | 10 | 0.22 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD12 | 10 | 0.22 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD13 | 10 | 0.22 |
| (2,1377) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:74:LEU:HD21 | 13 | 0.22 |
| (2,1377) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:74:LEU:HD22 | 13 | 0.22 |
| (2,1377) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:74:LEU:HD23 | 13 | 0.22 |
| (2,1301) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:65:ARG:H | 13 | 0.22 |
| (2,1299) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:67:THR:H | 15 | 0.22 |
| (2,1293) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:65:ARG:H | 7 | 0.22 |
| (2,1272) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 5 | 0.22 |
| (2,1272) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 5 | 0.22 |
| (2,1272) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 5 | 0.22 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD21 | 2 | 0.22 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD22 | 2 | 0.22 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD23 | 2 | 0.22 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD21 | 11 | 0.22 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD22 | 11 | 0.22 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD23 | 11 | 0.22 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD21 | 12 | 0.22 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD22 | 12 | 0.22 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD23 | 12 | 0.22 |
| (2,1188) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:63:GLU:H | 3 | 0.22 |
| (2,1185) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:H | 16 | 0.22 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB1 | 1:A:64:LEU:HB3 | 2 | 0.22 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB2 | 1:A:64:LEU:HB3 | 2 | 0.22 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB3 | 1:A:64:LEU:HB3 | 2 | 0.22 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB1 | 1:A:64:LEU:HB3 | 10 | 0.22 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB2 | 1:A:64:LEU:HB3 | 10 | 0.22 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB3 | 1:A:64:LEU:HB3 | 10 | 0.22 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB1 | 1:A:64:LEU:HB3 | 14 | 0.22 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB2 | 1:A:64:LEU:HB3 | 14 | 0.22 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB3 | 1:A:64:LEU:HB3 | 14 | 0.22 |
| (2,1135) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:58:SER:HA | 4 | 0.22 |
| (2,1135) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:58:SER:HA | 7 | 0.22 |
| (2,1135) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:58:SER:HA | 8 | 0.22 |
| (2,111) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:4:SER:HB3 | 16 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,111) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:4:SER:HB3 | 16 | 0.22 |
| (2,111) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:4:SER:HB3 | 16 | 0.22 |
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD21 | 12 | 0.22 |
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD22 | 12 | 0.22 |
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD23 | 12 | 0.22 |
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD21 | 13 | 0.22 |
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD22 | 13 | 0.22 |
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD23 | 13 | 0.22 |
| (1,95) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:71:ASN:HA | 9 | 0.22 |
| (1,80) | 1:A:86:THR:H | 1:A:85:PRO:HD2 | 11 | 0.22 |
| (1,74) | 1:A:89:ALA:H | 1:A:88:HIS:H | 7 | 0.22 |
| (1,74) | 1:A:89:ALA:H | 1:A:88:HIS:H | 16 | 0.22 |
| (1,602) | 1:A:57:ASP:H | 1:A:57:ASP:HB3 | 16 | 0.22 |
| (1,566) | 1:A:98:LEU:H | 1:A:98:LEU:HB3 | 10 | 0.22 |
| (1,532) | 1:A:93:HIS:H | 1:A:93:HIS:HD2 | 8 | 0.22 |
| (1,516) | 1:A:82:PHE:H | 1:A:82:PHE:HB2 | 5 | 0.22 |
| (1,445) | 1:A:3:ALA:H | 1:A:3:ALA:HA | 10 | 0.22 |
| (1,445) | 1:A:3:ALA:H | 1:A:3:ALA:HA | 14 | 0.22 |
| (1,443) | 1:A:75:ASP:H | 1:A:74:LEU:HB2 | 16 | 0.22 |
| (1,44) | 1:A:79:THR:H | 1:A:78:PRO:HA | 16 | 0.22 |
| (1,416) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 8 | 0.22 |
| (1,416) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 8 | 0.22 |
| (1,416) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 8 | 0.22 |
| (1,342) | 1:A:66:ASN:H | 1:A:66:ASN:HB2 | 1 | 0.22 |
| (1,34) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:72:THR:H | 4 | 0.22 |
| (1,34) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:72:THR:H | 8 | 0.22 |
| (1,29) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:61:ALA:H | 2 | 0.22 |
| (1,286) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HB2 | 6 | 0.22 |
| (1,286) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HB2 | 15 | 0.22 |
| (1,275) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:82:PHE:H | 4 | 0.22 |
| (1,25) | 1:A:83:ASP:H | 1:A:84:HIS:H | 6 | 0.22 |
| (1,248) | 1:A:99:THR:H | 1:A:98:LEU:HB3 | 3 | 0.22 |
| (1,239) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG13 | 6 | 0.22 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG21 | 16 | 0.22 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG22 | 16 | 0.22 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG23 | 16 | 0.22 |
| (1,134) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:25:LEU:HB2 | 9 | 0.22 |
| (1,134) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:25:LEU:HB2 | 16 | 0.22 |
| (1,110) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:52:LYS:HG3 | 4 | 0.22 |
| (1,110) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:52:LYS:HG3 | 5 | 0.22 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD11 | 14 | 0.21 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD12 | 14 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD13 | 14 | 0.21 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD11 | 14 | 0.21 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD12 | 14 | 0.21 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD13 | 14 | 0.21 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD11 | 14 | 0.21 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD12 | 14 | 0.21 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD13 | 14 | 0.21 |
| (2,963) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:93:HIS:HA | 6 | 0.21 |
| (2,963) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:93:HIS:HA | 9 | 0.21 |
| (2,963) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:93:HIS:HA | 15 | 0.21 |
| (2,896) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:42:PRO:HD2 | 1 | 0.21 |
| (2,896) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:42:PRO:HD2 | 1 | 0.21 |
| (2,896) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:42:PRO:HD2 | 1 | 0.21 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:74:LEU:H | 7 | 0.21 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:74:LEU:H | 7 | 0.21 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:74:LEU:H | 7 | 0.21 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:36:VAL:H | 2 | 0.21 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:36:VAL:H | 2 | 0.21 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:36:VAL:H | 2 | 0.21 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:33:THR:HA | 11 | 0.21 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:33:THR:HA | 11 | 0.21 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:33:THR:HA | 11 | 0.21 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:33:THR:HA | 16 | 0.21 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:33:THR:HA | 16 | 0.21 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:33:THR:HA | 16 | 0.21 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG21 | 1 | 0.21 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG22 | 1 | 0.21 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG23 | 1 | 0.21 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:34:ALA:HA | 3 | 0.21 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:34:ALA:HA | 3 | 0.21 |
| (2,716) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:34:ALA:HA | 3 | 0.21 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HA | 8 | 0.21 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HA | 8 | 0.21 |
| (2,71) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HA | 8 | 0.21 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB1 | 13 | 0.21 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB2 | 13 | 0.21 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB3 | 13 | 0.21 |
| (2,612) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HB2 | 1 | 0.21 |
| (2,612) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HB2 | 2 | 0.21 |
| (2,612) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HB2 | 3 | 0.21 |
| (2,612) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HB2 | 4 | 0.21 |
| (2,612) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HB2 | 5 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,612) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HB2 | 6 | 0.21 |
| (2,612) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HB2 | 7 | 0.21 |
| (2,612) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HB2 | 8 | 0.21 |
| (2,612) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HB2 | 9 | 0.21 |
| (2,612) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HB2 | 10 | 0.21 |
| (2,612) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HB2 | 12 | 0.21 |
| (2,612) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HB2 | 14 | 0.21 |
| (2,612) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HB2 | 15 | 0.21 |
| (2,612) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:28:LEU:HB2 | 16 | 0.21 |
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG21 | 7 | 0.21 |
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG22 | 7 | 0.21 |
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG23 | 7 | 0.21 |
| (2,571) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:ALA:H | 7 | 0.21 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG21 | 12 | 0.21 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG22 | 12 | 0.21 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG23 | 12 | 0.21 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG21 | 12 | 0.21 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG22 | 12 | 0.21 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG23 | 12 | 0.21 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG21 | 12 | 0.21 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG22 | 12 | 0.21 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG23 | 12 | 0.21 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:71:ASN:HB3 | 12 | 0.21 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:71:ASN:HB3 | 12 | 0.21 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:71:ASN:HB3 | 12 | 0.21 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:71:ASN:HB3 | 16 | 0.21 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:71:ASN:HB3 | 16 | 0.21 |
| (2,564) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:71:ASN:HB3 | 16 | 0.21 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:64:LEU:HD11 | 1 | 0.21 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:64:LEU:HD12 | 1 | 0.21 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:64:LEU:HD13 | 1 | 0.21 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:64:LEU:HD11 | 1 | 0.21 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:64:LEU:HD12 | 1 | 0.21 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:64:LEU:HD13 | 1 | 0.21 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:64:LEU:HD11 | 10 | 0.21 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:64:LEU:HD12 | 10 | 0.21 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:64:LEU:HD13 | 10 | 0.21 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:64:LEU:HD11 | 10 | 0.21 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:64:LEU:HD12 | 10 | 0.21 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:64:LEU:HD13 | 10 | 0.21 |
| (2,528) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:35:THR:H | 1 | 0.21 |
| (2,528) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:35:THR:H | 9 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,528) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:35:THR:H | 14 | 0.21 |
| (2,528) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:35:THR:H | 16 | 0.21 |
| (2,527) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:24:THR:H | 14 | 0.21 |
| (2,525) | 1:A:96:THR:HB | 1:A:96:THR:H | 2 | 0.21 |
| (2,525) | 1:A:96:THR:HB | 1:A:96:THR:H | 4 | 0.21 |
| (2,525) | 1:A:96:THR:HB | 1:A:96:THR:H | 10 | 0.21 |
| (2,52) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:85:PRO:HA | 3 | 0.21 |
| (2,52) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:85:PRO:HA | 3 | 0.21 |
| (2,52) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:85:PRO:HA | 4 | 0.21 |
| (2,52) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:85:PRO:HA | 4 | 0.21 |
| (2,52) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:85:PRO:HA | 16 | 0.21 |
| (2,52) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:85:PRO:HA | 16 | 0.21 |
| (2,511) | 1:A:23:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HA | 10 | 0.21 |
| (2,506) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:24:THR:H | 6 | 0.21 |
| (2,506) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:24:THR:H | 12 | 0.21 |
| (2,492) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:19:GLN:HA | 6 | 0.21 |
| (2,490) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:22:GLN:HA | 9 | 0.21 |
| (2,489) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:22:GLN:HA | 1 | 0.21 |
| (2,489) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:22:GLN:HA | 15 | 0.21 |
| (2,464) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HA | 1 | 0.21 |
| (2,458) | 1:A:20:GLN:HB3 | 1:A:16:LEU:HB3 | 11 | 0.21 |
| (2,435) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:20:GLN:HA | 6 | 0.21 |
| (2,411) | 1:A:19:GLN:HB3 | 1:A:19:GLN:H | 4 | 0.21 |
| (2,411) | 1:A:19:GLN:HB3 | 1:A:19:GLN:H | 15 | 0.21 |
| (2,403) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:20:GLN:H | 16 | 0.21 |
| (2,388) | 1:A:45:ILE:HA | 1:A:46:SER:H | 2 | 0.21 |
| (2,388) | 1:A:45:ILE:HA | 1:A:46:SER:H | 11 | 0.21 |
| (2,34) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:51:PHE:HZ | 15 | 0.21 |
| (2,33) | 1:A:84:HIS:HB2 | 1:A:84:HIS:HD2 | 10 | 0.21 |
| (2,33) | 1:A:84:HIS:HB2 | 1:A:84:HIS:HD2 | 12 | 0.21 |
| (2,33) | 1:A:84:HIS:HB2 | 1:A:84:HIS:HD2 | 13 | 0.21 |
| (2,31) | 1:A:39:HIS:HD2 | 1:A:37:LEU:HB3 | 10 | 0.21 |
| (2,298) | 1:A:94:LEU:HB2 | 1:A:94:LEU:H | 3 | 0.21 |
| (2,298) | 1:A:94:LEU:HB2 | 1:A:94:LEU:H | 11 | 0.21 |
| (2,279) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:12:ARG:HA | 9 | 0.21 |
| (2,269) | 1:A:12:ARG:HG2 | 1:A:13:LEU:H | 3 | 0.21 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD11 | 14 | 0.21 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD12 | 14 | 0.21 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD13 | 14 | 0.21 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD11 | 14 | 0.21 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD12 | 14 | 0.21 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD13 | 14 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD11 | 14 | 0.21 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD12 | 14 | 0.21 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD13 | 14 | 0.21 |
| (2,220) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:10:ALA:HA | 3 | 0.21 |
| (2,220) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:10:ALA:HA | 3 | 0.21 |
| (2,220) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:10:ALA:HA | 3 | 0.21 |
| (2,220) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:10:ALA:HA | 4 | 0.21 |
| (2,220) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:10:ALA:HA | 4 | 0.21 |
| (2,220) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:10:ALA:HA | 4 | 0.21 |
| (2,201) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HB3 | 2 | 0.21 |
| (2,201) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HB3 | 5 | 0.21 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:61:ALA:HB1 | 14 | 0.21 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:61:ALA:HB2 | 14 | 0.21 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:61:ALA:HB3 | 14 | 0.21 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE2 | 1:A:61:ALA:HB1 | 14 | 0.21 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE2 | 1:A:61:ALA:HB2 | 14 | 0.21 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE2 | 1:A:61:ALA:HB3 | 14 | 0.21 |
| (2,1885) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:13:LEU:HA | 2 | 0.21 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:H | 2 | 0.21 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:H | 2 | 0.21 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:H | 2 | 0.21 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:H | 3 | 0.21 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:H | 3 | 0.21 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:H | 3 | 0.21 |
| (2,1835) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:95:HIS:HD2 | 14 | 0.21 |
| (2,1835) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:95:HIS:HD2 | 14 | 0.21 |
| (2,1835) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:95:HIS:HD2 | 14 | 0.21 |
| (2,1803) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:100:GLN:H | 3 | 0.21 |
| (2,1803) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:100:GLN:H | 16 | 0.21 |
| (2,18) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:95:HIS:HD2 | 15 | 0.21 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD11 | 11 | 0.21 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD12 | 11 | 0.21 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD13 | 11 | 0.21 |
| (2,1722) | 1:A:92:GLN:HG3 | 1:A:92:GLN:H | 1 | 0.21 |
| (2,1720) | 1:A:92:GLN:HG3 | 1:A:89:ALA:HA | 2 | 0.21 |
| (2,1714) | 1:A:92:GLN:HG2 | 1:A:92:GLN:HA | 16 | 0.21 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:85:PRO:HD2 | 3 | 0.21 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:85:PRO:HD2 | 3 | 0.21 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:85:PRO:HD2 | 3 | 0.21 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:85:PRO:HD2 | 13 | 0.21 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:85:PRO:HD2 | 13 | 0.21 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:85:PRO:HD2 | 13 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1630) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:51:PHE:H | 5 | 0.21 |
| (2,1630) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:51:PHE:H | 11 | 0.21 |
| (2,1566) | 1:A:83:ASP:HB2 | 1:A:83:ASP:H | 14 | 0.21 |
| (2,1562) | 1:A:82:PHE:HB2 | 1:A:82:PHE:H | 6 | 0.21 |
| (2,1562) | 1:A:82:PHE:HB2 | 1:A:82:PHE:H | 8 | 0.21 |
| (2,1562) | 1:A:82:PHE:HB2 | 1:A:82:PHE:H | 12 | 0.21 |
| (2,1560) | 1:A:82:PHE:HB2 | 1:A:83:ASP:H | 6 | 0.21 |
| (2,1548) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:81:ILE:HB | 1 | 0.21 |
| (2,1543) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:51:PHE:HD1 | 10 | 0.21 |
| (2,1543) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:51:PHE:HD2 | 10 | 0.21 |
| (2,1542) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:84:HIS:H | 2 | 0.21 |
| (2,1542) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:84:HIS:H | 10 | 0.21 |
| (2,1540) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:95:HIS:HA | 4 | 0.21 |
| (2,1540) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:95:HIS:HA | 13 | 0.21 |
| (2,1534) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD21 | 8 | 0.21 |
| (2,1534) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD22 | 8 | 0.21 |
| (2,1534) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD23 | 8 | 0.21 |
| (2,1523) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:16:LEU:HA | 3 | 0.21 |
| (2,1523) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:16:LEU:HA | 6 | 0.21 |
| (2,1523) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:16:LEU:HA | 9 | 0.21 |
| (2,1493) | 1:A:79:THR:HB | 1:A:82:PHE:HB2 | 3 | 0.21 |
| (2,1453) | 1:A:40:HIS:HA | 1:A:40:HIS:HB2 | 7 | 0.21 |
| (2,1445) | 1:A:88:HIS:HB2 | 1:A:88:HIS:H | 3 | 0.21 |
| (2,1445) | 1:A:88:HIS:HB2 | 1:A:88:HIS:H | 13 | 0.21 |
| (2,1433) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:70:HIS:HD2 | 16 | 0.21 |
| (2,1426) | 1:A:88:HIS:HD2 | 1:A:92:GLN:HG3 | 10 | 0.21 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG21 | 5 | 0.21 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG22 | 5 | 0.21 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG23 | 5 | 0.21 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG21 | 5 | 0.21 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG22 | 5 | 0.21 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG23 | 5 | 0.21 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG21 | 5 | 0.21 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG22 | 5 | 0.21 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG23 | 5 | 0.21 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HB | 3 | 0.21 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HB | 3 | 0.21 |
| (2,1412) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HB | 3 | 0.21 |
| (2,141) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:43:GLU:HG2 | 1 | 0.21 |
| (2,141) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:43:GLU:HG2 | 1 | 0.21 |
| (2,141) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:43:GLU:HG2 | 1 | 0.21 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD11 | 12 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD12 | 12 | 0.21 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD13 | 12 | 0.21 |
| (2,1367) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:98:LEU:H | 1 | 0.21 |
| (2,1367) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:98:LEU:H | 12 | 0.21 |
| (2,1301) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:65:ARG:H | 10 | 0.21 |
| (2,1299) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:67:THR:H | 2 | 0.21 |
| (2,1299) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:67:THR:H | 12 | 0.21 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 9 | 0.21 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 9 | 0.21 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 9 | 0.21 |
| (2,1272) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 4 | 0.21 |
| (2,1272) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 4 | 0.21 |
| (2,1272) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 4 | 0.21 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD21 | 4 | 0.21 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD22 | 4 | 0.21 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD23 | 4 | 0.21 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD21 | 10 | 0.21 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD22 | 10 | 0.21 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD23 | 10 | 0.21 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD21 | 13 | 0.21 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD22 | 13 | 0.21 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD23 | 13 | 0.21 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD21 | 16 | 0.21 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD22 | 16 | 0.21 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD23 | 16 | 0.21 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 15 | 0.21 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 15 | 0.21 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 15 | 0.21 |
| (2,1224) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:63:GLU:HA | 6 | 0.21 |
| (2,1224) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:63:GLU:HA | 12 | 0.21 |
| (2,1224) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:63:GLU:HA | 14 | 0.21 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG11 | 7 | 0.21 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG12 | 7 | 0.21 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG13 | 7 | 0.21 |
| (2,1185) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:H | 2 | 0.21 |
| (2,1185) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:H | 9 | 0.21 |
| (2,1185) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:H | 11 | 0.21 |
| (2,1185) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:H | 12 | 0.21 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB1 | 1:A:64:LEU:HB3 | 9 | 0.21 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB2 | 1:A:64:LEU:HB3 | 9 | 0.21 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB3 | 1:A:64:LEU:HB3 | 9 | 0.21 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ALA:H | 15 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ALA:H | 15 | 0.21 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ALA:H | 15 | 0.21 |
| (2,1157) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:60:THR:HB | 7 | 0.21 |
| (2,1157) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:60:THR:HB | 7 | 0.21 |
| (2,1157) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:60:THR:HB | 7 | 0.21 |
| (2,1157) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:60:THR:HB | 10 | 0.21 |
| (2,1157) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:60:THR:HB | 10 | 0.21 |
| (2,1157) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:60:THR:HB | 10 | 0.21 |
| (2,1157) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:60:THR:HB | 15 | 0.21 |
| (2,1157) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:60:THR:HB | 15 | 0.21 |
| (2,1157) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:60:THR:HB | 15 | 0.21 |
| (2,1135) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:58:SER:HA | 14 | 0.21 |
| (2,1133) | 1:A:58:SER:HB3 | 1:A:59:LEU:HG | 2 | 0.21 |
| (2,1054) | 1:A:52:LYS:HG2 | 1:A:53:ASP:H | 9 | 0.21 |
| (2,1054) | 1:A:52:LYS:HG2 | 1:A:53:ASP:H | 11 | 0.21 |
| (2,1054) | 1:A:52:LYS:HG2 | 1:A:53:ASP:H | 16 | 0.21 |
| (2,1053) | 1:A:52:LYS:HG2 | 1:A:52:LYS:HA | 16 | 0.21 |
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD21 | 2 | 0.21 |
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD22 | 2 | 0.21 |
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD23 | 2 | 0.21 |
| (1,89) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:71:ASN:HB3 | 11 | 0.21 |
| (1,86) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:28:LEU:HD11 | 9 | 0.21 |
| (1,86) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:28:LEU:HD12 | 9 | 0.21 |
| (1,86) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:28:LEU:HD13 | 9 | 0.21 |
| (1,74) | 1:A:89:ALA:H | 1:A:88:HIS:H | 11 | 0.21 |
| (1,601) | 1:A:33:THR:H | 1:A:34:ALA:H | 10 | 0.21 |
| (1,600) | 1:A:33:THR:H | 1:A:30:ALA:HA | 2 | 0.21 |
| (1,532) | 1:A:93:HIS:H | 1:A:93:HIS:HD2 | 5 | 0.21 |
| (1,516) | 1:A:82:PHE:H | 1:A:82:PHE:HB2 | 6 | 0.21 |
| (1,516) | 1:A:82:PHE:H | 1:A:82:PHE:HB2 | 8 | 0.21 |
| (1,516) | 1:A:82:PHE:H | 1:A:82:PHE:HB2 | 12 | 0.21 |
| (1,478) | 1:A:68:LEU:H | 1:A:68:LEU:HB3 | 3 | 0.21 |
| (1,44) | 1:A:79:THR:H | 1:A:78:PRO:HA | 11 | 0.21 |
| (1,44) | 1:A:79:THR:H | 1:A:78:PRO:HA | 13 | 0.21 |
| (1,38) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:74:LEU:H | 5 | 0.21 |
| (1,354) | 1:A:91:THR:H | 1:A:90:LEU:HB2 | 8 | 0.21 |
| (1,354) | 1:A:91:THR:H | 1:A:90:LEU:HB2 | 9 | 0.21 |
| (1,342) | 1:A:66:ASN:H | 1:A:66:ASN:HB2 | 3 | 0.21 |
| (1,34) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:72:THR:H | 1 | 0.21 |
| (1,34) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:72:THR:H | 9 | 0.21 |
| (1,34) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:72:THR:H | 13 | 0.21 |
| (1,34) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:72:THR:H | 14 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,309) | 1:A:56:ILE:H | 1:A:51:PHE:HB2 | 9 | 0.21 |
| (1,29) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:61:ALA:H | 5 | 0.21 |
| (1,286) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:13:LEU:HB2 | 16 | 0.21 |
| (1,25) | 1:A:83:ASP:H | 1:A:84:HIS:H | 12 | 0.21 |
| (1,25) | 1:A:83:ASP:H | 1:A:84:HIS:H | 13 | 0.21 |
| (1,249) | 1:A:99:THR:H | 1:A:98:LEU:HB2 | 12 | 0.21 |
| (1,239) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG13 | 2 | 0.21 |
| (1,239) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG13 | 10 | 0.21 |
| (1,239) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG13 | 11 | 0.21 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG21 | 14 | 0.21 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG22 | 14 | 0.21 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG23 | 14 | 0.21 |
| (1,22) | 1:A:43:GLU:H | 1:A:44:SER:H | 3 | 0.21 |
| (1,158) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:4:SER:HA | 3 | 0.21 |
| (1,134) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:25:LEU:HB2 | 3 | 0.21 |
| (1,134) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:25:LEU:HB2 | 8 | 0.21 |
| (1,134) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:25:LEU:HB2 | 11 | 0.21 |
| (1,125) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:21:GLN:HB2 | 7 | 0.21 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD11 | 16 | 0.2 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD12 | 16 | 0.2 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD13 | 16 | 0.2 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD11 | 16 | 0.2 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD12 | 16 | 0.2 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD13 | 16 | 0.2 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD11 | 16 | 0.2 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD12 | 16 | 0.2 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD13 | 16 | 0.2 |
| (2,997) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HG | 13 | 0.2 |
| (2,997) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HG | 13 | 0.2 |
| (2,997) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HG | 13 | 0.2 |
| (2,977) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:49:THR:H | 14 | 0.2 |
| (2,963) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:93:HIS:HA | 1 | 0.2 |
| (2,963) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:93:HIS:HA | 5 | 0.2 |
| (2,963) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:93:HIS:HA | 8 | 0.2 |
| (2,963) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:93:HIS:HA | 14 | 0.2 |
| (2,960) | 1:A:47:PRO:HD2 | 1:A:46:SER:HB3 | 6 | 0.2 |
| (2,889) | 1:A:42:PRO:HD2 | 1:A:41:THR:HA | 5 | 0.2 |
| (2,876) | 1:A:42:PRO:HB2 | 1:A:43:GLU:H | 8 | 0.2 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:74:LEU:H | 6 | 0.2 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:74:LEU:H | 6 | 0.2 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:74:LEU:H | 6 | 0.2 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:74:LEU:H | 9 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:74:LEU:H | 9 | 0.2 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:74:LEU:H | 9 | 0.2 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:33:THR:HG21 | 12 | 0.2 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:33:THR:HG22 | 12 | 0.2 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:33:THR:HG23 | 12 | 0.2 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:33:THR:HG21 | 12 | 0.2 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:33:THR:HG22 | 12 | 0.2 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:33:THR:HG23 | 12 | 0.2 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:33:THR:HG21 | 12 | 0.2 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:33:THR:HG22 | 12 | 0.2 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:33:THR:HG23 | 12 | 0.2 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:36:VAL:H | 6 | 0.2 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:36:VAL:H | 6 | 0.2 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:36:VAL:H | 6 | 0.2 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:64:LEU:H | 2 | 0.2 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:64:LEU:H | 2 | 0.2 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:64:LEU:H | 2 | 0.2 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG21 | 4 | 0.2 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG22 | 4 | 0.2 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG23 | 4 | 0.2 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG21 | 7 | 0.2 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG22 | 7 | 0.2 |
| (2,812) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:60:THR:HG23 | 7 | 0.2 |
| (2,786) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:34:ALA:HB1 | 8 | 0.2 |
| (2,786) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:34:ALA:HB2 | 8 | 0.2 |
| (2,786) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:34:ALA:HB3 | 8 | 0.2 |
| (2,785) | 1:A:27:THR:HB | 1:A:23:GLN:HB2 | 12 | 0.2 |
| (2,785) | 1:A:27:THR:HB | 1:A:23:GLN:HB2 | 16 | 0.2 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB1 | 12 | 0.2 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB2 | 12 | 0.2 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB3 | 12 | 0.2 |
| (2,571) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:ALA:H | 11 | 0.2 |
| (2,571) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:ALA:H | 13 | 0.2 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG21 | 16 | 0.2 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG22 | 16 | 0.2 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG23 | 16 | 0.2 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG21 | 16 | 0.2 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG22 | 16 | 0.2 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG23 | 16 | 0.2 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG21 | 16 | 0.2 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG22 | 16 | 0.2 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG23 | 16 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,565) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:71:ASN:HB2 | 3 | 0.2 |
| (2,565) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:71:ASN:HB2 | 3 | 0.2 |
| (2,565) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:71:ASN:HB2 | 3 | 0.2 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD11 | 16 | 0.2 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD12 | 16 | 0.2 |
| (2,551) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:62:LEU:HD13 | 16 | 0.2 |
| (2,528) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:35:THR:H | 5 | 0.2 |
| (2,528) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:35:THR:H | 6 | 0.2 |
| (2,528) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:35:THR:H | 10 | 0.2 |
| (2,528) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:35:THR:H | 11 | 0.2 |
| (2,528) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:35:THR:H | 12 | 0.2 |
| (2,525) | 1:A:96:THR:HB | 1:A:96:THR:H | 5 | 0.2 |
| (2,525) | 1:A:96:THR:HB | 1:A:96:THR:H | 8 | 0.2 |
| (2,525) | 1:A:96:THR:HB | 1:A:96:THR:H | 12 | 0.2 |
| (2,525) | 1:A:96:THR:HB | 1:A:96:THR:H | 16 | 0.2 |
| (2,52) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:85:PRO:HA | 11 | 0.2 |
| (2,52) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:85:PRO:HA | 11 | 0.2 |
| (2,52) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:85:PRO:HA | 12 | 0.2 |
| (2,52) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:85:PRO:HA | 12 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:24:THR:H | 16 | 0.2 |
| (2,492) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:19:GLN:HA | 11 | 0.2 |
| (2,483) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 12 | 0.2 |
| (2,477) | 1:A:25:LEU:HG | 1:A:25:LEU:H | 11 | 0.2 |
| (2,477) | 1:A:25:LEU:HG | 1:A:25:LEU:H | 15 | 0.2 |
| (2,465) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:H | 12 | 0.2 |
| (2,465) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:H | 13 | 0.2 |
| (2,458) | 1:A:20:GLN:HB3 | 1:A:16:LEU:HB3 | 9 | 0.2 |
| (2,435) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:20:GLN:HA | 1 | 0.2 |
| (2,435) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:20:GLN:HA | 2 | 0.2 |
| (2,435) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:20:GLN:HA | 16 | 0.2 |
| (2,411) | 1:A:19:GLN:HB3 | 1:A:19:GLN:H | 7 | 0.2 |
| (2,411) | 1:A:19:GLN:HB3 | 1:A:19:GLN:H | 11 | 0.2 |
| (2,403) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:20:GLN:H | 11 | 0.2 |
| (2,388) | 1:A:45:ILE:HA | 1:A:46:SER:H | 3 | 0.2 |
| (2,388) | 1:A:45:ILE:HA | 1:A:46:SER:H | 7 | 0.2 |
| (2,388) | 1:A:45:ILE:HA | 1:A:46:SER:H | 9 | 0.2 |
| (2,388) | 1:A:45:ILE:HA | 1:A:46:SER:H | 10 | 0.2 |
| (2,361) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:17:SER:H | 5 | 0.2 |
| (2,361) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:17:SER:H | 5 | 0.2 |
| (2,361) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:17:SER:H | 5 | 0.2 |
| (2,361) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:17:SER:H | 15 | 0.2 |
| (2,361) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:17:SER:H | 15 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,361) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:17:SER:H | 15 | 0.2 |
| (2,359) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:21:GLN:HG2 | 11 | 0.2 |
| (2,359) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:21:GLN:HG2 | 11 | 0.2 |
| (2,359) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:21:GLN:HG2 | 11 | 0.2 |
| (2,33) | 1:A:84:HIS:HB2 | 1:A:84:HIS:HD2 | 2 | 0.2 |
| (2,33) | 1:A:84:HIS:HB2 | 1:A:84:HIS:HD2 | 16 | 0.2 |
| (2,325) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 8 | 0.2 |
| (2,325) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 8 | 0.2 |
| (2,325) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 8 | 0.2 |
| (2,31) | 1:A:39:HIS:HD2 | 1:A:37:LEU:HB3 | 5 | 0.2 |
| (2,298) | 1:A:94:LEU:HB2 | 1:A:94:LEU:H | 8 | 0.2 |
| (2,279) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:12:ARG:HA | 8 | 0.2 |
| (2,279) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:12:ARG:HA | 10 | 0.2 |
| (2,265) | 1:A:12:ARG:HG2 | 1:A:11:ALA:HB1 | 6 | 0.2 |
| (2,265) | 1:A:12:ARG:HG2 | 1:A:11:ALA:HB2 | 6 | 0.2 |
| (2,265) | 1:A:12:ARG:HG2 | 1:A:11:ALA:HB3 | 6 | 0.2 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD11 | 10 | 0.2 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD12 | 10 | 0.2 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD13 | 10 | 0.2 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD11 | 10 | 0.2 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD12 | 10 | 0.2 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD13 | 10 | 0.2 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD11 | 10 | 0.2 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD12 | 10 | 0.2 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD13 | 10 | 0.2 |
| (2,220) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:10:ALA:HA | 6 | 0.2 |
| (2,220) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:10:ALA:HA | 6 | 0.2 |
| (2,220) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:10:ALA:HA | 6 | 0.2 |
| (2,220) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:10:ALA:HA | 9 | 0.2 |
| (2,220) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:10:ALA:HA | 9 | 0.2 |
| (2,220) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:10:ALA:HA | 9 | 0.2 |
| (2,220) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:10:ALA:HA | 13 | 0.2 |
| (2,220) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:10:ALA:HA | 13 | 0.2 |
| (2,220) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:10:ALA:HA | 13 | 0.2 |
| (2,201) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HB3 | 12 | 0.2 |
| (2,1914) | 1:A:91:THR:HB | 1:A:92:GLN:H | 9 | 0.2 |
| (2,1885) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:13:LEU:HA | 7 | 0.2 |
| (2,1885) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:13:LEU:HA | 13 | 0.2 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:H | 13 | 0.2 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:H | 13 | 0.2 |
| (2,1879) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:H | 13 | 0.2 |
| (2,1850) | 1:A:70:HIS:HD2 | 1:A:70:HIS:HB3 | 9 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1850) | 1:A:70:HIS:HD2 | 1:A:70:HIS:HB3 | 10 | 0.2 |
| (2,1849) | 1:A:84:HIS:HD2 | 1:A:84:HIS:H | 8 | 0.2 |
| (2,1848) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:22:GLN:H | 7 | 0.2 |
| (2,1848) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:22:GLN:H | 16 | 0.2 |
| (2,1803) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:100:GLN:H | 14 | 0.2 |
| (2,18) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:95:HIS:HD2 | 7 | 0.2 |
| (2,1769) | 1:A:97:ARG:HA | 1:A:97:ARG:HG3 | 3 | 0.2 |
| (2,1722) | 1:A:92:GLN:HG3 | 1:A:92:GLN:H | 16 | 0.2 |
| (2,1714) | 1:A:92:GLN:HG2 | 1:A:92:GLN:HA | 1 | 0.2 |
| (2,17) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:95:HIS:HB2 | 5 | 0.2 |
| (2,1668) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 16 | 0.2 |
| (2,1668) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 16 | 0.2 |
| (2,1668) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 16 | 0.2 |
| (2,1666) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:90:LEU:HA | 8 | 0.2 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:90:LEU:H | 3 | 0.2 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:90:LEU:H | 3 | 0.2 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:90:LEU:H | 3 | 0.2 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:90:LEU:H | 4 | 0.2 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:90:LEU:H | 4 | 0.2 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:90:LEU:H | 4 | 0.2 |
| (2,1656) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:51:PHE:HE1 | 8 | 0.2 |
| (2,1656) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:51:PHE:HE2 | 8 | 0.2 |
| (2,1656) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:51:PHE:HE1 | 8 | 0.2 |
| (2,1656) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:51:PHE:HE2 | 8 | 0.2 |
| (2,1656) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:51:PHE:HE1 | 8 | 0.2 |
| (2,1656) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:51:PHE:HE2 | 8 | 0.2 |
| (2,1630) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:51:PHE:H | 4 | 0.2 |
| (2,1630) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:51:PHE:H | 10 | 0.2 |
| (2,1562) | 1:A:82:PHE:HB2 | 1:A:82:PHE:H | 4 | 0.2 |
| (2,1562) | 1:A:82:PHE:HB2 | 1:A:82:PHE:H | 7 | 0.2 |
| (2,1562) | 1:A:82:PHE:HB2 | 1:A:82:PHE:H | 9 | 0.2 |
| (2,1562) | 1:A:82:PHE:HB2 | 1:A:82:PHE:H | 11 | 0.2 |
| (2,1562) | 1:A:82:PHE:HB2 | 1:A:82:PHE:H | 13 | 0.2 |
| (2,1562) | 1:A:82:PHE:HB2 | 1:A:82:PHE:H | 16 | 0.2 |
| (2,156) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:71:ASN:HD22 | 8 | 0.2 |
| (2,156) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:71:ASN:HD22 | 15 | 0.2 |
| (2,1548) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:81:ILE:HB | 8 | 0.2 |
| (2,1542) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:84:HIS:H | 5 | 0.2 |
| (2,1523) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:16:LEU:HA | 11 | 0.2 |
| (2,1519) | 1:A:16:LEU:HB2 | 1:A:21:GLN:HG3 | 2 | 0.2 |
| (2,1490) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:79:THR:HB | 5 | 0.2 |
| (2,1490) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:79:THR:HB | 11 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1445) | 1:A:88:HIS:HB2 | 1:A:88:HIS:H | 12 | 0.2 |
| (2,1433) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:70:HIS:HD2 | 7 | 0.2 |
| (2,1429) | 1:A:102:HIS:HD2 | 1:A:101:SER:HB2 | 9 | 0.2 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:45:ILE:HA | 7 | 0.2 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:45:ILE:HA | 7 | 0.2 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:45:ILE:HA | 7 | 0.2 |
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:39:HIS:HB2 | 8 | 0.2 |
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:39:HIS:HB2 | 8 | 0.2 |
| (2,1398) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:39:HIS:HB2 | 8 | 0.2 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD11 | 11 | 0.2 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD12 | 11 | 0.2 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD13 | 11 | 0.2 |
| (2,1367) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:98:LEU:H | 8 | 0.2 |
| (2,1334) | 1:A:69:THR:HA | 1:A:74:LEU:H | 8 | 0.2 |
| (2,1301) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:65:ARG:H | 15 | 0.2 |
| (2,1299) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:67:THR:H | 7 | 0.2 |
| (2,1293) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:65:ARG:H | 3 | 0.2 |
| (2,1293) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:65:ARG:H | 10 | 0.2 |
| (2,1293) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:65:ARG:H | 12 | 0.2 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 12 | 0.2 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 12 | 0.2 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 12 | 0.2 |
| (2,1281) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:65:ARG:HA | 9 | 0.2 |
| (2,1272) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 7 | 0.2 |
| (2,1272) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 7 | 0.2 |
| (2,1272) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 7 | 0.2 |
| (2,1272) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 9 | 0.2 |
| (2,1272) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 9 | 0.2 |
| (2,1272) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 9 | 0.2 |
| (2,1272) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 12 | 0.2 |
| (2,1272) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 12 | 0.2 |
| (2,1272) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 12 | 0.2 |
| (2,1270) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:68:LEU:HB3 | 12 | 0.2 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD21 | 3 | 0.2 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD22 | 3 | 0.2 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD23 | 3 | 0.2 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD21 | 6 | 0.2 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD22 | 6 | 0.2 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD23 | 6 | 0.2 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD21 | 9 | 0.2 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD22 | 9 | 0.2 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD23 | 9 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD21 | 14 | 0.2 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD22 | 14 | 0.2 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD23 | 14 | 0.2 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD21 | 15 | 0.2 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD22 | 15 | 0.2 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD23 | 15 | 0.2 |
| (2,1224) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:63:GLU:HA | 2 | 0.2 |
| (2,1224) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:63:GLU:HA | 15 | 0.2 |
| (2,1219) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:60:THR:HG21 | 1 | 0.2 |
| (2,1219) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:60:THR:HG22 | 1 | 0.2 |
| (2,1219) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:60:THR:HG23 | 1 | 0.2 |
| (2,1204) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:59:LEU:HA | 16 | 0.2 |
| (2,1194) | 1:A:63:GLU:HB2 | 1:A:64:LEU:H | 8 | 0.2 |
| (2,1188) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:63:GLU:H | 1 | 0.2 |
| (2,1188) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:63:GLU:H | 2 | 0.2 |
| (2,1188) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:63:GLU:H | 6 | 0.2 |
| (2,1188) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:63:GLU:H | 14 | 0.2 |
| (2,1185) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:H | 5 | 0.2 |
| (2,1185) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:H | 10 | 0.2 |
| (2,1185) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:H | 14 | 0.2 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ALA:H | 16 | 0.2 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ALA:H | 16 | 0.2 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ALA:H | 16 | 0.2 |
| (2,1054) | 1:A:52:LYS:HG2 | 1:A:53:ASP:H | 3 | 0.2 |
| (2,1054) | 1:A:52:LYS:HG2 | 1:A:53:ASP:H | 5 | 0.2 |
| (2,1053) | 1:A:52:LYS:HG2 | 1:A:52:LYS:HA | 7 | 0.2 |
| (2,1029) | 1:A:51:PHE:HB3 | 1:A:52:LYS:HG2 | 1 | 0.2 |
| (2,1029) | 1:A:51:PHE:HB3 | 1:A:52:LYS:HG2 | 11 | 0.2 |
| (2,1029) | 1:A:51:PHE:HB3 | 1:A:52:LYS:HG2 | 13 | 0.2 |
| (2,1007) | 1:A:39:HIS:HA | 1:A:39:HIS:HD2 | 1 | 0.2 |
| (1,95) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:71:ASN:HA | 8 | 0.2 |
| (1,95) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:71:ASN:HA | 15 | 0.2 |
| (1,94) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:68:LEU:HA | 10 | 0.2 |
| (1,86) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:28:LEU:HD11 | 4 | 0.2 |
| (1,86) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:28:LEU:HD12 | 4 | 0.2 |
| (1,86) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:28:LEU:HD13 | 4 | 0.2 |
| (1,80) | 1:A:86:THR:H | 1:A:85:PRO:HD2 | 7 | 0.2 |
| (1,80) | 1:A:86:THR:H | 1:A:85:PRO:HD2 | 16 | 0.2 |
| (1,74) | 1:A:89:ALA:H | 1:A:88:HIS:H | 2 | 0.2 |
| (1,74) | 1:A:89:ALA:H | 1:A:88:HIS:H | 3 | 0.2 |
| (1,74) | 1:A:89:ALA:H | 1:A:88:HIS:H | 8 | 0.2 |
| (1,601) | 1:A:33:THR:H | 1:A:34:ALA:H | 14 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|--------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,600) | 1:A:33:THR:H | 1:A:30:ALA:HA | 3 | 0.2 |
| (1,588) | 1:A:96:THR:H | 1:A:96:THR:HB | 14 | 0.2 |
| (1,586) | 1:A:96:THR:H | 1:A:95:HIS:HB3 | 14 | 0.2 |
| (1,56) | 1:A:60:THR:H | 1:A:59:LEU:HB2 | 7 | 0.2 |
| (1,516) | 1:A:82:PHE:H | 1:A:82:PHE:HB2 | 4 | 0.2 |
| (1,516) | 1:A:82:PHE:H | 1:A:82:PHE:HB2 | 7 | 0.2 |
| (1,516) | 1:A:82:PHE:H | 1:A:82:PHE:HB2 | 9 | 0.2 |
| (1,516) | 1:A:82:PHE:H | 1:A:82:PHE:HB2 | 11 | 0.2 |
| (1,516) | 1:A:82:PHE:H | 1:A:82:PHE:HB2 | 13 | 0.2 |
| (1,516) | 1:A:82:PHE:H | 1:A:82:PHE:HB2 | 16 | 0.2 |
| (1,475) | 1:A:68:LEU:H | 1:A:68:LEU:HB2 | 10 | 0.2 |
| (1,443) | 1:A:75:ASP:H | 1:A:74:LEU:HB2 | 11 | 0.2 |
| (1,416) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 5 | 0.2 |
| (1,416) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 5 | 0.2 |
| (1,416) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 5 | 0.2 |
| (1,38) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:74:LEU:H | 11 | 0.2 |
| (1,350) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HB3 | 11 | 0.2 |
| (1,34) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:72:THR:H | 2 | 0.2 |
| (1,34) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:72:THR:H | 6 | 0.2 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB1 | 3 | 0.2 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB2 | 3 | 0.2 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB3 | 3 | 0.2 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB1 | 4 | 0.2 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB2 | 4 | 0.2 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB3 | 4 | 0.2 |
| (1,29) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:61:ALA:H | 6 | 0.2 |
| (1,249) | 1:A:99:THR:H | 1:A:98:LEU:HB2 | 7 | 0.2 |
| (1,239) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG13 | 1 | 0.2 |
| (1,239) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG13 | 9 | 0.2 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG21 | 6 | 0.2 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG22 | 6 | 0.2 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG23 | 6 | 0.2 |
| (1,171) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:28:LEU:HB3 | 16 | 0.2 |
| (1,134) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:25:LEU:HB2 | 4 | 0.2 |
| (1,134) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:25:LEU:HB2 | 5 | 0.2 |
| (1,134) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:25:LEU:HB2 | 6 | 0.2 |
| (1,134) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:25:LEU:HB2 | 10 | 0.2 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD21 | 11 | 0.2 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD22 | 11 | 0.2 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD23 | 11 | 0.2 |
| (1,125) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:21:GLN:HB2 | 1 | 0.2 |
| (1,125) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:21:GLN:HB2 | 11 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,110) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:52:LYS:HG3 | 10 | 0.2 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD11 | 15 | 0.19 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD12 | 15 | 0.19 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD13 | 15 | 0.19 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD11 | 15 | 0.19 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD12 | 15 | 0.19 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD13 | 15 | 0.19 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD11 | 15 | 0.19 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD12 | 15 | 0.19 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD13 | 15 | 0.19 |
| (2,963) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:93:HIS:HA | 7 | 0.19 |
| (2,922) | 1:A:44:SER:HB2 | 1:A:41:THR:HG21 | 12 | 0.19 |
| (2,922) | 1:A:44:SER:HB2 | 1:A:41:THR:HG22 | 12 | 0.19 |
| (2,922) | 1:A:44:SER:HB2 | 1:A:41:THR:HG23 | 12 | 0.19 |
| (2,876) | 1:A:42:PRO:HB2 | 1:A:43:GLU:H | 1 | 0.19 |
| (2,876) | 1:A:42:PRO:HB2 | 1:A:43:GLU:H | 12 | 0.19 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:74:LEU:HA | 11 | 0.19 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:74:LEU:HA | 11 | 0.19 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:74:LEU:HA | 11 | 0.19 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:74:LEU:H | 2 | 0.19 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:74:LEU:H | 2 | 0.19 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:74:LEU:H | 2 | 0.19 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:33:THR:HG21 | 1 | 0.19 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:33:THR:HG22 | 1 | 0.19 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:33:THR:HG23 | 1 | 0.19 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:33:THR:HG21 | 1 | 0.19 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:33:THR:HG22 | 1 | 0.19 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:33:THR:HG23 | 1 | 0.19 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:33:THR:HG21 | 1 | 0.19 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:33:THR:HG22 | 1 | 0.19 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:33:THR:HG23 | 1 | 0.19 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG21 | 9 | 0.19 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG22 | 9 | 0.19 |
| (2,840) | 1:A:37:LEU:HG | 1:A:33:THR:HG23 | 9 | 0.19 |
| (2,832) | 1:A:37:LEU:HB2 | 1:A:37:LEU:H | 7 | 0.19 |
| (2,832) | 1:A:37:LEU:HB2 | 1:A:37:LEU:H | 10 | 0.19 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:64:LEU:H | 5 | 0.19 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:64:LEU:H | 5 | 0.19 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:64:LEU:H | 5 | 0.19 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:64:LEU:H | 9 | 0.19 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:64:LEU:H | 9 | 0.19 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:64:LEU:H | 9 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,82) | 1:A:3:ALA:HA | 1:A:4:SER:H | 1 | 0.19 |
| (2,794) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:36:VAL:H | 15 | 0.19 |
| (2,794) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:36:VAL:H | 15 | 0.19 |
| (2,794) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:36:VAL:H | 15 | 0.19 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB1 | 3 | 0.19 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB2 | 3 | 0.19 |
| (2,774) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:ALA:HB3 | 3 | 0.19 |
| (2,651) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:H | 13 | 0.19 |
| (2,651) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:H | 13 | 0.19 |
| (2,651) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:H | 13 | 0.19 |
| (2,533) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:25:LEU:HB2 | 2 | 0.19 |
| (2,533) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:25:LEU:HB2 | 13 | 0.19 |
| (2,525) | 1:A:96:THR:HB | 1:A:96:THR:H | 1 | 0.19 |
| (2,525) | 1:A:96:THR:HB | 1:A:96:THR:H | 7 | 0.19 |
| (2,525) | 1:A:96:THR:HB | 1:A:96:THR:H | 13 | 0.19 |
| (2,52) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:85:PRO:HA | 1 | 0.19 |
| (2,52) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:85:PRO:HA | 1 | 0.19 |
| (2,52) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:85:PRO:HA | 2 | 0.19 |
| (2,52) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:85:PRO:HA | 2 | 0.19 |
| (2,496) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:23:GLN:HG2 | 14 | 0.19 |
| (2,477) | 1:A:25:LEU:HG | 1:A:25:LEU:H | 10 | 0.19 |
| (2,477) | 1:A:25:LEU:HG | 1:A:25:LEU:H | 16 | 0.19 |
| (2,458) | 1:A:20:GLN:HB3 | 1:A:16:LEU:HB3 | 3 | 0.19 |
| (2,435) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:20:GLN:HA | 4 | 0.19 |
| (2,435) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:20:GLN:HA | 12 | 0.19 |
| (2,435) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:20:GLN:HA | 15 | 0.19 |
| (2,411) | 1:A:19:GLN:HB3 | 1:A:19:GLN:H | 13 | 0.19 |
| (2,403) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:20:GLN:H | 13 | 0.19 |
| (2,388) | 1:A:45:ILE:HA | 1:A:46:SER:H | 16 | 0.19 |
| (2,377) | 1:A:18:PRO:HA | 1:A:18:PRO:HB3 | 5 | 0.19 |
| (2,377) | 1:A:18:PRO:HA | 1:A:18:PRO:HB3 | 11 | 0.19 |
| (2,361) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:17:SER:H | 1 | 0.19 |
| (2,361) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:17:SER:H | 1 | 0.19 |
| (2,361) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:17:SER:H | 1 | 0.19 |
| (2,361) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:17:SER:H | 14 | 0.19 |
| (2,361) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:17:SER:H | 14 | 0.19 |
| (2,361) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:17:SER:H | 14 | 0.19 |
| (2,361) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:17:SER:H | 16 | 0.19 |
| (2,361) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:17:SER:H | 16 | 0.19 |
| (2,361) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:17:SER:H | 16 | 0.19 |
| (2,354) | 1:A:16:LEU:HG | 1:A:16:LEU:H | 12 | 0.19 |
| (2,34) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:51:PHE:HZ | 10 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,337) | 1:A:11:ALA:HA | 1:A:14:ASN:HB2 | 2 | 0.19 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD21 | 15 | 0.19 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD22 | 15 | 0.19 |
| (2,333) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:16:LEU:HD23 | 15 | 0.19 |
| (2,33) | 1:A:84:HIS:HB2 | 1:A:84:HIS:HD2 | 1 | 0.19 |
| (2,33) | 1:A:84:HIS:HB2 | 1:A:84:HIS:HD2 | 3 | 0.19 |
| (2,33) | 1:A:84:HIS:HB2 | 1:A:84:HIS:HD2 | 7 | 0.19 |
| (2,33) | 1:A:84:HIS:HB2 | 1:A:84:HIS:HD2 | 8 | 0.19 |
| (2,33) | 1:A:84:HIS:HB2 | 1:A:84:HIS:HD2 | 9 | 0.19 |
| (2,314) | 1:A:85:PRO:HD2 | 1:A:84:HIS:H | 1 | 0.19 |
| (2,279) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:12:ARG:HA | 4 | 0.19 |
| (2,279) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:12:ARG:HA | 11 | 0.19 |
| (2,279) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:12:ARG:HA | 15 | 0.19 |
| (2,269) | 1:A:12:ARG:HG2 | 1:A:13:LEU:H | 2 | 0.19 |
| (2,269) | 1:A:12:ARG:HG2 | 1:A:13:LEU:H | 8 | 0.19 |
| (2,269) | 1:A:12:ARG:HG2 | 1:A:13:LEU:H | 12 | 0.19 |
| (2,220) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:10:ALA:HA | 12 | 0.19 |
| (2,220) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:10:ALA:HA | 12 | 0.19 |
| (2,220) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:10:ALA:HA | 12 | 0.19 |
| (2,220) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:10:ALA:HA | 15 | 0.19 |
| (2,220) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:10:ALA:HA | 15 | 0.19 |
| (2,220) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:10:ALA:HA | 15 | 0.19 |
| (2,201) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HB3 | 6 | 0.19 |
| (2,201) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HB3 | 11 | 0.19 |
| (2,20) | 1:A:102:HIS:HB2 | 1:A:102:HIS:HD2 | 14 | 0.19 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB1 | 4 | 0.19 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB2 | 4 | 0.19 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB3 | 4 | 0.19 |
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HB3 | 9 | 0.19 |
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HB3 | 9 | 0.19 |
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HB3 | 9 | 0.19 |
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HB3 | 11 | 0.19 |
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HB3 | 11 | 0.19 |
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HB3 | 11 | 0.19 |
| (2,1885) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:13:LEU:HA | 1 | 0.19 |
| (2,1885) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:13:LEU:HA | 16 | 0.19 |
| (2,1850) | 1:A:70:HIS:HD2 | 1:A:70:HIS:HB3 | 2 | 0.19 |
| (2,1844) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:14:ASN:HB2 | 6 | 0.19 |
| (2,1835) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:95:HIS:HD2 | 6 | 0.19 |
| (2,1835) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:95:HIS:HD2 | 6 | 0.19 |
| (2,1835) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:95:HIS:HD2 | 6 | 0.19 |
| (2,1801) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:96:THR:HG21 | 13 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1801) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:96:THR:HG22 | 13 | 0.19 |
| (2,1801) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:96:THR:HG23 | 13 | 0.19 |
| (2,1801) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:96:THR:HG21 | 15 | 0.19 |
| (2,1801) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:96:THR:HG22 | 15 | 0.19 |
| (2,1801) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:96:THR:HG23 | 15 | 0.19 |
| (2,18) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:95:HIS:HD2 | 13 | 0.19 |
| (2,18) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:95:HIS:HD2 | 16 | 0.19 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD11 | 9 | 0.19 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD12 | 9 | 0.19 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD13 | 9 | 0.19 |
| (2,1769) | 1:A:97:ARG:HA | 1:A:97:ARG:HG3 | 1 | 0.19 |
| (2,1769) | 1:A:97:ARG:HA | 1:A:97:ARG:HG3 | 12 | 0.19 |
| (2,1769) | 1:A:97:ARG:HA | 1:A:97:ARG:HG3 | 16 | 0.19 |
| (2,1755) | 1:A:92:GLN:HA | 1:A:95:HIS:HB3 | 7 | 0.19 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG21 | 9 | 0.19 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG22 | 9 | 0.19 |
| (2,1754) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:91:THR:HG23 | 9 | 0.19 |
| (2,1722) | 1:A:92:GLN:HG3 | 1:A:92:GLN:H | 13 | 0.19 |
| (2,1695) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:90:LEU:HG | 1 | 0.19 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD11 | 3 | 0.19 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD12 | 3 | 0.19 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD13 | 3 | 0.19 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD11 | 3 | 0.19 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD12 | 3 | 0.19 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD13 | 3 | 0.19 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD11 | 3 | 0.19 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD12 | 3 | 0.19 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD13 | 3 | 0.19 |
| (2,1679) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HB3 | 7 | 0.19 |
| (2,1679) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:HB3 | 7 | 0.19 |
| (2,1679) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:HB3 | 7 | 0.19 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:90:LEU:H | 1 | 0.19 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:90:LEU:H | 1 | 0.19 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:90:LEU:H | 1 | 0.19 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:90:LEU:H | 2 | 0.19 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:90:LEU:H | 2 | 0.19 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:90:LEU:H | 2 | 0.19 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:90:LEU:H | 5 | 0.19 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:90:LEU:H | 5 | 0.19 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:90:LEU:H | 5 | 0.19 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:90:LEU:H | 7 | 0.19 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:90:LEU:H | 7 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:90:LEU:H | 7 | 0.19 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:90:LEU:H | 10 | 0.19 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:90:LEU:H | 10 | 0.19 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:90:LEU:H | 10 | 0.19 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:90:LEU:H | 12 | 0.19 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:90:LEU:H | 12 | 0.19 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:90:LEU:H | 12 | 0.19 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:85:PRO:HD2 | 16 | 0.19 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:85:PRO:HD2 | 16 | 0.19 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:85:PRO:HD2 | 16 | 0.19 |
| (2,1602) | 1:A:86:THR:HB | 1:A:88:HIS:H | 1 | 0.19 |
| (2,1602) | 1:A:86:THR:HB | 1:A:88:HIS:H | 11 | 0.19 |
| (2,1602) | 1:A:86:THR:HB | 1:A:88:HIS:H | 15 | 0.19 |
| (2,1569) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:84:HIS:H | 8 | 0.19 |
| (2,1569) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:84:HIS:H | 14 | 0.19 |
| (2,1566) | 1:A:83:ASP:HB2 | 1:A:83:ASP:H | 11 | 0.19 |
| (2,1562) | 1:A:82:PHE:HB2 | 1:A:82:PHE:H | 1 | 0.19 |
| (2,1562) | 1:A:82:PHE:HB2 | 1:A:82:PHE:H | 10 | 0.19 |
| (2,1562) | 1:A:82:PHE:HB2 | 1:A:82:PHE:H | 15 | 0.19 |
| (2,156) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:71:ASN:HD22 | 14 | 0.19 |
| (2,1548) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:81:ILE:HB | 9 | 0.19 |
| (2,1543) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:51:PHE:HD1 | 1 | 0.19 |
| (2,1543) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:51:PHE:HD2 | 1 | 0.19 |
| (2,1542) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:84:HIS:H | 6 | 0.19 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:68:LEU:HB2 | 15 | 0.19 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:68:LEU:HB2 | 15 | 0.19 |
| (2,1506) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:68:LEU:HB2 | 15 | 0.19 |
| (2,1499) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:78:PRO:HB3 | 12 | 0.19 |
| (2,1490) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:79:THR:HB | 12 | 0.19 |
| (2,1462) | 1:A:73:GLY:HA2 | 1:A:73:GLY:H | 10 | 0.19 |
| (2,1453) | 1:A:40:HIS:HA | 1:A:40:HIS:HB2 | 1 | 0.19 |
| (2,1445) | 1:A:88:HIS:HB2 | 1:A:88:HIS:H | 8 | 0.19 |
| (2,1445) | 1:A:88:HIS:HB2 | 1:A:88:HIS:H | 15 | 0.19 |
| (2,1444) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:88:HIS:H | 4 | 0.19 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG21 | 8 | 0.19 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG22 | 8 | 0.19 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG23 | 8 | 0.19 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG21 | 8 | 0.19 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG22 | 8 | 0.19 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG23 | 8 | 0.19 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG21 | 8 | 0.19 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG22 | 8 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG23 | 8 | 0.19 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG21 | 15 | 0.19 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG22 | 15 | 0.19 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG23 | 15 | 0.19 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG21 | 15 | 0.19 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG22 | 15 | 0.19 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG23 | 15 | 0.19 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG21 | 15 | 0.19 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG22 | 15 | 0.19 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG23 | 15 | 0.19 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:45:ILE:HA | 15 | 0.19 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:45:ILE:HA | 15 | 0.19 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:45:ILE:HA | 15 | 0.19 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD11 | 13 | 0.19 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD12 | 13 | 0.19 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD13 | 13 | 0.19 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD11 | 15 | 0.19 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD12 | 15 | 0.19 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD13 | 15 | 0.19 |
| (2,1336) | 1:A:69:THR:HA | 1:A:74:LEU:HB3 | 2 | 0.19 |
| (2,1301) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:65:ARG:H | 4 | 0.19 |
| (2,1293) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:65:ARG:H | 8 | 0.19 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 3 | 0.19 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 3 | 0.19 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 3 | 0.19 |
| (2,1281) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:65:ARG:HA | 6 | 0.19 |
| (2,1281) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:65:ARG:HA | 10 | 0.19 |
| (2,1272) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 10 | 0.19 |
| (2,1272) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 10 | 0.19 |
| (2,1272) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 10 | 0.19 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD21 | 1 | 0.19 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD22 | 1 | 0.19 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD23 | 1 | 0.19 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD21 | 5 | 0.19 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD22 | 5 | 0.19 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD23 | 5 | 0.19 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 7 | 0.19 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 7 | 0.19 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 7 | 0.19 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 16 | 0.19 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 16 | 0.19 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 16 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1224) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:63:GLU:HA | 1 | 0.19 |
| (2,1224) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:63:GLU:HA | 4 | 0.19 |
| (2,1224) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:63:GLU:HA | 16 | 0.19 |
| (2,1220) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:35:THR:HG21 | 10 | 0.19 |
| (2,1220) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:35:THR:HG22 | 10 | 0.19 |
| (2,1220) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:35:THR:HG23 | 10 | 0.19 |
| (2,1185) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:H | 1 | 0.19 |
| (2,1185) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:H | 6 | 0.19 |
| (2,1185) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:H | 13 | 0.19 |
| (2,1185) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:H | 15 | 0.19 |
| (2,1173) | 1:A:61:ALA:HB1 | 1:A:58:SER:HA | 8 | 0.19 |
| (2,1173) | 1:A:61:ALA:HB2 | 1:A:58:SER:HA | 8 | 0.19 |
| (2,1173) | 1:A:61:ALA:HB3 | 1:A:58:SER:HA | 8 | 0.19 |
| (2,1100) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:90:LEU:HB2 | 7 | 0.19 |
| (2,1100) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:90:LEU:HB2 | 7 | 0.19 |
| (2,1100) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:90:LEU:HB2 | 7 | 0.19 |
| (2,1073) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:54:LEU:HB2 | 7 | 0.19 |
| (2,1054) | 1:A:52:LYS:HG2 | 1:A:53:ASP:H | 1 | 0.19 |
| (2,1054) | 1:A:52:LYS:HG2 | 1:A:53:ASP:H | 4 | 0.19 |
| (2,1054) | 1:A:52:LYS:HG2 | 1:A:53:ASP:H | 15 | 0.19 |
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD21 | 8 | 0.19 |
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD22 | 8 | 0.19 |
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD23 | 8 | 0.19 |
| (1,95) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:71:ASN:HA | 14 | 0.19 |
| (1,86) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:28:LEU:HD11 | 7 | 0.19 |
| (1,86) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:28:LEU:HD12 | 7 | 0.19 |
| (1,86) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:28:LEU:HD13 | 7 | 0.19 |
| (1,86) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:28:LEU:HD11 | 8 | 0.19 |
| (1,86) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:28:LEU:HD12 | 8 | 0.19 |
| (1,86) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:28:LEU:HD13 | 8 | 0.19 |
| (1,74) | 1:A:89:ALA:H | 1:A:88:HIS:H | 5 | 0.19 |
| (1,74) | 1:A:89:ALA:H | 1:A:88:HIS:H | 10 | 0.19 |
| (1,74) | 1:A:89:ALA:H | 1:A:88:HIS:H | 13 | 0.19 |
| (1,68) | 1:A:20:GLN:H | 1:A:21:GLN:H | 3 | 0.19 |
| (1,601) | 1:A:33:THR:H | 1:A:34:ALA:H | 6 | 0.19 |
| (1,601) | 1:A:33:THR:H | 1:A:34:ALA:H | 9 | 0.19 |
| (1,601) | 1:A:33:THR:H | 1:A:34:ALA:H | 12 | 0.19 |
| (1,601) | 1:A:33:THR:H | 1:A:34:ALA:H | 13 | 0.19 |
| (1,532) | 1:A:93:HIS:H | 1:A:93:HIS:HD2 | 14 | 0.19 |
| (1,529) | 1:A:65:ARG:H | 1:A:64:LEU:HB3 | 11 | 0.19 |
| (1,529) | 1:A:65:ARG:H | 1:A:64:LEU:HB3 | 15 | 0.19 |
| (1,516) | 1:A:82:PHE:H | 1:A:82:PHE:HB2 | 1 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|--------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,516) | 1:A:82:PHE:H | 1:A:82:PHE:HB2 | 10 | 0.19 |
| (1,516) | 1:A:82:PHE:H | 1:A:82:PHE:HB2 | 15 | 0.19 |
| (1,445) | 1:A:3:ALA:H | 1:A:3:ALA:HA | 1 | 0.19 |
| (1,443) | 1:A:75:ASP:H | 1:A:74:LEU:HB2 | 13 | 0.19 |
| (1,440) | 1:A:75:ASP:H | 1:A:74:LEU:HA | 10 | 0.19 |
| (1,440) | 1:A:75:ASP:H | 1:A:74:LEU:HA | 16 | 0.19 |
| (1,438) | 1:A:75:ASP:H | 1:A:76:LEU:H | 7 | 0.19 |
| (1,38) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:74:LEU:H | 4 | 0.19 |
| (1,38) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:74:LEU:H | 9 | 0.19 |
| (1,38) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:74:LEU:H | 12 | 0.19 |
| (1,350) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HB3 | 1 | 0.19 |
| (1,350) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HB3 | 15 | 0.19 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB1 | 1 | 0.19 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB2 | 1 | 0.19 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB3 | 1 | 0.19 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB1 | 2 | 0.19 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB2 | 2 | 0.19 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB3 | 2 | 0.19 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB1 | 5 | 0.19 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB2 | 5 | 0.19 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB3 | 5 | 0.19 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB1 | 7 | 0.19 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB2 | 7 | 0.19 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB3 | 7 | 0.19 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB1 | 10 | 0.19 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB2 | 10 | 0.19 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB3 | 10 | 0.19 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB1 | 12 | 0.19 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB2 | 12 | 0.19 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB3 | 12 | 0.19 |
| (1,29) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:61:ALA:H | 1 | 0.19 |
| (1,29) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:61:ALA:H | 12 | 0.19 |
| (1,29) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:61:ALA:H | 13 | 0.19 |
| (1,29) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:61:ALA:H | 14 | 0.19 |
| (1,29) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:61:ALA:H | 16 | 0.19 |
| (1,275) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:82:PHE:H | 3 | 0.19 |
| (1,25) | 1:A:83:ASP:H | 1:A:84:HIS:H | 4 | 0.19 |
| (1,25) | 1:A:83:ASP:H | 1:A:84:HIS:H | 14 | 0.19 |
| (1,239) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG13 | 5 | 0.19 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG21 | 1 | 0.19 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG22 | 1 | 0.19 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG23 | 1 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG21 | 5 | 0.19 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG22 | 5 | 0.19 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG23 | 5 | 0.19 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG21 | 11 | 0.19 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG22 | 11 | 0.19 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG23 | 11 | 0.19 |
| (1,23) | 1:A:44:SER:H | 1:A:45:ILE:H | 2 | 0.19 |
| (1,20) | 1:A:35:THR:H | 1:A:34:ALA:H | 13 | 0.19 |
| (1,171) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:28:LEU:HB3 | 7 | 0.19 |
| (1,171) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:28:LEU:HB3 | 8 | 0.19 |
| (1,171) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:28:LEU:HB3 | 11 | 0.19 |
| (1,171) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:28:LEU:HB3 | 13 | 0.19 |
| (1,171) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:28:LEU:HB3 | 15 | 0.19 |
| (1,125) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:21:GLN:HB2 | 5 | 0.19 |
| (1,125) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:21:GLN:HB2 | 8 | 0.19 |
| (1,110) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:52:LYS:HG3 | 13 | 0.19 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD11 | 4 | 0.18 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD12 | 4 | 0.18 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD13 | 4 | 0.18 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD11 | 4 | 0.18 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD12 | 4 | 0.18 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD13 | 4 | 0.18 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD11 | 4 | 0.18 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD12 | 4 | 0.18 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD13 | 4 | 0.18 |
| (2,997) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HG | 9 | 0.18 |
| (2,997) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HG | 9 | 0.18 |
| (2,997) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HG | 9 | 0.18 |
| (2,997) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HG | 15 | 0.18 |
| (2,997) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HG | 15 | 0.18 |
| (2,997) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HG | 15 | 0.18 |
| (2,977) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:49:THR:H | 10 | 0.18 |
| (2,963) | 1:A:93:HIS:HB2 | 1:A:93:HIS:HA | 10 | 0.18 |
| (2,960) | 1:A:47:PRO:HD2 | 1:A:46:SER:HB3 | 7 | 0.18 |
| (2,960) | 1:A:47:PRO:HD2 | 1:A:46:SER:HB3 | 16 | 0.18 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB1 | 5 | 0.18 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB2 | 5 | 0.18 |
| (2,949) | 1:A:46:SER:HB3 | 1:A:48:ALA:HB3 | 5 | 0.18 |
| (2,932) | 1:A:45:ILE:HG13 | 1:A:42:PRO:HA | 2 | 0.18 |
| (2,932) | 1:A:45:ILE:HG13 | 1:A:42:PRO:HA | 9 | 0.18 |
| (2,932) | 1:A:45:ILE:HG13 | 1:A:42:PRO:HA | 10 | 0.18 |
| (2,922) | 1:A:44:SER:HB2 | 1:A:41:THR:HG21 | 1 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,922) | 1:A:44:SER:HB2 | 1:A:41:THR:HG22 | 1 | 0.18 |
| (2,922) | 1:A:44:SER:HB2 | 1:A:41:THR:HG23 | 1 | 0.18 |
| (2,876) | 1:A:42:PRO:HB2 | 1:A:43:GLU:H | 2 | 0.18 |
| (2,876) | 1:A:42:PRO:HB2 | 1:A:43:GLU:H | 9 | 0.18 |
| (2,876) | 1:A:42:PRO:HB2 | 1:A:43:GLU:H | 11 | 0.18 |
| (2,876) | 1:A:42:PRO:HB2 | 1:A:43:GLU:H | 16 | 0.18 |
| (2,872) | 1:A:42:PRO:HA | 1:A:30:ALA:HB1 | 10 | 0.18 |
| (2,872) | 1:A:42:PRO:HA | 1:A:30:ALA:HB2 | 10 | 0.18 |
| (2,872) | 1:A:42:PRO:HA | 1:A:30:ALA:HB3 | 10 | 0.18 |
| (2,857) | 1:A:37:LEU:HD21 | 1:A:54:LEU:H | 15 | 0.18 |
| (2,857) | 1:A:37:LEU:HD22 | 1:A:54:LEU:H | 15 | 0.18 |
| (2,857) | 1:A:37:LEU:HD23 | 1:A:54:LEU:H | 15 | 0.18 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:64:LEU:H | 1 | 0.18 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:64:LEU:H | 1 | 0.18 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:64:LEU:H | 1 | 0.18 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:64:LEU:H | 7 | 0.18 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:64:LEU:H | 7 | 0.18 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:64:LEU:H | 7 | 0.18 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:64:LEU:H | 10 | 0.18 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:64:LEU:H | 10 | 0.18 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:64:LEU:H | 10 | 0.18 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:33:THR:HA | 10 | 0.18 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:33:THR:HA | 10 | 0.18 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:33:THR:HA | 10 | 0.18 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:33:THR:HA | 13 | 0.18 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:33:THR:HA | 13 | 0.18 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:33:THR:HA | 13 | 0.18 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG21 | 3 | 0.18 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG22 | 3 | 0.18 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG23 | 3 | 0.18 |
| (2,765) | 1:A:61:ALA:HA | 1:A:56:ILE:HB | 9 | 0.18 |
| (2,7) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:71:ASN:HA | 9 | 0.18 |
| (2,7) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:71:ASN:HA | 9 | 0.18 |
| (2,7) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:71:ASN:HA | 9 | 0.18 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB1 | 9 | 0.18 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB2 | 9 | 0.18 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB3 | 9 | 0.18 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB1 | 11 | 0.18 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB2 | 11 | 0.18 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB3 | 11 | 0.18 |
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG21 | 4 | 0.18 |
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG22 | 4 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG23 | 4 | 0.18 |
| (2,571) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:34:ALA:H | 10 | 0.18 |
| (2,533) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:25:LEU:HB2 | 3 | 0.18 |
| (2,527) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:24:THR:H | 2 | 0.18 |
| (2,527) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:24:THR:H | 4 | 0.18 |
| (2,527) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:24:THR:H | 5 | 0.18 |
| (2,527) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:24:THR:H | 6 | 0.18 |
| (2,525) | 1:A:96:THR:HB | 1:A:96:THR:H | 6 | 0.18 |
| (2,52) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:85:PRO:HA | 6 | 0.18 |
| (2,52) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:85:PRO:HA | 6 | 0.18 |
| (2,506) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:24:THR:H | 4 | 0.18 |
| (2,496) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:23:GLN:HG2 | 4 | 0.18 |
| (2,435) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:20:GLN:HA | 10 | 0.18 |
| (2,411) | 1:A:19:GLN:HB3 | 1:A:19:GLN:H | 2 | 0.18 |
| (2,411) | 1:A:19:GLN:HB3 | 1:A:19:GLN:H | 6 | 0.18 |
| (2,402) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:23:GLN:H | 9 | 0.18 |
| (2,401) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:23:GLN:H | 10 | 0.18 |
| (2,389) | 1:A:19:GLN:HA | 1:A:19:GLN:H | 9 | 0.18 |
| (2,389) | 1:A:19:GLN:HA | 1:A:19:GLN:H | 13 | 0.18 |
| (2,377) | 1:A:18:PRO:HA | 1:A:18:PRO:HB3 | 1 | 0.18 |
| (2,377) | 1:A:18:PRO:HA | 1:A:18:PRO:HB3 | 2 | 0.18 |
| (2,377) | 1:A:18:PRO:HA | 1:A:18:PRO:HB3 | 3 | 0.18 |
| (2,377) | 1:A:18:PRO:HA | 1:A:18:PRO:HB3 | 4 | 0.18 |
| (2,377) | 1:A:18:PRO:HA | 1:A:18:PRO:HB3 | 7 | 0.18 |
| (2,377) | 1:A:18:PRO:HA | 1:A:18:PRO:HB3 | 8 | 0.18 |
| (2,377) | 1:A:18:PRO:HA | 1:A:18:PRO:HB3 | 9 | 0.18 |
| (2,377) | 1:A:18:PRO:HA | 1:A:18:PRO:HB3 | 12 | 0.18 |
| (2,377) | 1:A:18:PRO:HA | 1:A:18:PRO:HB3 | 13 | 0.18 |
| (2,377) | 1:A:18:PRO:HA | 1:A:18:PRO:HB3 | 14 | 0.18 |
| (2,377) | 1:A:18:PRO:HA | 1:A:18:PRO:HB3 | 15 | 0.18 |
| (2,377) | 1:A:18:PRO:HA | 1:A:18:PRO:HB3 | 16 | 0.18 |
| (2,361) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:17:SER:H | 4 | 0.18 |
| (2,361) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:17:SER:H | 4 | 0.18 |
| (2,361) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:17:SER:H | 4 | 0.18 |
| (2,359) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:21:GLN:HG2 | 3 | 0.18 |
| (2,359) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:21:GLN:HG2 | 3 | 0.18 |
| (2,359) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:21:GLN:HG2 | 3 | 0.18 |
| (2,344) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:15:GLY:H | 1 | 0.18 |
| (2,344) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:15:GLY:H | 2 | 0.18 |
| (2,344) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:15:GLY:H | 7 | 0.18 |
| (2,344) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:15:GLY:H | 15 | 0.18 |
| (2,33) | 1:A:84:HIS:HB2 | 1:A:84:HIS:HD2 | 14 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,325) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 12 | 0.18 |
| (2,325) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 12 | 0.18 |
| (2,325) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 12 | 0.18 |
| (2,325) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 14 | 0.18 |
| (2,325) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 14 | 0.18 |
| (2,325) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 14 | 0.18 |
| (2,314) | 1:A:85:PRO:HD2 | 1:A:84:HIS:H | 14 | 0.18 |
| (2,274) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:12:ARG:HD3 | 4 | 0.18 |
| (2,269) | 1:A:12:ARG:HG2 | 1:A:13:LEU:H | 15 | 0.18 |
| (2,237) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:85:PRO:HB3 | 9 | 0.18 |
| (2,237) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:85:PRO:HB3 | 9 | 0.18 |
| (2,237) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:85:PRO:HB3 | 9 | 0.18 |
| (2,237) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:85:PRO:HB3 | 14 | 0.18 |
| (2,237) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:85:PRO:HB3 | 14 | 0.18 |
| (2,237) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:85:PRO:HB3 | 14 | 0.18 |
| (2,22) | 1:A:40:HIS:HD2 | 1:A:40:HIS:HB2 | 8 | 0.18 |
| (2,201) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HB3 | 4 | 0.18 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB1 | 9 | 0.18 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB2 | 9 | 0.18 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB3 | 9 | 0.18 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB1 | 15 | 0.18 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB2 | 15 | 0.18 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB3 | 15 | 0.18 |
| (2,1907) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:56:ILE:HB | 6 | 0.18 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:61:ALA:HB1 | 1 | 0.18 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:61:ALA:HB2 | 1 | 0.18 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:61:ALA:HB3 | 1 | 0.18 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE2 | 1:A:61:ALA:HB1 | 1 | 0.18 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE2 | 1:A:61:ALA:HB2 | 1 | 0.18 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE2 | 1:A:61:ALA:HB3 | 1 | 0.18 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:61:ALA:HB1 | 12 | 0.18 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:61:ALA:HB2 | 12 | 0.18 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:61:ALA:HB3 | 12 | 0.18 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE2 | 1:A:61:ALA:HB1 | 12 | 0.18 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE2 | 1:A:61:ALA:HB2 | 12 | 0.18 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE2 | 1:A:61:ALA:HB3 | 12 | 0.18 |
| (2,1850) | 1:A:70:HIS:HD2 | 1:A:70:HIS:HB3 | 5 | 0.18 |
| (2,1850) | 1:A:70:HIS:HD2 | 1:A:70:HIS:HB3 | 7 | 0.18 |
| (2,1850) | 1:A:70:HIS:HD2 | 1:A:70:HIS:HB3 | 14 | 0.18 |
| (2,1850) | 1:A:70:HIS:HD2 | 1:A:70:HIS:HB3 | 15 | 0.18 |
| (2,1848) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:22:GLN:H | 13 | 0.18 |
| (2,1844) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:14:ASN:HB2 | 4 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1823) | 1:A:67:THR:HB | 1:A:36:VAL:HG11 | 8 | 0.18 |
| (2,1823) | 1:A:67:THR:HB | 1:A:36:VAL:HG12 | 8 | 0.18 |
| (2,1823) | 1:A:67:THR:HB | 1:A:36:VAL:HG13 | 8 | 0.18 |
| (2,18) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:95:HIS:HD2 | 10 | 0.18 |
| (2,1789) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:H | 9 | 0.18 |
| (2,1789) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:H | 16 | 0.18 |
| (2,1769) | 1:A:97:ARG:HA | 1:A:97:ARG:HG3 | 14 | 0.18 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:40:HIS:HB2 | 1 | 0.18 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:40:HIS:HB2 | 1 | 0.18 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:40:HIS:HB2 | 1 | 0.18 |
| (2,1755) | 1:A:92:GLN:HA | 1:A:95:HIS:HB3 | 11 | 0.18 |
| (2,1755) | 1:A:92:GLN:HA | 1:A:95:HIS:HB3 | 16 | 0.18 |
| (2,1729) | 1:A:93:HIS:HA | 1:A:90:LEU:HA | 16 | 0.18 |
| (2,1720) | 1:A:92:GLN:HG3 | 1:A:89:ALA:HA | 3 | 0.18 |
| (2,1710) | 1:A:92:GLN:HB2 | 1:A:89:ALA:HA | 2 | 0.18 |
| (2,1710) | 1:A:92:GLN:HB2 | 1:A:89:ALA:HA | 9 | 0.18 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD11 | 11 | 0.18 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD12 | 11 | 0.18 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:64:LEU:HD13 | 11 | 0.18 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD11 | 11 | 0.18 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD12 | 11 | 0.18 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:64:LEU:HD13 | 11 | 0.18 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD11 | 11 | 0.18 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD12 | 11 | 0.18 |
| (2,1687) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:64:LEU:HD13 | 11 | 0.18 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HE1 | 10 | 0.18 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HE2 | 10 | 0.18 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HE1 | 10 | 0.18 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HE2 | 10 | 0.18 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HE1 | 10 | 0.18 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HE2 | 10 | 0.18 |
| (2,1668) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 13 | 0.18 |
| (2,1668) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 13 | 0.18 |
| (2,1668) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 13 | 0.18 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:90:LEU:H | 6 | 0.18 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:90:LEU:H | 6 | 0.18 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:90:LEU:H | 6 | 0.18 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:90:LEU:H | 11 | 0.18 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:90:LEU:H | 11 | 0.18 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:90:LEU:H | 11 | 0.18 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:90:LEU:H | 13 | 0.18 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:90:LEU:H | 13 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:90:LEU:H | 13 | 0.18 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:90:LEU:H | 14 | 0.18 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:90:LEU:H | 14 | 0.18 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:90:LEU:H | 14 | 0.18 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:90:LEU:H | 16 | 0.18 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:90:LEU:H | 16 | 0.18 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:90:LEU:H | 16 | 0.18 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:85:PRO:HD2 | 7 | 0.18 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:85:PRO:HD2 | 7 | 0.18 |
| (2,1650) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:85:PRO:HD2 | 7 | 0.18 |
| (2,1602) | 1:A:86:THR:HB | 1:A:88:HIS:H | 2 | 0.18 |
| (2,1569) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:84:HIS:H | 2 | 0.18 |
| (2,1569) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:84:HIS:H | 3 | 0.18 |
| (2,1566) | 1:A:83:ASP:HB2 | 1:A:83:ASP:H | 12 | 0.18 |
| (2,156) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:71:ASN:HD22 | 1 | 0.18 |
| (2,156) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:71:ASN:HD22 | 2 | 0.18 |
| (2,156) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:71:ASN:HD22 | 3 | 0.18 |
| (2,1542) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:84:HIS:H | 4 | 0.18 |
| (2,1542) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:84:HIS:H | 11 | 0.18 |
| (2,1542) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:84:HIS:H | 12 | 0.18 |
| (2,1490) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:79:THR:HB | 13 | 0.18 |
| (2,1468) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:75:ASP:H | 4 | 0.18 |
| (2,1462) | 1:A:73:GLY:HA2 | 1:A:73:GLY:H | 3 | 0.18 |
| (2,1448) | 1:A:95:HIS:HB3 | 1:A:95:HIS:H | 3 | 0.18 |
| (2,1445) | 1:A:88:HIS:HB2 | 1:A:88:HIS:H | 2 | 0.18 |
| (2,1444) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:88:HIS:H | 3 | 0.18 |
| (2,1444) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:88:HIS:H | 11 | 0.18 |
| (2,1426) | 1:A:88:HIS:HD2 | 1:A:92:GLN:HG3 | 7 | 0.18 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:45:ILE:HA | 1 | 0.18 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:45:ILE:HA | 1 | 0.18 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:45:ILE:HA | 1 | 0.18 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:45:ILE:HA | 2 | 0.18 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:45:ILE:HA | 2 | 0.18 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:45:ILE:HA | 2 | 0.18 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:45:ILE:HA | 6 | 0.18 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:45:ILE:HA | 6 | 0.18 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:45:ILE:HA | 6 | 0.18 |
| (2,1367) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:98:LEU:H | 10 | 0.18 |
| (2,1367) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:98:LEU:H | 15 | 0.18 |
| (2,1358) | 1:A:70:HIS:HB3 | 1:A:71:ASN:HD22 | 16 | 0.18 |
| (2,1350) | 1:A:70:HIS:HB3 | 1:A:71:ASN:H | 14 | 0.18 |
| (2,1334) | 1:A:69:THR:HA | 1:A:74:LEU:H | 9 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1301) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:65:ARG:H | 12 | 0.18 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 10 | 0.18 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 10 | 0.18 |
| (2,1286) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 10 | 0.18 |
| (2,1281) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:65:ARG:HA | 2 | 0.18 |
| (2,1281) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:65:ARG:HA | 3 | 0.18 |
| (2,1281) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:65:ARG:HA | 4 | 0.18 |
| (2,1281) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:65:ARG:HA | 5 | 0.18 |
| (2,1281) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:65:ARG:HA | 12 | 0.18 |
| (2,1281) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:65:ARG:HA | 14 | 0.18 |
| (2,1276) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:62:LEU:HA | 11 | 0.18 |
| (2,1224) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:63:GLU:HA | 3 | 0.18 |
| (2,1224) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:63:GLU:HA | 5 | 0.18 |
| (2,1224) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:63:GLU:HA | 10 | 0.18 |
| (2,1224) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:63:GLU:HA | 13 | 0.18 |
| (2,1203) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:63:GLU:H | 12 | 0.18 |
| (2,1174) | 1:A:61:ALA:HB1 | 1:A:58:SER:HB2 | 9 | 0.18 |
| (2,1174) | 1:A:61:ALA:HB2 | 1:A:58:SER:HB2 | 9 | 0.18 |
| (2,1174) | 1:A:61:ALA:HB3 | 1:A:58:SER:HB2 | 9 | 0.18 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB1 | 1:A:64:LEU:HB3 | 11 | 0.18 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB2 | 1:A:64:LEU:HB3 | 11 | 0.18 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB3 | 1:A:64:LEU:HB3 | 11 | 0.18 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB1 | 1:A:64:LEU:HB3 | 15 | 0.18 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB2 | 1:A:64:LEU:HB3 | 15 | 0.18 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB3 | 1:A:64:LEU:HB3 | 15 | 0.18 |
| (2,1157) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:60:THR:HB | 6 | 0.18 |
| (2,1157) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:60:THR:HB | 6 | 0.18 |
| (2,1157) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:60:THR:HB | 6 | 0.18 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD21 | 4 | 0.18 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD22 | 4 | 0.18 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD23 | 4 | 0.18 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD21 | 8 | 0.18 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD22 | 8 | 0.18 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD23 | 8 | 0.18 |
| (2,1138) | 1:A:86:THR:HA | 1:A:86:THR:H | 5 | 0.18 |
| (2,1138) | 1:A:86:THR:HA | 1:A:86:THR:H | 8 | 0.18 |
| (2,111) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:4:SER:HB3 | 8 | 0.18 |
| (2,111) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:4:SER:HB3 | 8 | 0.18 |
| (2,111) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:4:SER:HB3 | 8 | 0.18 |
| (2,1073) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:54:LEU:HB2 | 10 | 0.18 |
| (2,1054) | 1:A:52:LYS:HG2 | 1:A:53:ASP:H | 6 | 0.18 |
| (2,1054) | 1:A:52:LYS:HG2 | 1:A:53:ASP:H | 8 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1054) | 1:A:52:LYS:HG2 | 1:A:53:ASP:H | 10 | 0.18 |
| (2,1029) | 1:A:51:PHE:HB3 | 1:A:52:LYS:HG2 | 4 | 0.18 |
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD21 | 1 | 0.18 |
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD22 | 1 | 0.18 |
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD23 | 1 | 0.18 |
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD21 | 3 | 0.18 |
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD22 | 3 | 0.18 |
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD23 | 3 | 0.18 |
| (1,95) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:71:ASN:HA | 1 | 0.18 |
| (1,95) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:71:ASN:HA | 2 | 0.18 |
| (1,95) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:71:ASN:HA | 3 | 0.18 |
| (1,74) | 1:A:89:ALA:H | 1:A:88:HIS:H | 4 | 0.18 |
| (1,74) | 1:A:89:ALA:H | 1:A:88:HIS:H | 6 | 0.18 |
| (1,74) | 1:A:89:ALA:H | 1:A:88:HIS:H | 9 | 0.18 |
| (1,74) | 1:A:89:ALA:H | 1:A:88:HIS:H | 15 | 0.18 |
| (1,7) | 1:A:61:ALA:H | 1:A:57:ASP:H | 5 | 0.18 |
| (1,68) | 1:A:20:GLN:H | 1:A:21:GLN:H | 11 | 0.18 |
| (1,601) | 1:A:33:THR:H | 1:A:34:ALA:H | 2 | 0.18 |
| (1,601) | 1:A:33:THR:H | 1:A:34:ALA:H | 4 | 0.18 |
| (1,601) | 1:A:33:THR:H | 1:A:34:ALA:H | 7 | 0.18 |
| (1,600) | 1:A:33:THR:H | 1:A:30:ALA:HA | 5 | 0.18 |
| (1,592) | 1:A:101:SER:H | 1:A:101:SER:HB2 | 4 | 0.18 |
| (1,532) | 1:A:93:HIS:H | 1:A:93:HIS:HD2 | 7 | 0.18 |
| (1,532) | 1:A:93:HIS:H | 1:A:93:HIS:HD2 | 11 | 0.18 |
| (1,490) | 1:A:102:HIS:H | 1:A:102:HIS:HB3 | 8 | 0.18 |
| (1,440) | 1:A:75:ASP:H | 1:A:74:LEU:HA | 3 | 0.18 |
| (1,44) | 1:A:79:THR:H | 1:A:78:PRO:HA | 14 | 0.18 |
| (1,416) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 3 | 0.18 |
| (1,416) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 3 | 0.18 |
| (1,416) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 3 | 0.18 |
| (1,416) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 10 | 0.18 |
| (1,416) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 10 | 0.18 |
| (1,416) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 10 | 0.18 |
| (1,386) | 1:A:66:ASN:HD21 | 1:A:66:ASN:HD22 | 11 | 0.18 |
| (1,38) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:74:LEU:H | 3 | 0.18 |
| (1,38) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:74:LEU:H | 8 | 0.18 |
| (1,38) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:74:LEU:H | 14 | 0.18 |
| (1,376) | 1:A:58:SER:H | 1:A:58:SER:HB3 | 16 | 0.18 |
| (1,347) | 1:A:17:SER:H | 1:A:17:SER:HB2 | 16 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:72:THR:H | 12 | 0.18 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB1 | 6 | 0.18 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB2 | 6 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|--------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB3 | 6 | 0.18 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB1 | 11 | 0.18 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB2 | 11 | 0.18 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB3 | 11 | 0.18 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB1 | 13 | 0.18 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB2 | 13 | 0.18 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB3 | 13 | 0.18 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB1 | 14 | 0.18 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB2 | 14 | 0.18 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB3 | 14 | 0.18 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB1 | 16 | 0.18 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB2 | 16 | 0.18 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB3 | 16 | 0.18 |
| (1,309) | 1:A:56:ILE:H | 1:A:51:PHE:HB2 | 8 | 0.18 |
| (1,29) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:61:ALA:H | 3 | 0.18 |
| (1,29) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:61:ALA:H | 4 | 0.18 |
| (1,29) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:61:ALA:H | 7 | 0.18 |
| (1,29) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:61:ALA:H | 10 | 0.18 |
| (1,29) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:61:ALA:H | 11 | 0.18 |
| (1,29) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:61:ALA:H | 15 | 0.18 |
| (1,275) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:82:PHE:H | 15 | 0.18 |
| (1,239) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG13 | 8 | 0.18 |
| (1,239) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG13 | 15 | 0.18 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG21 | 2 | 0.18 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG22 | 2 | 0.18 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG23 | 2 | 0.18 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG21 | 9 | 0.18 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG22 | 9 | 0.18 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG23 | 9 | 0.18 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG21 | 10 | 0.18 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG22 | 10 | 0.18 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG23 | 10 | 0.18 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG21 | 15 | 0.18 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG22 | 15 | 0.18 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG23 | 15 | 0.18 |
| (1,23) | 1:A:44:SER:H | 1:A:45:ILE:H | 15 | 0.18 |
| (1,22) | 1:A:43:GLU:H | 1:A:44:SER:H | 1 | 0.18 |
| (1,171) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:28:LEU:HB3 | 1 | 0.18 |
| (1,171) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:28:LEU:HB3 | 2 | 0.18 |
| (1,171) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:28:LEU:HB3 | 3 | 0.18 |
| (1,171) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:28:LEU:HB3 | 4 | 0.18 |
| (1,171) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:28:LEU:HB3 | 9 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,171) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:28:LEU:HB3 | 10 | 0.18 |
| (1,134) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:25:LEU:HB2 | 7 | 0.18 |
| (1,134) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:25:LEU:HB2 | 14 | 0.18 |
| (1,125) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:21:GLN:HB2 | 3 | 0.18 |
| (1,125) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:21:GLN:HB2 | 6 | 0.18 |
| (1,110) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:52:LYS:HG3 | 1 | 0.18 |
| (1,110) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:52:LYS:HG3 | 3 | 0.18 |
| (1,103) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:71:ASN:HB2 | 6 | 0.18 |
| (1,103) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:71:ASN:HB2 | 7 | 0.18 |
| (2,932) | 1:A:45:ILE:HG13 | 1:A:42:PRO:HA | 11 | 0.17 |
| (2,920) | 1:A:44:SER:HA | 1:A:45:ILE:HD11 | 8 | 0.17 |
| (2,920) | 1:A:44:SER:HA | 1:A:45:ILE:HD12 | 8 | 0.17 |
| (2,920) | 1:A:44:SER:HA | 1:A:45:ILE:HD13 | 8 | 0.17 |
| (2,897) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:44:SER:HB3 | 3 | 0.17 |
| (2,897) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:44:SER:HB3 | 3 | 0.17 |
| (2,897) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:44:SER:HB3 | 3 | 0.17 |
| (2,889) | 1:A:42:PRO:HD2 | 1:A:41:THR:HA | 15 | 0.17 |
| (2,882) | 1:A:42:PRO:HD2 | 1:A:42:PRO:HG2 | 1 | 0.17 |
| (2,882) | 1:A:42:PRO:HD2 | 1:A:42:PRO:HG2 | 4 | 0.17 |
| (2,882) | 1:A:42:PRO:HD2 | 1:A:42:PRO:HG2 | 6 | 0.17 |
| (2,882) | 1:A:42:PRO:HD2 | 1:A:42:PRO:HG2 | 7 | 0.17 |
| (2,882) | 1:A:42:PRO:HD2 | 1:A:42:PRO:HG2 | 10 | 0.17 |
| (2,882) | 1:A:42:PRO:HD2 | 1:A:42:PRO:HG2 | 11 | 0.17 |
| (2,882) | 1:A:42:PRO:HD2 | 1:A:42:PRO:HG2 | 14 | 0.17 |
| (2,882) | 1:A:42:PRO:HD2 | 1:A:42:PRO:HG2 | 15 | 0.17 |
| (2,857) | 1:A:37:LEU:HD21 | 1:A:54:LEU:H | 14 | 0.17 |
| (2,857) | 1:A:37:LEU:HD22 | 1:A:54:LEU:H | 14 | 0.17 |
| (2,857) | 1:A:37:LEU:HD23 | 1:A:54:LEU:H | 14 | 0.17 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:74:LEU:HA | 15 | 0.17 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:74:LEU:HA | 15 | 0.17 |
| (2,850) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:74:LEU:HA | 15 | 0.17 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:36:VAL:H | 1 | 0.17 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:36:VAL:H | 1 | 0.17 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:36:VAL:H | 1 | 0.17 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:36:VAL:H | 5 | 0.17 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:36:VAL:H | 5 | 0.17 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:36:VAL:H | 5 | 0.17 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:36:VAL:H | 12 | 0.17 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:36:VAL:H | 12 | 0.17 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:36:VAL:H | 12 | 0.17 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:64:LEU:H | 4 | 0.17 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:64:LEU:H | 4 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:64:LEU:H | 4 | 0.17 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG21 | 6 | 0.17 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG22 | 6 | 0.17 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG23 | 6 | 0.17 |
| (2,786) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:34:ALA:HB1 | 11 | 0.17 |
| (2,786) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:34:ALA:HB2 | 11 | 0.17 |
| (2,786) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:34:ALA:HB3 | 11 | 0.17 |
| (2,785) | 1:A:27:THR:HB | 1:A:23:GLN:HB2 | 5 | 0.17 |
| (2,785) | 1:A:27:THR:HB | 1:A:23:GLN:HB2 | 6 | 0.17 |
| (2,735) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:85:PRO:HB2 | 7 | 0.17 |
| (2,735) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:85:PRO:HB2 | 7 | 0.17 |
| (2,735) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:85:PRO:HB2 | 7 | 0.17 |
| (2,7) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:71:ASN:HA | 14 | 0.17 |
| (2,7) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:71:ASN:HA | 14 | 0.17 |
| (2,7) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:71:ASN:HA | 14 | 0.17 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB1 | 10 | 0.17 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB2 | 10 | 0.17 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB3 | 10 | 0.17 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB1 | 14 | 0.17 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB2 | 14 | 0.17 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB3 | 14 | 0.17 |
| (2,651) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:H | 11 | 0.17 |
| (2,651) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:H | 11 | 0.17 |
| (2,651) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:H | 11 | 0.17 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB1 | 1 | 0.17 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB2 | 1 | 0.17 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB3 | 1 | 0.17 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB1 | 6 | 0.17 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB2 | 6 | 0.17 |
| (2,610) | 1:A:28:LEU:HA | 1:A:31:ALA:HB3 | 6 | 0.17 |
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG21 | 3 | 0.17 |
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG22 | 3 | 0.17 |
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG23 | 3 | 0.17 |
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG21 | 12 | 0.17 |
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG22 | 12 | 0.17 |
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG23 | 12 | 0.17 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG21 | 2 | 0.17 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG22 | 2 | 0.17 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:81:ILE:HG23 | 2 | 0.17 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG21 | 2 | 0.17 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG22 | 2 | 0.17 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:81:ILE:HG23 | 2 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG21 | 2 | 0.17 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG22 | 2 | 0.17 |
| (2,57) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:81:ILE:HG23 | 2 | 0.17 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:64:LEU:HD11 | 8 | 0.17 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:64:LEU:HD12 | 8 | 0.17 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:64:LEU:HD13 | 8 | 0.17 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:64:LEU:HD11 | 8 | 0.17 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:64:LEU:HD12 | 8 | 0.17 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:64:LEU:HD13 | 8 | 0.17 |
| (2,552) | 1:A:25:LEU:HB3 | 1:A:25:LEU:HA | 1 | 0.17 |
| (2,552) | 1:A:25:LEU:HB3 | 1:A:25:LEU:HA | 14 | 0.17 |
| (2,528) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:35:THR:H | 2 | 0.17 |
| (2,527) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:24:THR:H | 15 | 0.17 |
| (2,527) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:24:THR:H | 16 | 0.17 |
| (2,525) | 1:A:96:THR:HB | 1:A:96:THR:H | 11 | 0.17 |
| (2,51) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HB3 | 8 | 0.17 |
| (2,51) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HB3 | 8 | 0.17 |
| (2,489) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:22:GLN:HA | 8 | 0.17 |
| (2,477) | 1:A:25:LEU:HG | 1:A:25:LEU:H | 13 | 0.17 |
| (2,464) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HA | 6 | 0.17 |
| (2,435) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:20:GLN:HA | 8 | 0.17 |
| (2,435) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:20:GLN:HA | 13 | 0.17 |
| (2,411) | 1:A:19:GLN:HB3 | 1:A:19:GLN:H | 10 | 0.17 |
| (2,411) | 1:A:19:GLN:HB3 | 1:A:19:GLN:H | 12 | 0.17 |
| (2,402) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:23:GLN:H | 13 | 0.17 |
| (2,389) | 1:A:19:GLN:HA | 1:A:19:GLN:H | 14 | 0.17 |
| (2,377) | 1:A:18:PRO:HA | 1:A:18:PRO:HB3 | 10 | 0.17 |
| (2,361) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:17:SER:H | 2 | 0.17 |
| (2,361) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:17:SER:H | 2 | 0.17 |
| (2,361) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:17:SER:H | 2 | 0.17 |
| (2,361) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:17:SER:H | 9 | 0.17 |
| (2,361) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:17:SER:H | 9 | 0.17 |
| (2,361) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:17:SER:H | 9 | 0.17 |
| (2,36) | 1:A:82:PHE:HZ | 1:A:58:SER:HA | 10 | 0.17 |
| (2,344) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:15:GLY:H | 4 | 0.17 |
| (2,344) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:15:GLY:H | 5 | 0.17 |
| (2,344) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:15:GLY:H | 9 | 0.17 |
| (2,344) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:15:GLY:H | 14 | 0.17 |
| (2,344) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:15:GLY:H | 16 | 0.17 |
| (2,34) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:51:PHE:HZ | 6 | 0.17 |
| (2,34) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:51:PHE:HZ | 14 | 0.17 |
| (2,33) | 1:A:84:HIS:HB2 | 1:A:84:HIS:HD2 | 5 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,33) | 1:A:84:HIS:HB2 | 1:A:84:HIS:HD2 | 11 | 0.17 |
| (2,33) | 1:A:84:HIS:HB2 | 1:A:84:HIS:HD2 | 15 | 0.17 |
| (2,274) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:12:ARG:HD3 | 7 | 0.17 |
| (2,274) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:12:ARG:HD3 | 11 | 0.17 |
| (2,274) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:12:ARG:HD3 | 13 | 0.17 |
| (2,201) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HB3 | 3 | 0.17 |
| (2,201) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HB3 | 8 | 0.17 |
| (2,201) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HB3 | 15 | 0.17 |
| (2,1914) | 1:A:91:THR:HB | 1:A:92:GLN:H | 1 | 0.17 |
| (2,1885) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:13:LEU:HA | 6 | 0.17 |
| (2,1850) | 1:A:70:HIS:HD2 | 1:A:70:HIS:HB3 | 16 | 0.17 |
| (2,1848) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:22:GLN:H | 1 | 0.17 |
| (2,1844) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:14:ASN:HB2 | 16 | 0.17 |
| (2,1835) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:95:HIS:HD2 | 3 | 0.17 |
| (2,1835) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:95:HIS:HD2 | 3 | 0.17 |
| (2,1835) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:95:HIS:HD2 | 3 | 0.17 |
| (2,1835) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:95:HIS:HD2 | 16 | 0.17 |
| (2,1835) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:95:HIS:HD2 | 16 | 0.17 |
| (2,1835) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:95:HIS:HD2 | 16 | 0.17 |
| (2,1819) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:8:ASP:HB2 | 3 | 0.17 |
| (2,1819) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:8:ASP:HB2 | 3 | 0.17 |
| (2,1819) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:8:ASP:HB2 | 3 | 0.17 |
| (2,1789) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:H | 10 | 0.17 |
| (2,1789) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:H | 12 | 0.17 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:40:HIS:HB2 | 6 | 0.17 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:40:HIS:HB2 | 6 | 0.17 |
| (2,1763) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:40:HIS:HB2 | 6 | 0.17 |
| (2,1755) | 1:A:92:GLN:HA | 1:A:95:HIS:HB3 | 2 | 0.17 |
| (2,1755) | 1:A:92:GLN:HA | 1:A:95:HIS:HB3 | 15 | 0.17 |
| (2,1741) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HB2 | 6 | 0.17 |
| (2,1736) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:93:HIS:HD2 | 10 | 0.17 |
| (2,1714) | 1:A:92:GLN:HG2 | 1:A:92:GLN:HA | 8 | 0.17 |
| (2,1710) | 1:A:92:GLN:HB2 | 1:A:89:ALA:HA | 1 | 0.17 |
| (2,1710) | 1:A:92:GLN:HB2 | 1:A:89:ALA:HA | 16 | 0.17 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HE1 | 7 | 0.17 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HE2 | 7 | 0.17 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HE1 | 7 | 0.17 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HE2 | 7 | 0.17 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HE1 | 7 | 0.17 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HE2 | 7 | 0.17 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HB2 | 3 | 0.17 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:HB2 | 3 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:HB2 | 3 | 0.17 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HB2 | 11 | 0.17 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:HB2 | 11 | 0.17 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:HB2 | 11 | 0.17 |
| (2,1666) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:90:LEU:HA | 9 | 0.17 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB1 | 1:A:90:LEU:H | 15 | 0.17 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB2 | 1:A:90:LEU:H | 15 | 0.17 |
| (2,1659) | 1:A:89:ALA:HB3 | 1:A:90:LEU:H | 15 | 0.17 |
| (2,1602) | 1:A:86:THR:HB | 1:A:88:HIS:H | 3 | 0.17 |
| (2,1602) | 1:A:86:THR:HB | 1:A:88:HIS:H | 12 | 0.17 |
| (2,1569) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:84:HIS:H | 5 | 0.17 |
| (2,1569) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:84:HIS:H | 12 | 0.17 |
| (2,1566) | 1:A:83:ASP:HB2 | 1:A:83:ASP:H | 1 | 0.17 |
| (2,1566) | 1:A:83:ASP:HB2 | 1:A:83:ASP:H | 13 | 0.17 |
| (2,156) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:71:ASN:HD22 | 4 | 0.17 |
| (2,156) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:71:ASN:HD22 | 5 | 0.17 |
| (2,156) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:71:ASN:HD22 | 16 | 0.17 |
| (2,1538) | 1:A:98:LEU:HB3 | 1:A:99:THR:H | 8 | 0.17 |
| (2,1490) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:79:THR:HB | 16 | 0.17 |
| (2,1473) | 1:A:75:ASP:HB3 | 1:A:75:ASP:H | 5 | 0.17 |
| (2,1473) | 1:A:75:ASP:HB3 | 1:A:75:ASP:H | 10 | 0.17 |
| (2,1462) | 1:A:73:GLY:HA2 | 1:A:73:GLY:H | 1 | 0.17 |
| (2,1462) | 1:A:73:GLY:HA2 | 1:A:73:GLY:H | 5 | 0.17 |
| (2,1462) | 1:A:73:GLY:HA2 | 1:A:73:GLY:H | 7 | 0.17 |
| (2,1462) | 1:A:73:GLY:HA2 | 1:A:73:GLY:H | 8 | 0.17 |
| (2,1462) | 1:A:73:GLY:HA2 | 1:A:73:GLY:H | 9 | 0.17 |
| (2,1462) | 1:A:73:GLY:HA2 | 1:A:73:GLY:H | 12 | 0.17 |
| (2,1462) | 1:A:73:GLY:HA2 | 1:A:73:GLY:H | 13 | 0.17 |
| (2,1462) | 1:A:73:GLY:HA2 | 1:A:73:GLY:H | 14 | 0.17 |
| (2,1462) | 1:A:73:GLY:HA2 | 1:A:73:GLY:H | 15 | 0.17 |
| (2,1453) | 1:A:40:HIS:HA | 1:A:40:HIS:HB2 | 2 | 0.17 |
| (2,1453) | 1:A:40:HIS:HA | 1:A:40:HIS:HB2 | 9 | 0.17 |
| (2,1453) | 1:A:40:HIS:HA | 1:A:40:HIS:HB2 | 12 | 0.17 |
| (2,1445) | 1:A:88:HIS:HB2 | 1:A:88:HIS:H | 9 | 0.17 |
| (2,1444) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:88:HIS:H | 12 | 0.17 |
| (2,1444) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:88:HIS:H | 13 | 0.17 |
| (2,1444) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:88:HIS:H | 16 | 0.17 |
| (2,1433) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:70:HIS:HD2 | 9 | 0.17 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:45:ILE:HA | 3 | 0.17 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:45:ILE:HA | 3 | 0.17 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:45:ILE:HA | 3 | 0.17 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:45:ILE:HA | 8 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:45:ILE:HA | 8 | 0.17 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:45:ILE:HA | 8 | 0.17 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:45:ILE:HA | 9 | 0.17 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:45:ILE:HA | 9 | 0.17 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:45:ILE:HA | 9 | 0.17 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:45:ILE:HA | 10 | 0.17 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:45:ILE:HA | 10 | 0.17 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:45:ILE:HA | 10 | 0.17 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:45:ILE:HA | 11 | 0.17 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:45:ILE:HA | 11 | 0.17 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:45:ILE:HA | 11 | 0.17 |
| (2,1374) | 1:A:97:ARG:HD2 | 1:A:97:ARG:HB3 | 2 | 0.17 |
| (2,1339) | 1:A:69:THR:HA | 1:A:74:LEU:HB2 | 2 | 0.17 |
| (2,1334) | 1:A:69:THR:HA | 1:A:74:LEU:H | 1 | 0.17 |
| (2,133) | 1:A:35:THR:HG21 | 1:A:36:VAL:H | 15 | 0.17 |
| (2,133) | 1:A:35:THR:HG22 | 1:A:36:VAL:H | 15 | 0.17 |
| (2,133) | 1:A:35:THR:HG23 | 1:A:36:VAL:H | 15 | 0.17 |
| (2,1301) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:65:ARG:H | 11 | 0.17 |
| (2,1281) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:65:ARG:HA | 8 | 0.17 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD21 | 8 | 0.17 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD22 | 8 | 0.17 |
| (2,1266) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD23 | 8 | 0.17 |
| (2,1224) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:63:GLU:HA | 7 | 0.17 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG11 | 11 | 0.17 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG12 | 11 | 0.17 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG13 | 11 | 0.17 |
| (2,1219) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:60:THR:HG21 | 15 | 0.17 |
| (2,1219) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:60:THR:HG22 | 15 | 0.17 |
| (2,1219) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:60:THR:HG23 | 15 | 0.17 |
| (2,1215) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:ASN:H | 11 | 0.17 |
| (2,1204) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:59:LEU:HA | 8 | 0.17 |
| (2,1188) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:63:GLU:H | 10 | 0.17 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB1 | 1:A:64:LEU:HB3 | 16 | 0.17 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB2 | 1:A:64:LEU:HB3 | 16 | 0.17 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB3 | 1:A:64:LEU:HB3 | 16 | 0.17 |
| (2,1138) | 1:A:86:THR:HA | 1:A:86:THR:H | 1 | 0.17 |
| (2,1138) | 1:A:86:THR:HA | 1:A:86:THR:H | 2 | 0.17 |
| (2,1138) | 1:A:86:THR:HA | 1:A:86:THR:H | 3 | 0.17 |
| (2,1138) | 1:A:86:THR:HA | 1:A:86:THR:H | 4 | 0.17 |
| (2,1138) | 1:A:86:THR:HA | 1:A:86:THR:H | 6 | 0.17 |
| (2,1138) | 1:A:86:THR:HA | 1:A:86:THR:H | 7 | 0.17 |
| (2,1138) | 1:A:86:THR:HA | 1:A:86:THR:H | 9 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1138) | 1:A:86:THR:HA | 1:A:86:THR:H | 10 | 0.17 |
| (2,1138) | 1:A:86:THR:HA | 1:A:86:THR:H | 11 | 0.17 |
| (2,1138) | 1:A:86:THR:HA | 1:A:86:THR:H | 12 | 0.17 |
| (2,1138) | 1:A:86:THR:HA | 1:A:86:THR:H | 13 | 0.17 |
| (2,1138) | 1:A:86:THR:HA | 1:A:86:THR:H | 14 | 0.17 |
| (2,1138) | 1:A:86:THR:HA | 1:A:86:THR:H | 15 | 0.17 |
| (2,1138) | 1:A:86:THR:HA | 1:A:86:THR:H | 16 | 0.17 |
| (2,111) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:4:SER:HB3 | 3 | 0.17 |
| (2,111) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:4:SER:HB3 | 3 | 0.17 |
| (2,111) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:4:SER:HB3 | 3 | 0.17 |
| (2,1100) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:90:LEU:HB2 | 5 | 0.17 |
| (2,1100) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:90:LEU:HB2 | 5 | 0.17 |
| (2,1100) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:90:LEU:HB2 | 5 | 0.17 |
| (2,1073) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:54:LEU:HB2 | 2 | 0.17 |
| (2,1073) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:54:LEU:HB2 | 6 | 0.17 |
| (2,1073) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:54:LEU:HB2 | 8 | 0.17 |
| (2,1073) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:54:LEU:HB2 | 13 | 0.17 |
| (2,1054) | 1:A:52:LYS:HG2 | 1:A:53:ASP:H | 7 | 0.17 |
| (2,1044) | 1:A:52:LYS:HB2 | 1:A:52:LYS:HE2 | 6 | 0.17 |
| (2,1006) | 1:A:57:ASP:HA | 1:A:57:ASP:H | 16 | 0.17 |
| (2,1005) | 1:A:57:ASP:HA | 1:A:57:ASP:HB2 | 1 | 0.17 |
| (1,95) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:71:ASN:HA | 4 | 0.17 |
| (1,95) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:71:ASN:HA | 5 | 0.17 |
| (1,95) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:71:ASN:HA | 16 | 0.17 |
| (1,86) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:28:LEU:HD11 | 14 | 0.17 |
| (1,86) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:28:LEU:HD12 | 14 | 0.17 |
| (1,86) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:28:LEU:HD13 | 14 | 0.17 |
| (1,74) | 1:A:89:ALA:H | 1:A:88:HIS:H | 14 | 0.17 |
| (1,68) | 1:A:20:GLN:H | 1:A:21:GLN:H | 10 | 0.17 |
| (1,68) | 1:A:20:GLN:H | 1:A:21:GLN:H | 12 | 0.17 |
| (1,68) | 1:A:20:GLN:H | 1:A:21:GLN:H | 16 | 0.17 |
| (1,601) | 1:A:33:THR:H | 1:A:34:ALA:H | 1 | 0.17 |
| (1,601) | 1:A:33:THR:H | 1:A:34:ALA:H | 3 | 0.17 |
| (1,601) | 1:A:33:THR:H | 1:A:34:ALA:H | 5 | 0.17 |
| (1,601) | 1:A:33:THR:H | 1:A:34:ALA:H | 15 | 0.17 |
| (1,601) | 1:A:33:THR:H | 1:A:34:ALA:H | 16 | 0.17 |
| (1,600) | 1:A:33:THR:H | 1:A:30:ALA:HA | 6 | 0.17 |
| (1,561) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:21:GLN:HB2 | 1 | 0.17 |
| (1,532) | 1:A:93:HIS:H | 1:A:93:HIS:HD2 | 9 | 0.17 |
| (1,484) | 1:A:68:LEU:H | 1:A:67:THR:HB | 12 | 0.17 |
| (1,484) | 1:A:68:LEU:H | 1:A:67:THR:HB | 13 | 0.17 |
| (1,475) | 1:A:68:LEU:H | 1:A:68:LEU:HB2 | 7 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,442) | 1:A:75:ASP:H | 1:A:75:ASP:HB3 | 5 | 0.17 |
| (1,442) | 1:A:75:ASP:H | 1:A:75:ASP:HB3 | 10 | 0.17 |
| (1,440) | 1:A:75:ASP:H | 1:A:74:LEU:HA | 11 | 0.17 |
| (1,440) | 1:A:75:ASP:H | 1:A:74:LEU:HA | 13 | 0.17 |
| (1,44) | 1:A:79:THR:H | 1:A:78:PRO:HA | 3 | 0.17 |
| (1,406) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:47:PRO:HA | 8 | 0.17 |
| (1,40) | 1:A:16:LEU:H | 1:A:15:GLY:H | 16 | 0.17 |
| (1,398) | 1:A:44:SER:H | 1:A:43:GLU:HG2 | 14 | 0.17 |
| (1,386) | 1:A:66:ASN:HD21 | 1:A:66:ASN:HD22 | 1 | 0.17 |
| (1,386) | 1:A:66:ASN:HD21 | 1:A:66:ASN:HD22 | 2 | 0.17 |
| (1,386) | 1:A:66:ASN:HD21 | 1:A:66:ASN:HD22 | 3 | 0.17 |
| (1,386) | 1:A:66:ASN:HD21 | 1:A:66:ASN:HD22 | 4 | 0.17 |
| (1,386) | 1:A:66:ASN:HD21 | 1:A:66:ASN:HD22 | 5 | 0.17 |
| (1,386) | 1:A:66:ASN:HD21 | 1:A:66:ASN:HD22 | 6 | 0.17 |
| (1,386) | 1:A:66:ASN:HD21 | 1:A:66:ASN:HD22 | 7 | 0.17 |
| (1,386) | 1:A:66:ASN:HD21 | 1:A:66:ASN:HD22 | 8 | 0.17 |
| (1,386) | 1:A:66:ASN:HD21 | 1:A:66:ASN:HD22 | 9 | 0.17 |
| (1,386) | 1:A:66:ASN:HD21 | 1:A:66:ASN:HD22 | 10 | 0.17 |
| (1,386) | 1:A:66:ASN:HD21 | 1:A:66:ASN:HD22 | 12 | 0.17 |
| (1,386) | 1:A:66:ASN:HD21 | 1:A:66:ASN:HD22 | 13 | 0.17 |
| (1,386) | 1:A:66:ASN:HD21 | 1:A:66:ASN:HD22 | 14 | 0.17 |
| (1,386) | 1:A:66:ASN:HD21 | 1:A:66:ASN:HD22 | 15 | 0.17 |
| (1,386) | 1:A:66:ASN:HD21 | 1:A:66:ASN:HD22 | 16 | 0.17 |
| (1,376) | 1:A:58:SER:H | 1:A:58:SER:HB3 | 3 | 0.17 |
| (1,348) | 1:A:17:SER:H | 1:A:20:GLN:HB3 | 11 | 0.17 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB1 | 15 | 0.17 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB2 | 15 | 0.17 |
| (1,339) | 1:A:90:LEU:H | 1:A:89:ALA:HB3 | 15 | 0.17 |
| (1,273) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:78:PRO:HA | 15 | 0.17 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG21 | 3 | 0.17 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG22 | 3 | 0.17 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG23 | 3 | 0.17 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG21 | 8 | 0.17 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG22 | 8 | 0.17 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG23 | 8 | 0.17 |
| (1,23) | 1:A:44:SER:H | 1:A:45:ILE:H | 10 | 0.17 |
| (1,171) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:28:LEU:HB3 | 5 | 0.17 |
| (1,171) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:28:LEU:HB3 | 6 | 0.17 |
| (1,171) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:28:LEU:HB3 | 12 | 0.17 |
| (1,171) | 1:A:28:LEU:H | 1:A:28:LEU:HB3 | 14 | 0.17 |
| (1,134) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:25:LEU:HB2 | 13 | 0.17 |
| (1,130) | 1:A:69:THR:H | 1:A:69:THR:HB | 4 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,110) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:52:LYS:HG3 | 8 | 0.17 |
| (1,103) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:71:ASN:HB2 | 4 | 0.17 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD11 | 13 | 0.16 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD12 | 13 | 0.16 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD13 | 13 | 0.16 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD11 | 13 | 0.16 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD12 | 13 | 0.16 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD13 | 13 | 0.16 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD11 | 13 | 0.16 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD12 | 13 | 0.16 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD13 | 13 | 0.16 |
| (2,997) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HG | 4 | 0.16 |
| (2,997) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HG | 4 | 0.16 |
| (2,997) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HG | 4 | 0.16 |
| (2,980) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:54:LEU:HG | 3 | 0.16 |
| (2,980) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:54:LEU:HG | 13 | 0.16 |
| (2,977) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:49:THR:H | 1 | 0.16 |
| (2,977) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:49:THR:H | 2 | 0.16 |
| (2,977) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:49:THR:H | 6 | 0.16 |
| (2,977) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:49:THR:H | 7 | 0.16 |
| (2,977) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:49:THR:H | 16 | 0.16 |
| (2,900) | 1:A:41:THR:HG21 | 1:A:43:GLU:HB3 | 6 | 0.16 |
| (2,900) | 1:A:41:THR:HG22 | 1:A:43:GLU:HB3 | 6 | 0.16 |
| (2,900) | 1:A:41:THR:HG23 | 1:A:43:GLU:HB3 | 6 | 0.16 |
| (2,889) | 1:A:42:PRO:HD2 | 1:A:41:THR:HA | 10 | 0.16 |
| (2,889) | 1:A:42:PRO:HD2 | 1:A:41:THR:HA | 14 | 0.16 |
| (2,882) | 1:A:42:PRO:HD2 | 1:A:42:PRO:HG2 | 2 | 0.16 |
| (2,882) | 1:A:42:PRO:HD2 | 1:A:42:PRO:HG2 | 3 | 0.16 |
| (2,882) | 1:A:42:PRO:HD2 | 1:A:42:PRO:HG2 | 5 | 0.16 |
| (2,882) | 1:A:42:PRO:HD2 | 1:A:42:PRO:HG2 | 8 | 0.16 |
| (2,882) | 1:A:42:PRO:HD2 | 1:A:42:PRO:HG2 | 9 | 0.16 |
| (2,882) | 1:A:42:PRO:HD2 | 1:A:42:PRO:HG2 | 12 | 0.16 |
| (2,882) | 1:A:42:PRO:HD2 | 1:A:42:PRO:HG2 | 13 | 0.16 |
| (2,882) | 1:A:42:PRO:HD2 | 1:A:42:PRO:HG2 | 16 | 0.16 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:74:LEU:H | 12 | 0.16 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:74:LEU:H | 12 | 0.16 |
| (2,849) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:74:LEU:H | 12 | 0.16 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:36:VAL:H | 7 | 0.16 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:36:VAL:H | 7 | 0.16 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:36:VAL:H | 7 | 0.16 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:36:VAL:H | 11 | 0.16 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:36:VAL:H | 11 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:36:VAL:H | 11 | 0.16 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG21 | 9 | 0.16 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG22 | 9 | 0.16 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG23 | 9 | 0.16 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG21 | 16 | 0.16 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG22 | 16 | 0.16 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG23 | 16 | 0.16 |
| (2,794) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:36:VAL:H | 1 | 0.16 |
| (2,794) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:36:VAL:H | 1 | 0.16 |
| (2,794) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:36:VAL:H | 1 | 0.16 |
| (2,794) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:36:VAL:H | 7 | 0.16 |
| (2,794) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:36:VAL:H | 7 | 0.16 |
| (2,794) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:36:VAL:H | 7 | 0.16 |
| (2,794) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:36:VAL:H | 11 | 0.16 |
| (2,794) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:36:VAL:H | 11 | 0.16 |
| (2,794) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:36:VAL:H | 11 | 0.16 |
| (2,79) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HD1 | 7 | 0.16 |
| (2,79) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HD2 | 7 | 0.16 |
| (2,79) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HD1 | 7 | 0.16 |
| (2,79) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HD2 | 7 | 0.16 |
| (2,79) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HD1 | 7 | 0.16 |
| (2,79) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HD2 | 7 | 0.16 |
| (2,765) | 1:A:61:ALA:HA | 1:A:56:ILE:HB | 16 | 0.16 |
| (2,736) | 1:A:26:ALA:HA | 1:A:91:THR:HG21 | 7 | 0.16 |
| (2,736) | 1:A:26:ALA:HA | 1:A:91:THR:HG22 | 7 | 0.16 |
| (2,736) | 1:A:26:ALA:HA | 1:A:91:THR:HG23 | 7 | 0.16 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB1 | 2 | 0.16 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB2 | 2 | 0.16 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB3 | 2 | 0.16 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB1 | 8 | 0.16 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB2 | 8 | 0.16 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB3 | 8 | 0.16 |
| (2,565) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:71:ASN:HB2 | 9 | 0.16 |
| (2,565) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:71:ASN:HB2 | 9 | 0.16 |
| (2,565) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:71:ASN:HB2 | 9 | 0.16 |
| (2,552) | 1:A:25:LEU:HB3 | 1:A:25:LEU:HA | 2 | 0.16 |
| (2,552) | 1:A:25:LEU:HB3 | 1:A:25:LEU:HA | 9 | 0.16 |
| (2,552) | 1:A:25:LEU:HB3 | 1:A:25:LEU:HA | 12 | 0.16 |
| (2,533) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:25:LEU:HB2 | 15 | 0.16 |
| (2,527) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:24:THR:H | 7 | 0.16 |
| (2,527) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:24:THR:H | 9 | 0.16 |
| (2,527) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:24:THR:H | 12 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,527) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:24:THR:H | 13 | 0.16 |
| (2,52) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:85:PRO:HA | 7 | 0.16 |
| (2,52) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:85:PRO:HA | 7 | 0.16 |
| (2,52) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:85:PRO:HA | 10 | 0.16 |
| (2,52) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:85:PRO:HA | 10 | 0.16 |
| (2,51) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HB3 | 9 | 0.16 |
| (2,51) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HB3 | 9 | 0.16 |
| (2,506) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:24:THR:H | 5 | 0.16 |
| (2,496) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:23:GLN:HG2 | 5 | 0.16 |
| (2,483) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 4 | 0.16 |
| (2,465) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:H | 9 | 0.16 |
| (2,458) | 1:A:20:GLN:HB3 | 1:A:16:LEU:HB3 | 13 | 0.16 |
| (2,455) | 1:A:20:GLN:HB3 | 1:A:21:GLN:H | 7 | 0.16 |
| (2,435) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:20:GLN:HA | 5 | 0.16 |
| (2,435) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:20:GLN:HA | 7 | 0.16 |
| (2,435) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:20:GLN:HA | 9 | 0.16 |
| (2,411) | 1:A:19:GLN:HB3 | 1:A:19:GLN:H | 8 | 0.16 |
| (2,403) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:20:GLN:H | 9 | 0.16 |
| (2,389) | 1:A:19:GLN:HA | 1:A:19:GLN:H | 2 | 0.16 |
| (2,388) | 1:A:45:ILE:HA | 1:A:46:SER:H | 5 | 0.16 |
| (2,383) | 1:A:18:PRO:HB3 | 1:A:18:PRO:HG3 | 16 | 0.16 |
| (2,376) | 1:A:18:PRO:HA | 1:A:21:GLN:HG2 | 1 | 0.16 |
| (2,370) | 1:A:17:SER:HB2 | 1:A:20:GLN:HG3 | 11 | 0.16 |
| (2,361) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:17:SER:H | 8 | 0.16 |
| (2,361) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:17:SER:H | 8 | 0.16 |
| (2,361) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:17:SER:H | 8 | 0.16 |
| (2,361) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:17:SER:H | 10 | 0.16 |
| (2,361) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:17:SER:H | 10 | 0.16 |
| (2,361) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:17:SER:H | 10 | 0.16 |
| (2,361) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:17:SER:H | 13 | 0.16 |
| (2,361) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:17:SER:H | 13 | 0.16 |
| (2,361) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:17:SER:H | 13 | 0.16 |
| (2,351) | 1:A:16:LEU:HA | 1:A:16:LEU:HD21 | 6 | 0.16 |
| (2,351) | 1:A:16:LEU:HA | 1:A:16:LEU:HD22 | 6 | 0.16 |
| (2,351) | 1:A:16:LEU:HA | 1:A:16:LEU:HD23 | 6 | 0.16 |
| (2,344) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:15:GLY:H | 3 | 0.16 |
| (2,344) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:15:GLY:H | 6 | 0.16 |
| (2,344) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:15:GLY:H | 8 | 0.16 |
| (2,344) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:15:GLY:H | 10 | 0.16 |
| (2,344) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:15:GLY:H | 13 | 0.16 |
| (2,314) | 1:A:85:PRO:HD2 | 1:A:84:HIS:H | 9 | 0.16 |
| (2,314) | 1:A:85:PRO:HD2 | 1:A:84:HIS:H | 10 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,279) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:12:ARG:HA | 13 | 0.16 |
| (2,237) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:85:PRO:HB3 | 5 | 0.16 |
| (2,237) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:85:PRO:HB3 | 5 | 0.16 |
| (2,237) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:85:PRO:HB3 | 5 | 0.16 |
| (2,201) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HB3 | 13 | 0.16 |
| (2,194) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HG2 | 8 | 0.16 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB1 | 5 | 0.16 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB2 | 5 | 0.16 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB3 | 5 | 0.16 |
| (2,1907) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:56:ILE:HB | 10 | 0.16 |
| (2,19) | 1:A:102:HIS:HB3 | 1:A:102:HIS:HD2 | 16 | 0.16 |
| (2,1885) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:13:LEU:HA | 9 | 0.16 |
| (2,1881) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:9:LEU:HG | 5 | 0.16 |
| (2,1850) | 1:A:70:HIS:HD2 | 1:A:70:HIS:HB3 | 1 | 0.16 |
| (2,1848) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:22:GLN:H | 9 | 0.16 |
| (2,1844) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:14:ASN:HB2 | 1 | 0.16 |
| (2,1836) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:13:LEU:H | 11 | 0.16 |
| (2,1836) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:13:LEU:H | 11 | 0.16 |
| (2,1836) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:13:LEU:H | 11 | 0.16 |
| (2,1819) | 1:A:5:ALA:HB1 | 1:A:8:ASP:HB2 | 8 | 0.16 |
| (2,1819) | 1:A:5:ALA:HB2 | 1:A:8:ASP:HB2 | 8 | 0.16 |
| (2,1819) | 1:A:5:ALA:HB3 | 1:A:8:ASP:HB2 | 8 | 0.16 |
| (2,1789) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:H | 15 | 0.16 |
| (2,1769) | 1:A:97:ARG:HA | 1:A:97:ARG:HG3 | 10 | 0.16 |
| (2,1769) | 1:A:97:ARG:HA | 1:A:97:ARG:HG3 | 15 | 0.16 |
| (2,1718) | 1:A:100:GLN:HG2 | 1:A:99:THR:HB | 13 | 0.16 |
| (2,1714) | 1:A:92:GLN:HG2 | 1:A:92:GLN:HA | 4 | 0.16 |
| (2,1714) | 1:A:92:GLN:HG2 | 1:A:92:GLN:HA | 10 | 0.16 |
| (2,1679) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HB3 | 10 | 0.16 |
| (2,1679) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:HB3 | 10 | 0.16 |
| (2,1679) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:HB3 | 10 | 0.16 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HB2 | 12 | 0.16 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:HB2 | 12 | 0.16 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:HB2 | 12 | 0.16 |
| (2,1662) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:H | 9 | 0.16 |
| (2,1662) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:H | 13 | 0.16 |
| (2,1602) | 1:A:86:THR:HB | 1:A:88:HIS:H | 13 | 0.16 |
| (2,1569) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:84:HIS:H | 1 | 0.16 |
| (2,1569) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:84:HIS:H | 4 | 0.16 |
| (2,1566) | 1:A:83:ASP:HB2 | 1:A:83:ASP:H | 10 | 0.16 |
| (2,1560) | 1:A:82:PHE:HB2 | 1:A:83:ASP:H | 12 | 0.16 |
| (2,156) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:71:ASN:HD22 | 10 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1542) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:84:HIS:H | 16 | 0.16 |
| (2,1499) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:78:PRO:HB3 | 4 | 0.16 |
| (2,1496) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:80:LEU:H | 15 | 0.16 |
| (2,1490) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:79:THR:HB | 3 | 0.16 |
| (2,1473) | 1:A:75:ASP:HB3 | 1:A:75:ASP:H | 13 | 0.16 |
| (2,1462) | 1:A:73:GLY:HA2 | 1:A:73:GLY:H | 2 | 0.16 |
| (2,1462) | 1:A:73:GLY:HA2 | 1:A:73:GLY:H | 4 | 0.16 |
| (2,1462) | 1:A:73:GLY:HA2 | 1:A:73:GLY:H | 6 | 0.16 |
| (2,1462) | 1:A:73:GLY:HA2 | 1:A:73:GLY:H | 11 | 0.16 |
| (2,1462) | 1:A:73:GLY:HA2 | 1:A:73:GLY:H | 16 | 0.16 |
| (2,1453) | 1:A:40:HIS:HA | 1:A:40:HIS:HB2 | 5 | 0.16 |
| (2,1446) | 1:A:95:HIS:HB3 | 1:A:96:THR:H | 10 | 0.16 |
| (2,1409) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:37:LEU:H | 1 | 0.16 |
| (2,1409) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:37:LEU:H | 1 | 0.16 |
| (2,1409) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:37:LEU:H | 1 | 0.16 |
| (2,1404) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:H | 8 | 0.16 |
| (2,1404) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:H | 8 | 0.16 |
| (2,1404) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:H | 8 | 0.16 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:45:ILE:HA | 14 | 0.16 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:45:ILE:HA | 14 | 0.16 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:45:ILE:HA | 14 | 0.16 |
| (2,1379) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:97:ARG:HB2 | 1 | 0.16 |
| (2,1379) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:97:ARG:HB2 | 6 | 0.16 |
| (2,1379) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:97:ARG:HB2 | 12 | 0.16 |
| (2,1350) | 1:A:70:HIS:HB3 | 1:A:71:ASN:H | 2 | 0.16 |
| (2,1334) | 1:A:69:THR:HA | 1:A:74:LEU:H | 5 | 0.16 |
| (2,1299) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:67:THR:H | 4 | 0.16 |
| (2,1281) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:65:ARG:HA | 13 | 0.16 |
| (2,1274) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:65:ARG:HG2 | 7 | 0.16 |
| (2,1270) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:68:LEU:HB3 | 6 | 0.16 |
| (2,1270) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:68:LEU:HB3 | 7 | 0.16 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 15 | 0.16 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 15 | 0.16 |
| (2,126) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 15 | 0.16 |
| (2,1248) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HB3 | 1 | 0.16 |
| (2,1248) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HB3 | 1 | 0.16 |
| (2,1248) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HB3 | 1 | 0.16 |
| (2,1244) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD11 | 9 | 0.16 |
| (2,1244) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD12 | 9 | 0.16 |
| (2,1244) | 1:A:64:LEU:HB3 | 1:A:64:LEU:HD13 | 9 | 0.16 |
| (2,1224) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:63:GLU:HA | 9 | 0.16 |
| (2,1224) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:63:GLU:HA | 11 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG11 | 9 | 0.16 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG12 | 9 | 0.16 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG13 | 9 | 0.16 |
| (2,1220) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:35:THR:HG21 | 14 | 0.16 |
| (2,1220) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:35:THR:HG22 | 14 | 0.16 |
| (2,1220) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:35:THR:HG23 | 14 | 0.16 |
| (2,1219) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:60:THR:HG21 | 13 | 0.16 |
| (2,1219) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:60:THR:HG22 | 13 | 0.16 |
| (2,1219) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:60:THR:HG23 | 13 | 0.16 |
| (2,1203) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:63:GLU:H | 5 | 0.16 |
| (2,1203) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:63:GLU:H | 8 | 0.16 |
| (2,1188) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:63:GLU:H | 9 | 0.16 |
| (2,1185) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:H | 3 | 0.16 |
| (2,1185) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:H | 8 | 0.16 |
| (2,1157) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:60:THR:HB | 1 | 0.16 |
| (2,1157) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:60:THR:HB | 1 | 0.16 |
| (2,1157) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:60:THR:HB | 1 | 0.16 |
| (2,1154) | 1:A:60:THR:HB | 1:A:63:GLU:H | 2 | 0.16 |
| (2,1154) | 1:A:60:THR:HB | 1:A:63:GLU:H | 9 | 0.16 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD21 | 7 | 0.16 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD22 | 7 | 0.16 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD23 | 7 | 0.16 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD21 | 14 | 0.16 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD22 | 14 | 0.16 |
| (2,1144) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD23 | 14 | 0.16 |
| (2,1135) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:58:SER:HA | 1 | 0.16 |
| (2,1135) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:58:SER:HA | 9 | 0.16 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD11 | 12 | 0.16 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD12 | 12 | 0.16 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD13 | 12 | 0.16 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD11 | 12 | 0.16 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD12 | 12 | 0.16 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD13 | 12 | 0.16 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD11 | 12 | 0.16 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD12 | 12 | 0.16 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD13 | 12 | 0.16 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD11 | 13 | 0.16 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD12 | 13 | 0.16 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD13 | 13 | 0.16 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD11 | 13 | 0.16 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD12 | 13 | 0.16 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD13 | 13 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD11 | 13 | 0.16 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD12 | 13 | 0.16 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD13 | 13 | 0.16 |
| (2,1100) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:90:LEU:HB2 | 14 | 0.16 |
| (2,1100) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:90:LEU:HB2 | 14 | 0.16 |
| (2,1100) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:90:LEU:HB2 | 14 | 0.16 |
| (2,1073) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:54:LEU:HB2 | 3 | 0.16 |
| (2,1073) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:54:LEU:HB2 | 4 | 0.16 |
| (2,1073) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:54:LEU:HB2 | 5 | 0.16 |
| (2,1073) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:54:LEU:HB2 | 11 | 0.16 |
| (2,1073) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:54:LEU:HB2 | 12 | 0.16 |
| (2,1073) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:54:LEU:HB2 | 14 | 0.16 |
| (2,1073) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:54:LEU:HB2 | 16 | 0.16 |
| (2,1054) | 1:A:52:LYS:HG2 | 1:A:53:ASP:H | 14 | 0.16 |
| (2,1029) | 1:A:51:PHE:HB3 | 1:A:52:LYS:HG2 | 5 | 0.16 |
| (2,1029) | 1:A:51:PHE:HB3 | 1:A:52:LYS:HG2 | 6 | 0.16 |
| (2,1029) | 1:A:51:PHE:HB3 | 1:A:52:LYS:HG2 | 8 | 0.16 |
| (2,1005) | 1:A:57:ASP:HA | 1:A:57:ASP:HB2 | 7 | 0.16 |
| (1,95) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:71:ASN:HA | 10 | 0.16 |
| (1,86) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:28:LEU:HD11 | 10 | 0.16 |
| (1,86) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:28:LEU:HD12 | 10 | 0.16 |
| (1,86) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:28:LEU:HD13 | 10 | 0.16 |
| (1,74) | 1:A:89:ALA:H | 1:A:88:HIS:H | 12 | 0.16 |
| (1,68) | 1:A:20:GLN:H | 1:A:21:GLN:H | 4 | 0.16 |
| (1,68) | 1:A:20:GLN:H | 1:A:21:GLN:H | 9 | 0.16 |
| (1,68) | 1:A:20:GLN:H | 1:A:21:GLN:H | 15 | 0.16 |
| (1,601) | 1:A:33:THR:H | 1:A:34:ALA:H | 11 | 0.16 |
| (1,600) | 1:A:33:THR:H | 1:A:30:ALA:HA | 9 | 0.16 |
| (1,561) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:21:GLN:HB2 | 8 | 0.16 |
| (1,539) | 1:A:92:GLN:H | 1:A:92:GLN:HG3 | 12 | 0.16 |
| (1,532) | 1:A:93:HIS:H | 1:A:93:HIS:HD2 | 3 | 0.16 |
| (1,532) | 1:A:93:HIS:H | 1:A:93:HIS:HD2 | 4 | 0.16 |
| (1,532) | 1:A:93:HIS:H | 1:A:93:HIS:HD2 | 16 | 0.16 |
| (1,529) | 1:A:65:ARG:H | 1:A:64:LEU:HB3 | 1 | 0.16 |
| (1,52) | 1:A:15:GLY:H | 1:A:15:GLY:HA2 | 15 | 0.16 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG21 | 9 | 0.16 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG22 | 9 | 0.16 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG23 | 9 | 0.16 |
| (1,442) | 1:A:75:ASP:H | 1:A:75:ASP:HB3 | 13 | 0.16 |
| (1,440) | 1:A:75:ASP:H | 1:A:74:LEU:HA | 5 | 0.16 |
| (1,398) | 1:A:44:SER:H | 1:A:43:GLU:HG2 | 7 | 0.16 |
| (1,38) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:74:LEU:H | 1 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,38) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:74:LEU:H | 13 | 0.16 |
| (1,350) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HB3 | 8 | 0.16 |
| (1,350) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HB3 | 12 | 0.16 |
| (1,348) | 1:A:17:SER:H | 1:A:20:GLN:HB3 | 3 | 0.16 |
| (1,281) | 1:A:14:ASN:HD21 | 1:A:14:ASN:HA | 7 | 0.16 |
| (1,249) | 1:A:99:THR:H | 1:A:98:LEU:HB2 | 1 | 0.16 |
| (1,23) | 1:A:44:SER:H | 1:A:45:ILE:H | 8 | 0.16 |
| (1,22) | 1:A:43:GLU:H | 1:A:44:SER:H | 5 | 0.16 |
| (1,20) | 1:A:35:THR:H | 1:A:34:ALA:H | 4 | 0.16 |
| (1,20) | 1:A:35:THR:H | 1:A:34:ALA:H | 10 | 0.16 |
| (1,20) | 1:A:35:THR:H | 1:A:34:ALA:H | 12 | 0.16 |
| (1,176) | 1:A:80:LEU:H | 1:A:79:THR:HA | 15 | 0.16 |
| (1,17) | 1:A:100:GLN:H | 1:A:99:THR:H | 15 | 0.16 |
| (1,130) | 1:A:69:THR:H | 1:A:69:THR:HB | 1 | 0.16 |
| (1,125) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:21:GLN:HB2 | 9 | 0.16 |
| (1,110) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:52:LYS:HG3 | 6 | 0.16 |
| (1,103) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:71:ASN:HB2 | 5 | 0.16 |
| (2,997) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HG | 11 | 0.15 |
| (2,997) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HG | 11 | 0.15 |
| (2,997) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HG | 11 | 0.15 |
| (2,977) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:49:THR:H | 4 | 0.15 |
| (2,977) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:49:THR:H | 8 | 0.15 |
| (2,977) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:49:THR:H | 11 | 0.15 |
| (2,977) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:49:THR:H | 12 | 0.15 |
| (2,977) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:49:THR:H | 15 | 0.15 |
| (2,960) | 1:A:47:PRO:HD2 | 1:A:46:SER:HB3 | 2 | 0.15 |
| (2,932) | 1:A:45:ILE:HG13 | 1:A:42:PRO:HA | 1 | 0.15 |
| (2,932) | 1:A:45:ILE:HG13 | 1:A:42:PRO:HA | 15 | 0.15 |
| (2,930) | 1:A:45:ILE:HB | 1:A:45:ILE:HG13 | 8 | 0.15 |
| (2,930) | 1:A:45:ILE:HB | 1:A:45:ILE:HG13 | 11 | 0.15 |
| (2,923) | 1:A:101:SER:HB2 | 1:A:102:HIS:H | 2 | 0.15 |
| (2,911) | 1:A:43:GLU:HB2 | 1:A:43:GLU:H | 10 | 0.15 |
| (2,889) | 1:A:42:PRO:HD2 | 1:A:41:THR:HA | 7 | 0.15 |
| (2,875) | 1:A:78:PRO:HB3 | 1:A:78:PRO:HA | 6 | 0.15 |
| (2,875) | 1:A:78:PRO:HB3 | 1:A:78:PRO:HA | 11 | 0.15 |
| (2,872) | 1:A:42:PRO:HA | 1:A:30:ALA:HB1 | 8 | 0.15 |
| (2,872) | 1:A:42:PRO:HA | 1:A:30:ALA:HB2 | 8 | 0.15 |
| (2,872) | 1:A:42:PRO:HA | 1:A:30:ALA:HB3 | 8 | 0.15 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:36:VAL:H | 10 | 0.15 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:36:VAL:H | 10 | 0.15 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:36:VAL:H | 10 | 0.15 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG21 | 2 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG22 | 2 | 0.15 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG23 | 2 | 0.15 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG21 | 5 | 0.15 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG22 | 5 | 0.15 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG23 | 5 | 0.15 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG21 | 11 | 0.15 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG22 | 11 | 0.15 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG23 | 11 | 0.15 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG21 | 15 | 0.15 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG22 | 15 | 0.15 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG23 | 15 | 0.15 |
| (2,794) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:36:VAL:H | 12 | 0.15 |
| (2,794) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:36:VAL:H | 12 | 0.15 |
| (2,794) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:36:VAL:H | 12 | 0.15 |
| (2,76) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HE1 | 7 | 0.15 |
| (2,76) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HE2 | 7 | 0.15 |
| (2,76) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HE1 | 7 | 0.15 |
| (2,76) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HE2 | 7 | 0.15 |
| (2,76) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HE1 | 7 | 0.15 |
| (2,76) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HE2 | 7 | 0.15 |
| (2,76) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HE1 | 11 | 0.15 |
| (2,76) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HE2 | 11 | 0.15 |
| (2,76) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HE1 | 11 | 0.15 |
| (2,76) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HE2 | 11 | 0.15 |
| (2,76) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HE1 | 11 | 0.15 |
| (2,76) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HE2 | 11 | 0.15 |
| (2,736) | 1:A:26:ALA:HA | 1:A:91:THR:HG21 | 9 | 0.15 |
| (2,736) | 1:A:26:ALA:HA | 1:A:91:THR:HG22 | 9 | 0.15 |
| (2,736) | 1:A:26:ALA:HA | 1:A:91:THR:HG23 | 9 | 0.15 |
| (2,7) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:71:ASN:HA | 7 | 0.15 |
| (2,7) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:71:ASN:HA | 7 | 0.15 |
| (2,7) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:71:ASN:HA | 7 | 0.15 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB1 | 3 | 0.15 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB2 | 3 | 0.15 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB3 | 3 | 0.15 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB1 | 6 | 0.15 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB2 | 6 | 0.15 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB3 | 6 | 0.15 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB1 | 16 | 0.15 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB2 | 16 | 0.15 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB3 | 16 | 0.15 |
| (2,651) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:H | 12 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,651) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:H | 12 | 0.15 |
| (2,651) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:H | 12 | 0.15 |
| (2,651) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:H | 16 | 0.15 |
| (2,651) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:H | 16 | 0.15 |
| (2,651) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:H | 16 | 0.15 |
| (2,552) | 1:A:25:LEU:HB3 | 1:A:25:LEU:HA | 4 | 0.15 |
| (2,552) | 1:A:25:LEU:HB3 | 1:A:25:LEU:HA | 5 | 0.15 |
| (2,552) | 1:A:25:LEU:HB3 | 1:A:25:LEU:HA | 6 | 0.15 |
| (2,552) | 1:A:25:LEU:HB3 | 1:A:25:LEU:HA | 8 | 0.15 |
| (2,552) | 1:A:25:LEU:HB3 | 1:A:25:LEU:HA | 10 | 0.15 |
| (2,552) | 1:A:25:LEU:HB3 | 1:A:25:LEU:HA | 13 | 0.15 |
| (2,552) | 1:A:25:LEU:HB3 | 1:A:25:LEU:HA | 15 | 0.15 |
| (2,528) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:35:THR:H | 8 | 0.15 |
| (2,52) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:85:PRO:HA | 5 | 0.15 |
| (2,52) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:85:PRO:HA | 5 | 0.15 |
| (2,52) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:85:PRO:HA | 15 | 0.15 |
| (2,52) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:85:PRO:HA | 15 | 0.15 |
| (2,506) | 1:A:23:GLN:HB2 | 1:A:24:THR:H | 14 | 0.15 |
| (2,496) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:23:GLN:HG2 | 6 | 0.15 |
| (2,496) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:23:GLN:HG2 | 16 | 0.15 |
| (2,490) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:22:GLN:HA | 2 | 0.15 |
| (2,464) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HA | 2 | 0.15 |
| (2,464) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HA | 8 | 0.15 |
| (2,435) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:20:GLN:HA | 3 | 0.15 |
| (2,435) | 1:A:21:GLN:HA | 1:A:20:GLN:HA | 11 | 0.15 |
| (2,411) | 1:A:19:GLN:HB3 | 1:A:19:GLN:H | 3 | 0.15 |
| (2,401) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:23:GLN:H | 8 | 0.15 |
| (2,401) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:23:GLN:H | 15 | 0.15 |
| (2,389) | 1:A:19:GLN:HA | 1:A:19:GLN:H | 3 | 0.15 |
| (2,389) | 1:A:19:GLN:HA | 1:A:19:GLN:H | 4 | 0.15 |
| (2,389) | 1:A:19:GLN:HA | 1:A:19:GLN:H | 5 | 0.15 |
| (2,389) | 1:A:19:GLN:HA | 1:A:19:GLN:H | 6 | 0.15 |
| (2,389) | 1:A:19:GLN:HA | 1:A:19:GLN:H | 7 | 0.15 |
| (2,389) | 1:A:19:GLN:HA | 1:A:19:GLN:H | 11 | 0.15 |
| (2,383) | 1:A:18:PRO:HB3 | 1:A:18:PRO:HG3 | 1 | 0.15 |
| (2,383) | 1:A:18:PRO:HB3 | 1:A:18:PRO:HG3 | 2 | 0.15 |
| (2,383) | 1:A:18:PRO:HB3 | 1:A:18:PRO:HG3 | 3 | 0.15 |
| (2,383) | 1:A:18:PRO:HB3 | 1:A:18:PRO:HG3 | 4 | 0.15 |
| (2,383) | 1:A:18:PRO:HB3 | 1:A:18:PRO:HG3 | 5 | 0.15 |
| (2,383) | 1:A:18:PRO:HB3 | 1:A:18:PRO:HG3 | 7 | 0.15 |
| (2,383) | 1:A:18:PRO:HB3 | 1:A:18:PRO:HG3 | 8 | 0.15 |
| (2,383) | 1:A:18:PRO:HB3 | 1:A:18:PRO:HG3 | 9 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,383) | 1:A:18:PRO:HB3 | 1:A:18:PRO:HG3 | 10 | 0.15 |
| (2,383) | 1:A:18:PRO:HB3 | 1:A:18:PRO:HG3 | 12 | 0.15 |
| (2,383) | 1:A:18:PRO:HB3 | 1:A:18:PRO:HG3 | 13 | 0.15 |
| (2,383) | 1:A:18:PRO:HB3 | 1:A:18:PRO:HG3 | 14 | 0.15 |
| (2,383) | 1:A:18:PRO:HB3 | 1:A:18:PRO:HG3 | 15 | 0.15 |
| (2,344) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:15:GLY:H | 11 | 0.15 |
| (2,34) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:51:PHE:HZ | 12 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 10 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 10 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 10 | 0.15 |
| (2,274) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:12:ARG:HD3 | 16 | 0.15 |
| (2,269) | 1:A:12:ARG:HG2 | 1:A:13:LEU:H | 1 | 0.15 |
| (2,269) | 1:A:12:ARG:HG2 | 1:A:13:LEU:H | 4 | 0.15 |
| (2,256) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:12:ARG:HB2 | 1 | 0.15 |
| (2,256) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:12:ARG:HB2 | 2 | 0.15 |
| (2,256) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:12:ARG:HB2 | 3 | 0.15 |
| (2,256) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:12:ARG:HB2 | 4 | 0.15 |
| (2,256) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:12:ARG:HB2 | 5 | 0.15 |
| (2,256) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:12:ARG:HB2 | 6 | 0.15 |
| (2,256) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:12:ARG:HB2 | 7 | 0.15 |
| (2,256) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:12:ARG:HB2 | 8 | 0.15 |
| (2,256) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:12:ARG:HB2 | 9 | 0.15 |
| (2,256) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:12:ARG:HB2 | 10 | 0.15 |
| (2,256) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:12:ARG:HB2 | 11 | 0.15 |
| (2,256) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:12:ARG:HB2 | 12 | 0.15 |
| (2,256) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:12:ARG:HB2 | 13 | 0.15 |
| (2,256) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:12:ARG:HB2 | 14 | 0.15 |
| (2,256) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:12:ARG:HB2 | 15 | 0.15 |
| (2,256) | 1:A:12:ARG:HB3 | 1:A:12:ARG:HB2 | 16 | 0.15 |
| (2,237) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:85:PRO:HB3 | 16 | 0.15 |
| (2,237) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:85:PRO:HB3 | 16 | 0.15 |
| (2,237) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:85:PRO:HB3 | 16 | 0.15 |
| (2,201) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HB3 | 10 | 0.15 |
| (2,198) | 1:A:9:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD21 | 3 | 0.15 |
| (2,198) | 1:A:9:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD22 | 3 | 0.15 |
| (2,198) | 1:A:9:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD23 | 3 | 0.15 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:61:ALA:HB1 | 4 | 0.15 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:61:ALA:HB2 | 4 | 0.15 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:61:ALA:HB3 | 4 | 0.15 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE2 | 1:A:61:ALA:HB1 | 4 | 0.15 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE2 | 1:A:61:ALA:HB2 | 4 | 0.15 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE2 | 1:A:61:ALA:HB3 | 4 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:61:ALA:HB1 | 16 | 0.15 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:61:ALA:HB2 | 16 | 0.15 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:61:ALA:HB3 | 16 | 0.15 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE2 | 1:A:61:ALA:HB1 | 16 | 0.15 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE2 | 1:A:61:ALA:HB2 | 16 | 0.15 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE2 | 1:A:61:ALA:HB3 | 16 | 0.15 |
| (2,1885) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:13:LEU:HA | 12 | 0.15 |
| (2,1850) | 1:A:70:HIS:HD2 | 1:A:70:HIS:HB3 | 11 | 0.15 |
| (2,18) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:95:HIS:HD2 | 8 | 0.15 |
| (2,18) | 1:A:21:GLN:HB3 | 1:A:95:HIS:HD2 | 9 | 0.15 |
| (2,1722) | 1:A:92:GLN:HG3 | 1:A:92:GLN:H | 3 | 0.15 |
| (2,1722) | 1:A:92:GLN:HG3 | 1:A:92:GLN:H | 11 | 0.15 |
| (2,1720) | 1:A:92:GLN:HG3 | 1:A:89:ALA:HA | 1 | 0.15 |
| (2,1714) | 1:A:92:GLN:HG2 | 1:A:92:GLN:HA | 6 | 0.15 |
| (2,1711) | 1:A:92:GLN:HB2 | 1:A:92:GLN:HB3 | 2 | 0.15 |
| (2,1711) | 1:A:92:GLN:HB2 | 1:A:92:GLN:HB3 | 3 | 0.15 |
| (2,1711) | 1:A:92:GLN:HB2 | 1:A:92:GLN:HB3 | 4 | 0.15 |
| (2,1711) | 1:A:92:GLN:HB2 | 1:A:92:GLN:HB3 | 5 | 0.15 |
| (2,1711) | 1:A:92:GLN:HB2 | 1:A:92:GLN:HB3 | 6 | 0.15 |
| (2,1711) | 1:A:92:GLN:HB2 | 1:A:92:GLN:HB3 | 7 | 0.15 |
| (2,1711) | 1:A:92:GLN:HB2 | 1:A:92:GLN:HB3 | 8 | 0.15 |
| (2,1711) | 1:A:92:GLN:HB2 | 1:A:92:GLN:HB3 | 10 | 0.15 |
| (2,1711) | 1:A:92:GLN:HB2 | 1:A:92:GLN:HB3 | 11 | 0.15 |
| (2,1711) | 1:A:92:GLN:HB2 | 1:A:92:GLN:HB3 | 12 | 0.15 |
| (2,1711) | 1:A:92:GLN:HB2 | 1:A:92:GLN:HB3 | 13 | 0.15 |
| (2,1711) | 1:A:92:GLN:HB2 | 1:A:92:GLN:HB3 | 14 | 0.15 |
| (2,1711) | 1:A:92:GLN:HB2 | 1:A:92:GLN:HB3 | 15 | 0.15 |
| (2,1711) | 1:A:92:GLN:HB2 | 1:A:92:GLN:HB3 | 16 | 0.15 |
| (2,1710) | 1:A:92:GLN:HB2 | 1:A:89:ALA:HA | 7 | 0.15 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HE1 | 11 | 0.15 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HE2 | 11 | 0.15 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HE1 | 11 | 0.15 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HE2 | 11 | 0.15 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HE1 | 11 | 0.15 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HE2 | 11 | 0.15 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HZ | 9 | 0.15 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HZ | 9 | 0.15 |
| (2,1680) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HZ | 9 | 0.15 |
| (2,1679) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HB3 | 3 | 0.15 |
| (2,1679) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:HB3 | 3 | 0.15 |
| (2,1679) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:HB3 | 3 | 0.15 |
| (2,1679) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HB3 | 11 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1679) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:HB3 | 11 | 0.15 |
| (2,1679) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:HB3 | 11 | 0.15 |
| (2,1679) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HB3 | 12 | 0.15 |
| (2,1679) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:HB3 | 12 | 0.15 |
| (2,1679) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:HB3 | 12 | 0.15 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HB2 | 10 | 0.15 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:HB2 | 10 | 0.15 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:HB2 | 10 | 0.15 |
| (2,1668) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 2 | 0.15 |
| (2,1668) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 2 | 0.15 |
| (2,1668) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 2 | 0.15 |
| (2,1663) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:84:HIS:HB3 | 8 | 0.15 |
| (2,1662) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:H | 2 | 0.15 |
| (2,1662) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:H | 4 | 0.15 |
| (2,1662) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:H | 6 | 0.15 |
| (2,1662) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:H | 8 | 0.15 |
| (2,1662) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:H | 10 | 0.15 |
| (2,1662) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:H | 14 | 0.15 |
| (2,1602) | 1:A:86:THR:HB | 1:A:88:HIS:H | 4 | 0.15 |
| (2,1560) | 1:A:82:PHE:HB2 | 1:A:83:ASP:H | 10 | 0.15 |
| (2,1560) | 1:A:82:PHE:HB2 | 1:A:83:ASP:H | 11 | 0.15 |
| (2,1542) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:84:HIS:H | 13 | 0.15 |
| (2,1540) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:95:HIS:HA | 6 | 0.15 |
| (2,1500) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:74:LEU:H | 6 | 0.15 |
| (2,1500) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:74:LEU:H | 6 | 0.15 |
| (2,1500) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:74:LEU:H | 6 | 0.15 |
| (2,1499) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:78:PRO:HB3 | 5 | 0.15 |
| (2,1490) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:79:THR:HB | 10 | 0.15 |
| (2,1490) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:79:THR:HB | 14 | 0.15 |
| (2,1453) | 1:A:40:HIS:HA | 1:A:40:HIS:HB2 | 3 | 0.15 |
| (2,1444) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:88:HIS:H | 1 | 0.15 |
| (2,1444) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:88:HIS:H | 7 | 0.15 |
| (2,1402) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:44:SER:HB3 | 7 | 0.15 |
| (2,1402) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:44:SER:HB3 | 7 | 0.15 |
| (2,1402) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:44:SER:HB3 | 7 | 0.15 |
| (2,1402) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:44:SER:HB3 | 9 | 0.15 |
| (2,1402) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:44:SER:HB3 | 9 | 0.15 |
| (2,1402) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:44:SER:HB3 | 9 | 0.15 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:45:ILE:HA | 12 | 0.15 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:45:ILE:HA | 12 | 0.15 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:45:ILE:HA | 12 | 0.15 |
| (2,1379) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:97:ARG:HB2 | 5 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1367) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:98:LEU:H | 6 | 0.15 |
| (2,1367) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:98:LEU:H | 13 | 0.15 |
| (2,136) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:8:ASP:H | 5 | 0.15 |
| (2,136) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:8:ASP:H | 5 | 0.15 |
| (2,136) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:8:ASP:H | 5 | 0.15 |
| (2,1334) | 1:A:69:THR:HA | 1:A:74:LEU:H | 4 | 0.15 |
| (2,133) | 1:A:35:THR:HG21 | 1:A:36:VAL:H | 13 | 0.15 |
| (2,133) | 1:A:35:THR:HG22 | 1:A:36:VAL:H | 13 | 0.15 |
| (2,133) | 1:A:35:THR:HG23 | 1:A:36:VAL:H | 13 | 0.15 |
| (2,1293) | 1:A:66:ASN:HA | 1:A:65:ARG:H | 11 | 0.15 |
| (2,1281) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:65:ARG:HA | 16 | 0.15 |
| (2,1270) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:68:LEU:HB3 | 4 | 0.15 |
| (2,1270) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:68:LEU:HB3 | 13 | 0.15 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HD21 | 7 | 0.15 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HD22 | 7 | 0.15 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HD23 | 7 | 0.15 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:HD21 | 7 | 0.15 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:HD22 | 7 | 0.15 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:HD23 | 7 | 0.15 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:HD21 | 7 | 0.15 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:HD22 | 7 | 0.15 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:HD23 | 7 | 0.15 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 3 | 0.15 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 3 | 0.15 |
| (2,1233) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 3 | 0.15 |
| (2,1231) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:64:LEU:H | 14 | 0.15 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG11 | 16 | 0.15 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG12 | 16 | 0.15 |
| (2,1222) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:36:VAL:HG13 | 16 | 0.15 |
| (2,1188) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:63:GLU:H | 13 | 0.15 |
| (2,1174) | 1:A:61:ALA:HB1 | 1:A:58:SER:HB2 | 13 | 0.15 |
| (2,1174) | 1:A:61:ALA:HB2 | 1:A:58:SER:HB2 | 13 | 0.15 |
| (2,1174) | 1:A:61:ALA:HB3 | 1:A:58:SER:HB2 | 13 | 0.15 |
| (2,1174) | 1:A:61:ALA:HB1 | 1:A:58:SER:HB2 | 15 | 0.15 |
| (2,1174) | 1:A:61:ALA:HB2 | 1:A:58:SER:HB2 | 15 | 0.15 |
| (2,1174) | 1:A:61:ALA:HB3 | 1:A:58:SER:HB2 | 15 | 0.15 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB1 | 1:A:64:LEU:HB3 | 1 | 0.15 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB2 | 1:A:64:LEU:HB3 | 1 | 0.15 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB3 | 1:A:64:LEU:HB3 | 1 | 0.15 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB1 | 1:A:64:LEU:HB3 | 8 | 0.15 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB2 | 1:A:64:LEU:HB3 | 8 | 0.15 |
| (2,1171) | 1:A:61:ALA:HB3 | 1:A:64:LEU:HB3 | 8 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1157) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:60:THR:HB | 11 | 0.15 |
| (2,1157) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:60:THR:HB | 11 | 0.15 |
| (2,1157) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:60:THR:HB | 11 | 0.15 |
| (2,1135) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:58:SER:HA | 5 | 0.15 |
| (2,1100) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:90:LEU:HB2 | 6 | 0.15 |
| (2,1100) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:90:LEU:HB2 | 6 | 0.15 |
| (2,1100) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:90:LEU:HB2 | 6 | 0.15 |
| (2,1073) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:54:LEU:HB2 | 1 | 0.15 |
| (2,1073) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:54:LEU:HB2 | 9 | 0.15 |
| (2,1054) | 1:A:52:LYS:HG2 | 1:A:53:ASP:H | 12 | 0.15 |
| (2,1054) | 1:A:52:LYS:HG2 | 1:A:53:ASP:H | 13 | 0.15 |
| (2,1005) | 1:A:57:ASP:HA | 1:A:57:ASP:HB2 | 13 | 0.15 |
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD21 | 16 | 0.15 |
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD22 | 16 | 0.15 |
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD23 | 16 | 0.15 |
| (1,68) | 1:A:20:GLN:H | 1:A:21:GLN:H | 5 | 0.15 |
| (1,68) | 1:A:20:GLN:H | 1:A:21:GLN:H | 8 | 0.15 |
| (1,68) | 1:A:20:GLN:H | 1:A:21:GLN:H | 13 | 0.15 |
| (1,68) | 1:A:20:GLN:H | 1:A:21:GLN:H | 14 | 0.15 |
| (1,600) | 1:A:33:THR:H | 1:A:30:ALA:HA | 7 | 0.15 |
| (1,600) | 1:A:33:THR:H | 1:A:30:ALA:HA | 10 | 0.15 |
| (1,600) | 1:A:33:THR:H | 1:A:30:ALA:HA | 16 | 0.15 |
| (1,561) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:21:GLN:HB2 | 7 | 0.15 |
| (1,532) | 1:A:93:HIS:H | 1:A:93:HIS:HD2 | 6 | 0.15 |
| (1,532) | 1:A:93:HIS:H | 1:A:93:HIS:HD2 | 12 | 0.15 |
| (1,532) | 1:A:93:HIS:H | 1:A:93:HIS:HD2 | 15 | 0.15 |
| (1,529) | 1:A:65:ARG:H | 1:A:64:LEU:HB3 | 3 | 0.15 |
| (1,52) | 1:A:15:GLY:H | 1:A:15:GLY:HA2 | 1 | 0.15 |
| (1,52) | 1:A:15:GLY:H | 1:A:15:GLY:HA2 | 7 | 0.15 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG21 | 3 | 0.15 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG22 | 3 | 0.15 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG23 | 3 | 0.15 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG21 | 4 | 0.15 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG22 | 4 | 0.15 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG23 | 4 | 0.15 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG21 | 5 | 0.15 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG22 | 5 | 0.15 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG23 | 5 | 0.15 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG21 | 8 | 0.15 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG22 | 8 | 0.15 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG23 | 8 | 0.15 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG21 | 13 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG22 | 13 | 0.15 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG23 | 13 | 0.15 |
| (1,503) | 1:A:100:GLN:H | 1:A:99:THR:HA | 6 | 0.15 |
| (1,503) | 1:A:100:GLN:H | 1:A:99:THR:HA | 9 | 0.15 |
| (1,484) | 1:A:68:LEU:H | 1:A:67:THR:HB | 11 | 0.15 |
| (1,475) | 1:A:68:LEU:H | 1:A:68:LEU:HB2 | 12 | 0.15 |
| (1,44) | 1:A:79:THR:H | 1:A:78:PRO:HA | 2 | 0.15 |
| (1,416) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 13 | 0.15 |
| (1,416) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 13 | 0.15 |
| (1,416) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 13 | 0.15 |
| (1,406) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:47:PRO:HA | 13 | 0.15 |
| (1,398) | 1:A:44:SER:H | 1:A:43:GLU:HG2 | 11 | 0.15 |
| (1,38) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:74:LEU:H | 7 | 0.15 |
| (1,38) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:74:LEU:H | 15 | 0.15 |
| (1,353) | 1:A:91:THR:H | 1:A:90:LEU:HB3 | 13 | 0.15 |
| (1,350) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HB3 | 6 | 0.15 |
| (1,350) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HB3 | 9 | 0.15 |
| (1,350) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HB3 | 10 | 0.15 |
| (1,282) | 1:A:14:ASN:HD21 | 1:A:11:ALA:HA | 2 | 0.15 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG21 | 7 | 0.15 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG22 | 7 | 0.15 |
| (1,236) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG23 | 7 | 0.15 |
| (1,22) | 1:A:43:GLU:H | 1:A:44:SER:H | 6 | 0.15 |
| (1,22) | 1:A:43:GLU:H | 1:A:44:SER:H | 12 | 0.15 |
| (1,20) | 1:A:35:THR:H | 1:A:34:ALA:H | 14 | 0.15 |
| (1,20) | 1:A:35:THR:H | 1:A:34:ALA:H | 16 | 0.15 |
| (1,187) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HD11 | 16 | 0.15 |
| (1,187) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HD12 | 16 | 0.15 |
| (1,187) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HD13 | 16 | 0.15 |
| (1,159) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HA | 13 | 0.15 |
| (1,134) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:25:LEU:HB2 | 1 | 0.15 |
| (1,134) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:25:LEU:HB2 | 2 | 0.15 |
| (1,130) | 1:A:69:THR:H | 1:A:69:THR:HB | 8 | 0.15 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD21 | 6 | 0.15 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD22 | 6 | 0.15 |
| (1,126) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:16:LEU:HD23 | 6 | 0.15 |
| (1,125) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:21:GLN:HB2 | 2 | 0.15 |
| (1,125) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:21:GLN:HB2 | 10 | 0.15 |
| (1,103) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:71:ASN:HB2 | 2 | 0.15 |
| (1,103) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:71:ASN:HB2 | 10 | 0.15 |
| (2,980) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:54:LEU:HG | 12 | 0.14 |
| (2,977) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:49:THR:H | 3 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,977) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:49:THR:H | 13 | 0.14 |
| (2,930) | 1:A:45:ILE:HB | 1:A:45:ILE:HG13 | 4 | 0.14 |
| (2,930) | 1:A:45:ILE:HB | 1:A:45:ILE:HG13 | 9 | 0.14 |
| (2,930) | 1:A:45:ILE:HB | 1:A:45:ILE:HG13 | 12 | 0.14 |
| (2,930) | 1:A:45:ILE:HB | 1:A:45:ILE:HG13 | 13 | 0.14 |
| (2,930) | 1:A:45:ILE:HB | 1:A:45:ILE:HG13 | 15 | 0.14 |
| (2,930) | 1:A:45:ILE:HB | 1:A:45:ILE:HG13 | 16 | 0.14 |
| (2,927) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:56:ILE:HA | 1 | 0.14 |
| (2,927) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:56:ILE:HA | 1 | 0.14 |
| (2,927) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:56:ILE:HA | 1 | 0.14 |
| (2,892) | 1:A:43:GLU:HG2 | 1:A:41:THR:HB | 8 | 0.14 |
| (2,889) | 1:A:42:PRO:HD2 | 1:A:41:THR:HA | 6 | 0.14 |
| (2,875) | 1:A:78:PRO:HB3 | 1:A:78:PRO:HA | 2 | 0.14 |
| (2,875) | 1:A:78:PRO:HB3 | 1:A:78:PRO:HA | 3 | 0.14 |
| (2,875) | 1:A:78:PRO:HB3 | 1:A:78:PRO:HA | 4 | 0.14 |
| (2,875) | 1:A:78:PRO:HB3 | 1:A:78:PRO:HA | 10 | 0.14 |
| (2,875) | 1:A:78:PRO:HB3 | 1:A:78:PRO:HA | 13 | 0.14 |
| (2,875) | 1:A:78:PRO:HB3 | 1:A:78:PRO:HA | 14 | 0.14 |
| (2,874) | 1:A:42:PRO:HB3 | 1:A:42:PRO:HA | 1 | 0.14 |
| (2,874) | 1:A:42:PRO:HB3 | 1:A:42:PRO:HA | 4 | 0.14 |
| (2,874) | 1:A:42:PRO:HB3 | 1:A:42:PRO:HA | 6 | 0.14 |
| (2,874) | 1:A:42:PRO:HB3 | 1:A:42:PRO:HA | 12 | 0.14 |
| (2,874) | 1:A:42:PRO:HB3 | 1:A:42:PRO:HA | 13 | 0.14 |
| (2,874) | 1:A:42:PRO:HB3 | 1:A:42:PRO:HA | 16 | 0.14 |
| (2,853) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:74:LEU:HB3 | 6 | 0.14 |
| (2,853) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:74:LEU:HB3 | 6 | 0.14 |
| (2,853) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:74:LEU:HB3 | 6 | 0.14 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:33:THR:HA | 4 | 0.14 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:33:THR:HA | 4 | 0.14 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:33:THR:HA | 4 | 0.14 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:33:THR:HA | 5 | 0.14 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:33:THR:HA | 5 | 0.14 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:33:THR:HA | 5 | 0.14 |
| (2,82) | 1:A:3:ALA:HA | 1:A:4:SER:H | 14 | 0.14 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG21 | 1 | 0.14 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG22 | 1 | 0.14 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG23 | 1 | 0.14 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG21 | 7 | 0.14 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG22 | 7 | 0.14 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG23 | 7 | 0.14 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG21 | 10 | 0.14 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG22 | 10 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG23 | 10 | 0.14 |
| (2,794) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:36:VAL:H | 3 | 0.14 |
| (2,794) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:36:VAL:H | 3 | 0.14 |
| (2,794) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:36:VAL:H | 3 | 0.14 |
| (2,794) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:36:VAL:H | 9 | 0.14 |
| (2,794) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:36:VAL:H | 9 | 0.14 |
| (2,794) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:36:VAL:H | 9 | 0.14 |
| (2,791) | 1:A:96:THR:HG21 | 1:A:97:ARG:H | 8 | 0.14 |
| (2,791) | 1:A:96:THR:HG22 | 1:A:97:ARG:H | 8 | 0.14 |
| (2,791) | 1:A:96:THR:HG23 | 1:A:97:ARG:H | 8 | 0.14 |
| (2,786) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:34:ALA:HB1 | 14 | 0.14 |
| (2,786) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:34:ALA:HB2 | 14 | 0.14 |
| (2,786) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:34:ALA:HB3 | 14 | 0.14 |
| (2,76) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HE1 | 13 | 0.14 |
| (2,76) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HE2 | 13 | 0.14 |
| (2,76) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HE1 | 13 | 0.14 |
| (2,76) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HE2 | 13 | 0.14 |
| (2,76) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HE1 | 13 | 0.14 |
| (2,76) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HE2 | 13 | 0.14 |
| (2,731) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:42:PRO:HG2 | 2 | 0.14 |
| (2,731) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:42:PRO:HG2 | 5 | 0.14 |
| (2,731) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:42:PRO:HG2 | 13 | 0.14 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG11 | 11 | 0.14 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG12 | 11 | 0.14 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG13 | 11 | 0.14 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG11 | 11 | 0.14 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG12 | 11 | 0.14 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG13 | 11 | 0.14 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG11 | 11 | 0.14 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG12 | 11 | 0.14 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG13 | 11 | 0.14 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB1 | 4 | 0.14 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB2 | 4 | 0.14 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB3 | 4 | 0.14 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB1 | 7 | 0.14 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB2 | 7 | 0.14 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB3 | 7 | 0.14 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB1 | 12 | 0.14 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB2 | 12 | 0.14 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB3 | 12 | 0.14 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB1 | 15 | 0.14 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB2 | 15 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB3 | 15 | 0.14 |
| (2,552) | 1:A:25:LEU:HB3 | 1:A:25:LEU:HA | 7 | 0.14 |
| (2,552) | 1:A:25:LEU:HB3 | 1:A:25:LEU:HA | 11 | 0.14 |
| (2,552) | 1:A:25:LEU:HB3 | 1:A:25:LEU:HA | 16 | 0.14 |
| (2,527) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:24:THR:H | 1 | 0.14 |
| (2,527) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:24:THR:H | 3 | 0.14 |
| (2,527) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:24:THR:H | 8 | 0.14 |
| (2,527) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:24:THR:H | 10 | 0.14 |
| (2,51) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HB3 | 1 | 0.14 |
| (2,51) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HB3 | 1 | 0.14 |
| (2,51) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HB3 | 2 | 0.14 |
| (2,51) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HB3 | 2 | 0.14 |
| (2,51) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HB3 | 6 | 0.14 |
| (2,51) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HB3 | 6 | 0.14 |
| (2,51) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HB3 | 14 | 0.14 |
| (2,51) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HB3 | 14 | 0.14 |
| (2,496) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:23:GLN:HG2 | 8 | 0.14 |
| (2,494) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:23:GLN:H | 6 | 0.14 |
| (2,492) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:19:GLN:HA | 14 | 0.14 |
| (2,492) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:19:GLN:HA | 16 | 0.14 |
| (2,464) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HA | 7 | 0.14 |
| (2,464) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HA | 16 | 0.14 |
| (2,458) | 1:A:20:GLN:HB3 | 1:A:16:LEU:HB3 | 12 | 0.14 |
| (2,389) | 1:A:19:GLN:HA | 1:A:19:GLN:H | 1 | 0.14 |
| (2,389) | 1:A:19:GLN:HA | 1:A:19:GLN:H | 8 | 0.14 |
| (2,389) | 1:A:19:GLN:HA | 1:A:19:GLN:H | 10 | 0.14 |
| (2,389) | 1:A:19:GLN:HA | 1:A:19:GLN:H | 12 | 0.14 |
| (2,389) | 1:A:19:GLN:HA | 1:A:19:GLN:H | 16 | 0.14 |
| (2,359) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:21:GLN:HG2 | 6 | 0.14 |
| (2,359) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:21:GLN:HG2 | 6 | 0.14 |
| (2,359) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:21:GLN:HG2 | 6 | 0.14 |
| (2,351) | 1:A:16:LEU:HA | 1:A:16:LEU:HD21 | 3 | 0.14 |
| (2,351) | 1:A:16:LEU:HA | 1:A:16:LEU:HD22 | 3 | 0.14 |
| (2,351) | 1:A:16:LEU:HA | 1:A:16:LEU:HD23 | 3 | 0.14 |
| (2,325) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 3 | 0.14 |
| (2,325) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 3 | 0.14 |
| (2,325) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 3 | 0.14 |
| (2,274) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:12:ARG:HD3 | 10 | 0.14 |
| (2,265) | 1:A:12:ARG:HG2 | 1:A:11:ALA:HB1 | 1 | 0.14 |
| (2,265) | 1:A:12:ARG:HG2 | 1:A:11:ALA:HB2 | 1 | 0.14 |
| (2,265) | 1:A:12:ARG:HG2 | 1:A:11:ALA:HB3 | 1 | 0.14 |
| (2,24) | 1:A:39:HIS:HD2 | 1:A:39:HIS:HB2 | 14 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD11 | 4 | 0.14 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD12 | 4 | 0.14 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD13 | 4 | 0.14 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD11 | 4 | 0.14 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD12 | 4 | 0.14 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD13 | 4 | 0.14 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD11 | 4 | 0.14 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD12 | 4 | 0.14 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD13 | 4 | 0.14 |
| (2,237) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:85:PRO:HB3 | 4 | 0.14 |
| (2,237) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:85:PRO:HB3 | 4 | 0.14 |
| (2,237) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:85:PRO:HB3 | 4 | 0.14 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HB2 | 7 | 0.14 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HB2 | 7 | 0.14 |
| (2,236) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HB2 | 7 | 0.14 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:50:ALA:H | 9 | 0.14 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:50:ALA:H | 9 | 0.14 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:50:ALA:H | 9 | 0.14 |
| (2,194) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HG2 | 9 | 0.14 |
| (2,194) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HG2 | 12 | 0.14 |
| (2,1914) | 1:A:91:THR:HB | 1:A:92:GLN:H | 8 | 0.14 |
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:42:PRO:HB3 | 3 | 0.14 |
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:42:PRO:HB3 | 3 | 0.14 |
| (2,1898) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:42:PRO:HB3 | 3 | 0.14 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:61:ALA:HB1 | 5 | 0.14 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:61:ALA:HB2 | 5 | 0.14 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:61:ALA:HB3 | 5 | 0.14 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE2 | 1:A:61:ALA:HB1 | 5 | 0.14 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE2 | 1:A:61:ALA:HB2 | 5 | 0.14 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE2 | 1:A:61:ALA:HB3 | 5 | 0.14 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:61:ALA:HB1 | 15 | 0.14 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:61:ALA:HB2 | 15 | 0.14 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:61:ALA:HB3 | 15 | 0.14 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE2 | 1:A:61:ALA:HB1 | 15 | 0.14 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE2 | 1:A:61:ALA:HB2 | 15 | 0.14 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE2 | 1:A:61:ALA:HB3 | 15 | 0.14 |
| (2,1887) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:14:ASN:H | 6 | 0.14 |
| (2,1885) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:13:LEU:HA | 4 | 0.14 |
| (2,1850) | 1:A:70:HIS:HD2 | 1:A:70:HIS:HB3 | 4 | 0.14 |
| (2,1849) | 1:A:84:HIS:HD2 | 1:A:84:HIS:H | 5 | 0.14 |
| (2,1848) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:22:GLN:H | 10 | 0.14 |
| (2,1844) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:14:ASN:HB2 | 15 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1836) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:13:LEU:H | 14 | 0.14 |
| (2,1836) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:13:LEU:H | 14 | 0.14 |
| (2,1836) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:13:LEU:H | 14 | 0.14 |
| (2,1803) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:100:GLN:H | 11 | 0.14 |
| (2,1769) | 1:A:97:ARG:HA | 1:A:97:ARG:HG3 | 5 | 0.14 |
| (2,1769) | 1:A:97:ARG:HA | 1:A:97:ARG:HG3 | 13 | 0.14 |
| (2,1753) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:95:HIS:HA | 3 | 0.14 |
| (2,1714) | 1:A:92:GLN:HG2 | 1:A:92:GLN:HA | 15 | 0.14 |
| (2,1713) | 1:A:92:GLN:HB2 | 1:A:92:GLN:H | 9 | 0.14 |
| (2,1711) | 1:A:92:GLN:HB2 | 1:A:92:GLN:HB3 | 1 | 0.14 |
| (2,1711) | 1:A:92:GLN:HB2 | 1:A:92:GLN:HB3 | 9 | 0.14 |
| (2,1710) | 1:A:92:GLN:HB2 | 1:A:89:ALA:HA | 3 | 0.14 |
| (2,1710) | 1:A:92:GLN:HB2 | 1:A:89:ALA:HA | 11 | 0.14 |
| (2,1689) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:91:THR:H | 3 | 0.14 |
| (2,1689) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:91:THR:H | 6 | 0.14 |
| (2,1689) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:91:THR:H | 11 | 0.14 |
| (2,1689) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:91:THR:H | 13 | 0.14 |
| (2,1662) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:H | 1 | 0.14 |
| (2,1662) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:H | 3 | 0.14 |
| (2,1662) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:H | 5 | 0.14 |
| (2,1662) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:H | 7 | 0.14 |
| (2,1662) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:H | 11 | 0.14 |
| (2,1662) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:H | 12 | 0.14 |
| (2,1662) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:H | 15 | 0.14 |
| (2,1662) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:90:LEU:H | 16 | 0.14 |
| (2,1602) | 1:A:86:THR:HB | 1:A:88:HIS:H | 7 | 0.14 |
| (2,1602) | 1:A:86:THR:HB | 1:A:88:HIS:H | 8 | 0.14 |
| (2,1602) | 1:A:86:THR:HB | 1:A:88:HIS:H | 14 | 0.14 |
| (2,1602) | 1:A:86:THR:HB | 1:A:88:HIS:H | 16 | 0.14 |
| (2,1569) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:84:HIS:H | 16 | 0.14 |
| (2,1566) | 1:A:83:ASP:HB2 | 1:A:83:ASP:H | 2 | 0.14 |
| (2,1566) | 1:A:83:ASP:HB2 | 1:A:83:ASP:H | 5 | 0.14 |
| (2,1566) | 1:A:83:ASP:HB2 | 1:A:83:ASP:H | 16 | 0.14 |
| (2,1560) | 1:A:82:PHE:HB2 | 1:A:83:ASP:H | 7 | 0.14 |
| (2,156) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:71:ASN:HD22 | 6 | 0.14 |
| (2,156) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:71:ASN:HD22 | 7 | 0.14 |
| (2,1542) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:84:HIS:H | 15 | 0.14 |
| (2,1540) | 1:A:98:LEU:HB2 | 1:A:95:HIS:HA | 14 | 0.14 |
| (2,1538) | 1:A:98:LEU:HB3 | 1:A:99:THR:H | 4 | 0.14 |
| (2,1538) | 1:A:98:LEU:HB3 | 1:A:99:THR:H | 13 | 0.14 |
| (2,1500) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:74:LEU:H | 2 | 0.14 |
| (2,1500) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:74:LEU:H | 2 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1500) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:74:LEU:H | 2 | 0.14 |
| (2,1500) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:74:LEU:H | 9 | 0.14 |
| (2,1500) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:74:LEU:H | 9 | 0.14 |
| (2,1500) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:74:LEU:H | 9 | 0.14 |
| (2,1500) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:74:LEU:H | 14 | 0.14 |
| (2,1500) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:74:LEU:H | 14 | 0.14 |
| (2,1500) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:74:LEU:H | 14 | 0.14 |
| (2,1490) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:79:THR:HB | 2 | 0.14 |
| (2,1448) | 1:A:95:HIS:HB3 | 1:A:95:HIS:H | 7 | 0.14 |
| (2,1448) | 1:A:95:HIS:HB3 | 1:A:95:HIS:H | 11 | 0.14 |
| (2,1445) | 1:A:88:HIS:HB2 | 1:A:88:HIS:H | 5 | 0.14 |
| (2,1444) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:88:HIS:H | 14 | 0.14 |
| (2,1440) | 1:A:72:THR:HB | 1:A:9:LEU:HD21 | 1 | 0.14 |
| (2,1440) | 1:A:72:THR:HB | 1:A:9:LEU:HD22 | 1 | 0.14 |
| (2,1440) | 1:A:72:THR:HB | 1:A:9:LEU:HD23 | 1 | 0.14 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG21 | 1 | 0.14 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG22 | 1 | 0.14 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG23 | 1 | 0.14 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG21 | 1 | 0.14 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG22 | 1 | 0.14 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG23 | 1 | 0.14 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG21 | 1 | 0.14 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG22 | 1 | 0.14 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG23 | 1 | 0.14 |
| (2,1402) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:44:SER:HB3 | 3 | 0.14 |
| (2,1402) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:44:SER:HB3 | 3 | 0.14 |
| (2,1402) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:44:SER:HB3 | 3 | 0.14 |
| (2,1402) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:44:SER:HB3 | 15 | 0.14 |
| (2,1402) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:44:SER:HB3 | 15 | 0.14 |
| (2,1402) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:44:SER:HB3 | 15 | 0.14 |
| (2,1379) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:97:ARG:HB2 | 2 | 0.14 |
| (2,1379) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:97:ARG:HB2 | 3 | 0.14 |
| (2,1379) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:97:ARG:HB2 | 7 | 0.14 |
| (2,1375) | 1:A:97:ARG:HB3 | 1:A:97:ARG:HD3 | 10 | 0.14 |
| (2,1367) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:98:LEU:H | 3 | 0.14 |
| (2,136) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:8:ASP:H | 9 | 0.14 |
| (2,136) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:8:ASP:H | 9 | 0.14 |
| (2,136) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:8:ASP:H | 9 | 0.14 |
| (2,1350) | 1:A:70:HIS:HB3 | 1:A:71:ASN:H | 6 | 0.14 |
| (2,1334) | 1:A:69:THR:HA | 1:A:74:LEU:H | 3 | 0.14 |
| (2,1334) | 1:A:69:THR:HA | 1:A:74:LEU:H | 13 | 0.14 |
| (2,133) | 1:A:35:THR:HG21 | 1:A:36:VAL:H | 9 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,133) | 1:A:35:THR:HG22 | 1:A:36:VAL:H | 9 | 0.14 |
| (2,133) | 1:A:35:THR:HG23 | 1:A:36:VAL:H | 9 | 0.14 |
| (2,133) | 1:A:35:THR:HG21 | 1:A:36:VAL:H | 16 | 0.14 |
| (2,133) | 1:A:35:THR:HG22 | 1:A:36:VAL:H | 16 | 0.14 |
| (2,133) | 1:A:35:THR:HG23 | 1:A:36:VAL:H | 16 | 0.14 |
| (2,1299) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:67:THR:H | 5 | 0.14 |
| (2,1299) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:67:THR:H | 13 | 0.14 |
| (2,1299) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:67:THR:H | 16 | 0.14 |
| (2,1270) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:68:LEU:HB3 | 1 | 0.14 |
| (2,1270) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:68:LEU:HB3 | 2 | 0.14 |
| (2,1270) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:68:LEU:HB3 | 5 | 0.14 |
| (2,1270) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:68:LEU:HB3 | 8 | 0.14 |
| (2,1270) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:68:LEU:HB3 | 9 | 0.14 |
| (2,1270) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:68:LEU:HB3 | 10 | 0.14 |
| (2,1231) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:64:LEU:H | 6 | 0.14 |
| (2,1226) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:60:THR:HA | 8 | 0.14 |
| (2,1220) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:35:THR:HG21 | 15 | 0.14 |
| (2,1220) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:35:THR:HG22 | 15 | 0.14 |
| (2,1220) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:35:THR:HG23 | 15 | 0.14 |
| (2,1219) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:60:THR:HG21 | 3 | 0.14 |
| (2,1219) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:60:THR:HG22 | 3 | 0.14 |
| (2,1219) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:60:THR:HG23 | 3 | 0.14 |
| (2,1172) | 1:A:61:ALA:HB1 | 1:A:81:ILE:HB | 6 | 0.14 |
| (2,1172) | 1:A:61:ALA:HB2 | 1:A:81:ILE:HB | 6 | 0.14 |
| (2,1172) | 1:A:61:ALA:HB3 | 1:A:81:ILE:HB | 6 | 0.14 |
| (2,1172) | 1:A:61:ALA:HB1 | 1:A:81:ILE:HB | 10 | 0.14 |
| (2,1172) | 1:A:61:ALA:HB2 | 1:A:81:ILE:HB | 10 | 0.14 |
| (2,1172) | 1:A:61:ALA:HB3 | 1:A:81:ILE:HB | 10 | 0.14 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ALA:H | 3 | 0.14 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ALA:H | 3 | 0.14 |
| (2,116) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ALA:H | 3 | 0.14 |
| (2,1135) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:58:SER:HA | 2 | 0.14 |
| (2,1135) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:58:SER:HA | 3 | 0.14 |
| (2,1135) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:58:SER:HA | 13 | 0.14 |
| (2,1133) | 1:A:58:SER:HB3 | 1:A:59:LEU:HG | 15 | 0.14 |
| (2,1073) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:54:LEU:HB2 | 15 | 0.14 |
| (2,1029) | 1:A:51:PHE:HB3 | 1:A:52:LYS:HG2 | 15 | 0.14 |
| (1,95) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:71:ASN:HA | 6 | 0.14 |
| (1,95) | 1:A:71:ASN:HD22 | 1:A:71:ASN:HA | 7 | 0.14 |
| (1,68) | 1:A:20:GLN:H | 1:A:21:GLN:H | 2 | 0.14 |
| (1,600) | 1:A:33:THR:H | 1:A:30:ALA:HA | 8 | 0.14 |
| (1,600) | 1:A:33:THR:H | 1:A:30:ALA:HA | 12 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,600) | 1:A:33:THR:H | 1:A:30:ALA:HA | 14 | 0.14 |
| (1,532) | 1:A:93:HIS:H | 1:A:93:HIS:HD2 | 13 | 0.14 |
| (1,529) | 1:A:65:ARG:H | 1:A:64:LEU:HB3 | 5 | 0.14 |
| (1,529) | 1:A:65:ARG:H | 1:A:64:LEU:HB3 | 16 | 0.14 |
| (1,52) | 1:A:15:GLY:H | 1:A:15:GLY:HA2 | 2 | 0.14 |
| (1,52) | 1:A:15:GLY:H | 1:A:15:GLY:HA2 | 5 | 0.14 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG21 | 1 | 0.14 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG22 | 1 | 0.14 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG23 | 1 | 0.14 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG21 | 2 | 0.14 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG22 | 2 | 0.14 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG23 | 2 | 0.14 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG21 | 6 | 0.14 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG22 | 6 | 0.14 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG23 | 6 | 0.14 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG21 | 7 | 0.14 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG22 | 7 | 0.14 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG23 | 7 | 0.14 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG21 | 11 | 0.14 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG22 | 11 | 0.14 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG23 | 11 | 0.14 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG21 | 12 | 0.14 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG22 | 12 | 0.14 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG23 | 12 | 0.14 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG21 | 15 | 0.14 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG22 | 15 | 0.14 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG23 | 15 | 0.14 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG21 | 16 | 0.14 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG22 | 16 | 0.14 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG23 | 16 | 0.14 |
| (1,503) | 1:A:100:GLN:H | 1:A:99:THR:HA | 10 | 0.14 |
| (1,503) | 1:A:100:GLN:H | 1:A:99:THR:HA | 11 | 0.14 |
| (1,416) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 9 | 0.14 |
| (1,416) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 9 | 0.14 |
| (1,416) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 9 | 0.14 |
| (1,416) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 15 | 0.14 |
| (1,416) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 15 | 0.14 |
| (1,416) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 15 | 0.14 |
| (1,409) | 1:A:4:SER:H | 1:A:4:SER:HB2 | 10 | 0.14 |
| (1,406) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:47:PRO:HA | 5 | 0.14 |
| (1,406) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:47:PRO:HA | 9 | 0.14 |
| (1,398) | 1:A:44:SER:H | 1:A:43:GLU:HG2 | 9 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,38) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:74:LEU:H | 16 | 0.14 |
| (1,376) | 1:A:58:SER:H | 1:A:58:SER:HB3 | 6 | 0.14 |
| (1,376) | 1:A:58:SER:H | 1:A:58:SER:HB3 | 10 | 0.14 |
| (1,350) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HB3 | 16 | 0.14 |
| (1,347) | 1:A:17:SER:H | 1:A:17:SER:HB2 | 8 | 0.14 |
| (1,347) | 1:A:17:SER:H | 1:A:17:SER:HB2 | 14 | 0.14 |
| (1,346) | 1:A:17:SER:H | 1:A:17:SER:HB3 | 5 | 0.14 |
| (1,3) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:51:PHE:H | 4 | 0.14 |
| (1,268) | 1:A:99:THR:H | 1:A:98:LEU:HD21 | 13 | 0.14 |
| (1,268) | 1:A:99:THR:H | 1:A:98:LEU:HD22 | 13 | 0.14 |
| (1,268) | 1:A:99:THR:H | 1:A:98:LEU:HD23 | 13 | 0.14 |
| (1,268) | 1:A:99:THR:H | 1:A:98:LEU:HD21 | 15 | 0.14 |
| (1,268) | 1:A:99:THR:H | 1:A:98:LEU:HD22 | 15 | 0.14 |
| (1,268) | 1:A:99:THR:H | 1:A:98:LEU:HD23 | 15 | 0.14 |
| (1,247) | 1:A:64:LEU:H | 1:A:36:VAL:HG11 | 8 | 0.14 |
| (1,247) | 1:A:64:LEU:H | 1:A:36:VAL:HG12 | 8 | 0.14 |
| (1,247) | 1:A:64:LEU:H | 1:A:36:VAL:HG13 | 8 | 0.14 |
| (1,239) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG13 | 3 | 0.14 |
| (1,23) | 1:A:44:SER:H | 1:A:45:ILE:H | 13 | 0.14 |
| (1,22) | 1:A:43:GLU:H | 1:A:44:SER:H | 13 | 0.14 |
| (1,213) | 1:A:38:GLY:H | 1:A:38:GLY:HA2 | 15 | 0.14 |
| (1,20) | 1:A:35:THR:H | 1:A:34:ALA:H | 6 | 0.14 |
| (1,20) | 1:A:35:THR:H | 1:A:34:ALA:H | 15 | 0.14 |
| (1,159) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HA | 11 | 0.14 |
| (1,159) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HA | 16 | 0.14 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG21 | 9 | 0.14 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG22 | 9 | 0.14 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG23 | 9 | 0.14 |
| (1,125) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:21:GLN:HB2 | 13 | 0.14 |
| (1,125) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:21:GLN:HB2 | 16 | 0.14 |
| (1,105) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:94:LEU:HD21 | 2 | 0.14 |
| (1,105) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:94:LEU:HD22 | 2 | 0.14 |
| (1,105) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:94:LEU:HD23 | 2 | 0.14 |
| (1,103) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:71:ASN:HB2 | 1 | 0.14 |
| (1,103) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:71:ASN:HB2 | 3 | 0.14 |
| (1,103) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:71:ASN:HB2 | 14 | 0.14 |
| (2,997) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HG | 16 | 0.13 |
| (2,997) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HG | 16 | 0.13 |
| (2,997) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HG | 16 | 0.13 |
| (2,977) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:49:THR:H | 5 | 0.13 |
| (2,930) | 1:A:45:ILE:HB | 1:A:45:ILE:HG13 | 1 | 0.13 |
| (2,930) | 1:A:45:ILE:HB | 1:A:45:ILE:HG13 | 3 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,930) | 1:A:45:ILE:HB | 1:A:45:ILE:HG13 | 5 | 0.13 |
| (2,930) | 1:A:45:ILE:HB | 1:A:45:ILE:HG13 | 7 | 0.13 |
| (2,930) | 1:A:45:ILE:HB | 1:A:45:ILE:HG13 | 10 | 0.13 |
| (2,930) | 1:A:45:ILE:HB | 1:A:45:ILE:HG13 | 14 | 0.13 |
| (2,876) | 1:A:42:PRO:HB2 | 1:A:43:GLU:H | 4 | 0.13 |
| (2,875) | 1:A:78:PRO:HB3 | 1:A:78:PRO:HA | 5 | 0.13 |
| (2,875) | 1:A:78:PRO:HB3 | 1:A:78:PRO:HA | 8 | 0.13 |
| (2,875) | 1:A:78:PRO:HB3 | 1:A:78:PRO:HA | 12 | 0.13 |
| (2,875) | 1:A:78:PRO:HB3 | 1:A:78:PRO:HA | 16 | 0.13 |
| (2,874) | 1:A:42:PRO:HB3 | 1:A:42:PRO:HA | 2 | 0.13 |
| (2,874) | 1:A:42:PRO:HB3 | 1:A:42:PRO:HA | 3 | 0.13 |
| (2,874) | 1:A:42:PRO:HB3 | 1:A:42:PRO:HA | 5 | 0.13 |
| (2,874) | 1:A:42:PRO:HB3 | 1:A:42:PRO:HA | 7 | 0.13 |
| (2,874) | 1:A:42:PRO:HB3 | 1:A:42:PRO:HA | 8 | 0.13 |
| (2,874) | 1:A:42:PRO:HB3 | 1:A:42:PRO:HA | 9 | 0.13 |
| (2,874) | 1:A:42:PRO:HB3 | 1:A:42:PRO:HA | 11 | 0.13 |
| (2,874) | 1:A:42:PRO:HB3 | 1:A:42:PRO:HA | 14 | 0.13 |
| (2,874) | 1:A:42:PRO:HB3 | 1:A:42:PRO:HA | 15 | 0.13 |
| (2,857) | 1:A:37:LEU:HD21 | 1:A:54:LEU:H | 4 | 0.13 |
| (2,857) | 1:A:37:LEU:HD22 | 1:A:54:LEU:H | 4 | 0.13 |
| (2,857) | 1:A:37:LEU:HD23 | 1:A:54:LEU:H | 4 | 0.13 |
| (2,857) | 1:A:37:LEU:HD21 | 1:A:54:LEU:H | 7 | 0.13 |
| (2,857) | 1:A:37:LEU:HD22 | 1:A:54:LEU:H | 7 | 0.13 |
| (2,857) | 1:A:37:LEU:HD23 | 1:A:54:LEU:H | 7 | 0.13 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:36:VAL:H | 4 | 0.13 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:36:VAL:H | 4 | 0.13 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:36:VAL:H | 4 | 0.13 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:36:VAL:H | 13 | 0.13 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:36:VAL:H | 13 | 0.13 |
| (2,845) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:36:VAL:H | 13 | 0.13 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:33:THR:HA | 14 | 0.13 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:33:THR:HA | 14 | 0.13 |
| (2,823) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:33:THR:HA | 14 | 0.13 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG21 | 4 | 0.13 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG22 | 4 | 0.13 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG23 | 4 | 0.13 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG21 | 13 | 0.13 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG22 | 13 | 0.13 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG23 | 13 | 0.13 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG21 | 14 | 0.13 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG22 | 14 | 0.13 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG23 | 14 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,794) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:36:VAL:H | 10 | 0.13 |
| (2,794) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:36:VAL:H | 10 | 0.13 |
| (2,794) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:36:VAL:H | 10 | 0.13 |
| (2,794) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:36:VAL:H | 16 | 0.13 |
| (2,794) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:36:VAL:H | 16 | 0.13 |
| (2,794) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:36:VAL:H | 16 | 0.13 |
| (2,786) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:34:ALA:HB1 | 1 | 0.13 |
| (2,786) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:34:ALA:HB2 | 1 | 0.13 |
| (2,786) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:34:ALA:HB3 | 1 | 0.13 |
| (2,786) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:34:ALA:HB1 | 10 | 0.13 |
| (2,786) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:34:ALA:HB2 | 10 | 0.13 |
| (2,786) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:34:ALA:HB3 | 10 | 0.13 |
| (2,763) | 1:A:61:ALA:HA | 1:A:64:LEU:HA | 8 | 0.13 |
| (2,76) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HE1 | 4 | 0.13 |
| (2,76) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HE2 | 4 | 0.13 |
| (2,76) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HE1 | 4 | 0.13 |
| (2,76) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HE2 | 4 | 0.13 |
| (2,76) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HE1 | 4 | 0.13 |
| (2,76) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HE2 | 4 | 0.13 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG11 | 13 | 0.13 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG12 | 13 | 0.13 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG13 | 13 | 0.13 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG11 | 13 | 0.13 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG12 | 13 | 0.13 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG13 | 13 | 0.13 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG11 | 13 | 0.13 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG12 | 13 | 0.13 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG13 | 13 | 0.13 |
| (2,565) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:71:ASN:HB2 | 8 | 0.13 |
| (2,565) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:71:ASN:HB2 | 8 | 0.13 |
| (2,565) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:71:ASN:HB2 | 8 | 0.13 |
| (2,565) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:71:ASN:HB2 | 15 | 0.13 |
| (2,565) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:71:ASN:HB2 | 15 | 0.13 |
| (2,565) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:71:ASN:HB2 | 15 | 0.13 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:64:LEU:HD11 | 4 | 0.13 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:64:LEU:HD12 | 4 | 0.13 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:64:LEU:HD13 | 4 | 0.13 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:64:LEU:HD11 | 4 | 0.13 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:64:LEU:HD12 | 4 | 0.13 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:64:LEU:HD13 | 4 | 0.13 |
| (2,552) | 1:A:25:LEU:HB3 | 1:A:25:LEU:HA | 3 | 0.13 |
| (2,527) | 1:A:24:THR:HB | 1:A:24:THR:H | 11 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,51) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HB3 | 5 | 0.13 |
| (2,51) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HB3 | 5 | 0.13 |
| (2,51) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HB3 | 7 | 0.13 |
| (2,51) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HB3 | 7 | 0.13 |
| (2,51) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HB3 | 10 | 0.13 |
| (2,51) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HB3 | 10 | 0.13 |
| (2,51) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HB3 | 12 | 0.13 |
| (2,51) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HB3 | 12 | 0.13 |
| (2,51) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HB3 | 15 | 0.13 |
| (2,51) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HB3 | 15 | 0.13 |
| (2,494) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:23:GLN:H | 3 | 0.13 |
| (2,487) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:95:HIS:HB2 | 15 | 0.13 |
| (2,486) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:22:GLN:HB2 | 2 | 0.13 |
| (2,486) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:22:GLN:HB2 | 3 | 0.13 |
| (2,486) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:22:GLN:HB2 | 4 | 0.13 |
| (2,486) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:22:GLN:HB2 | 9 | 0.13 |
| (2,486) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:22:GLN:HB2 | 12 | 0.13 |
| (2,486) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:22:GLN:HB2 | 13 | 0.13 |
| (2,477) | 1:A:25:LEU:HG | 1:A:25:LEU:H | 3 | 0.13 |
| (2,464) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HA | 4 | 0.13 |
| (2,464) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HA | 14 | 0.13 |
| (2,404) | 1:A:23:GLN:HG2 | 1:A:24:THR:H | 12 | 0.13 |
| (2,376) | 1:A:18:PRO:HA | 1:A:21:GLN:HG2 | 7 | 0.13 |
| (2,354) | 1:A:16:LEU:HG | 1:A:16:LEU:H | 1 | 0.13 |
| (2,325) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 7 | 0.13 |
| (2,325) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 7 | 0.13 |
| (2,325) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 7 | 0.13 |
| (2,296) | 1:A:68:LEU:HB2 | 1:A:68:LEU:H | 14 | 0.13 |
| (2,274) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:12:ARG:HD3 | 9 | 0.13 |
| (2,274) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:12:ARG:HD3 | 12 | 0.13 |
| (2,269) | 1:A:12:ARG:HG2 | 1:A:13:LEU:H | 6 | 0.13 |
| (2,265) | 1:A:12:ARG:HG2 | 1:A:11:ALA:HB1 | 2 | 0.13 |
| (2,265) | 1:A:12:ARG:HG2 | 1:A:11:ALA:HB2 | 2 | 0.13 |
| (2,265) | 1:A:12:ARG:HG2 | 1:A:11:ALA:HB3 | 2 | 0.13 |
| (2,250) | 1:A:12:ARG:HG2 | 1:A:12:ARG:HB3 | 1 | 0.13 |
| (2,250) | 1:A:12:ARG:HG2 | 1:A:12:ARG:HB3 | 15 | 0.13 |
| (2,24) | 1:A:39:HIS:HD2 | 1:A:39:HIS:HB2 | 8 | 0.13 |
| (2,237) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:85:PRO:HB3 | 1 | 0.13 |
| (2,237) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:85:PRO:HB3 | 1 | 0.13 |
| (2,237) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:85:PRO:HB3 | 1 | 0.13 |
| (2,237) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:85:PRO:HB3 | 3 | 0.13 |
| (2,237) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:85:PRO:HB3 | 3 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,237) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:85:PRO:HB3 | 3 | 0.13 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:50:ALA:H | 1 | 0.13 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:50:ALA:H | 1 | 0.13 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:50:ALA:H | 1 | 0.13 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:50:ALA:H | 3 | 0.13 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:50:ALA:H | 3 | 0.13 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:50:ALA:H | 3 | 0.13 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:50:ALA:H | 5 | 0.13 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:50:ALA:H | 5 | 0.13 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:50:ALA:H | 5 | 0.13 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:50:ALA:H | 8 | 0.13 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:50:ALA:H | 8 | 0.13 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:50:ALA:H | 8 | 0.13 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:50:ALA:H | 10 | 0.13 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:50:ALA:H | 10 | 0.13 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:50:ALA:H | 10 | 0.13 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:50:ALA:H | 11 | 0.13 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:50:ALA:H | 11 | 0.13 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:50:ALA:H | 11 | 0.13 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:50:ALA:H | 16 | 0.13 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:50:ALA:H | 16 | 0.13 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:50:ALA:H | 16 | 0.13 |
| (2,20) | 1:A:102:HIS:HB2 | 1:A:102:HIS:HD2 | 4 | 0.13 |
| (2,194) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HG2 | 2 | 0.13 |
| (2,194) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HG2 | 5 | 0.13 |
| (2,194) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HG2 | 10 | 0.13 |
| (2,194) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HG2 | 11 | 0.13 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB1 | 12 | 0.13 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB2 | 12 | 0.13 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB3 | 12 | 0.13 |
| (2,1914) | 1:A:91:THR:HB | 1:A:92:GLN:H | 12 | 0.13 |
| (2,1914) | 1:A:91:THR:HB | 1:A:92:GLN:H | 16 | 0.13 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:61:ALA:HB1 | 3 | 0.13 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:61:ALA:HB2 | 3 | 0.13 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:61:ALA:HB3 | 3 | 0.13 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE2 | 1:A:61:ALA:HB1 | 3 | 0.13 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE2 | 1:A:61:ALA:HB2 | 3 | 0.13 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE2 | 1:A:61:ALA:HB3 | 3 | 0.13 |
| (2,1887) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:14:ASN:H | 16 | 0.13 |
| (2,1850) | 1:A:70:HIS:HD2 | 1:A:70:HIS:HB3 | 6 | 0.13 |
| (2,1849) | 1:A:84:HIS:HD2 | 1:A:84:HIS:H | 1 | 0.13 |
| (2,1789) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:H | 1 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1789) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:H | 7 | 0.13 |
| (2,1789) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:H | 11 | 0.13 |
| (2,1769) | 1:A:97:ARG:HA | 1:A:97:ARG:HG3 | 2 | 0.13 |
| (2,1769) | 1:A:97:ARG:HA | 1:A:97:ARG:HG3 | 7 | 0.13 |
| (2,1734) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:98:LEU:H | 11 | 0.13 |
| (2,1714) | 1:A:92:GLN:HG2 | 1:A:92:GLN:HA | 5 | 0.13 |
| (2,1714) | 1:A:92:GLN:HG2 | 1:A:92:GLN:HA | 14 | 0.13 |
| (2,1710) | 1:A:92:GLN:HB2 | 1:A:89:ALA:HA | 4 | 0.13 |
| (2,1710) | 1:A:92:GLN:HB2 | 1:A:89:ALA:HA | 14 | 0.13 |
| (2,1710) | 1:A:92:GLN:HB2 | 1:A:89:ALA:HA | 15 | 0.13 |
| (2,1695) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:90:LEU:HG | 4 | 0.13 |
| (2,1689) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:91:THR:H | 1 | 0.13 |
| (2,1689) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:91:THR:H | 2 | 0.13 |
| (2,1689) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:91:THR:H | 4 | 0.13 |
| (2,1689) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:91:THR:H | 5 | 0.13 |
| (2,1689) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:91:THR:H | 7 | 0.13 |
| (2,1689) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:91:THR:H | 10 | 0.13 |
| (2,1689) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:91:THR:H | 12 | 0.13 |
| (2,1689) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:91:THR:H | 15 | 0.13 |
| (2,1689) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:91:THR:H | 16 | 0.13 |
| (2,1679) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HB3 | 13 | 0.13 |
| (2,1679) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:HB3 | 13 | 0.13 |
| (2,1679) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:HB3 | 13 | 0.13 |
| (2,1679) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HB3 | 15 | 0.13 |
| (2,1679) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:HB3 | 15 | 0.13 |
| (2,1679) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:HB3 | 15 | 0.13 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HB2 | 7 | 0.13 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:HB2 | 7 | 0.13 |
| (2,1678) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:HB2 | 7 | 0.13 |
| (2,1668) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 10 | 0.13 |
| (2,1668) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 10 | 0.13 |
| (2,1668) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 10 | 0.13 |
| (2,1630) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:51:PHE:H | 1 | 0.13 |
| (2,1602) | 1:A:86:THR:HB | 1:A:88:HIS:H | 9 | 0.13 |
| (2,1560) | 1:A:82:PHE:HB2 | 1:A:83:ASP:H | 1 | 0.13 |
| (2,1560) | 1:A:82:PHE:HB2 | 1:A:83:ASP:H | 9 | 0.13 |
| (2,1560) | 1:A:82:PHE:HB2 | 1:A:83:ASP:H | 16 | 0.13 |
| (2,1544) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:84:HIS:HB2 | 9 | 0.13 |
| (2,1542) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:84:HIS:H | 3 | 0.13 |
| (2,1499) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:78:PRO:HB3 | 2 | 0.13 |
| (2,1499) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:78:PRO:HB3 | 16 | 0.13 |
| (2,1490) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:79:THR:HB | 8 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1490) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:79:THR:HB | 9 | 0.13 |
| (2,1486) | 1:A:78:PRO:HB2 | 1:A:79:THR:H | 7 | 0.13 |
| (2,1453) | 1:A:40:HIS:HA | 1:A:40:HIS:HB2 | 13 | 0.13 |
| (2,1444) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:88:HIS:H | 6 | 0.13 |
| (2,1440) | 1:A:72:THR:HB | 1:A:9:LEU:HD21 | 11 | 0.13 |
| (2,1440) | 1:A:72:THR:HB | 1:A:9:LEU:HD22 | 11 | 0.13 |
| (2,1440) | 1:A:72:THR:HB | 1:A:9:LEU:HD23 | 11 | 0.13 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:45:ILE:HA | 16 | 0.13 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:45:ILE:HA | 16 | 0.13 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:45:ILE:HA | 16 | 0.13 |
| (2,1380) | 1:A:97:ARG:HB3 | 1:A:97:ARG:HG3 | 9 | 0.13 |
| (2,1379) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:97:ARG:HB2 | 4 | 0.13 |
| (2,1379) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:97:ARG:HB2 | 10 | 0.13 |
| (2,1379) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:97:ARG:HB2 | 14 | 0.13 |
| (2,1379) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:97:ARG:HB2 | 16 | 0.13 |
| (2,1374) | 1:A:97:ARG:HD2 | 1:A:97:ARG:HB3 | 5 | 0.13 |
| (2,1367) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:98:LEU:H | 16 | 0.13 |
| (2,133) | 1:A:35:THR:HG21 | 1:A:36:VAL:H | 3 | 0.13 |
| (2,133) | 1:A:35:THR:HG22 | 1:A:36:VAL:H | 3 | 0.13 |
| (2,133) | 1:A:35:THR:HG23 | 1:A:36:VAL:H | 3 | 0.13 |
| (2,133) | 1:A:35:THR:HG21 | 1:A:36:VAL:H | 7 | 0.13 |
| (2,133) | 1:A:35:THR:HG22 | 1:A:36:VAL:H | 7 | 0.13 |
| (2,133) | 1:A:35:THR:HG23 | 1:A:36:VAL:H | 7 | 0.13 |
| (2,133) | 1:A:35:THR:HG21 | 1:A:36:VAL:H | 10 | 0.13 |
| (2,133) | 1:A:35:THR:HG22 | 1:A:36:VAL:H | 10 | 0.13 |
| (2,133) | 1:A:35:THR:HG23 | 1:A:36:VAL:H | 10 | 0.13 |
| (2,1320) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:68:LEU:HB2 | 10 | 0.13 |
| (2,1301) | 1:A:66:ASN:HB2 | 1:A:65:ARG:H | 16 | 0.13 |
| (2,1276) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:62:LEU:HA | 12 | 0.13 |
| (2,1270) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:68:LEU:HB3 | 14 | 0.13 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HD21 | 3 | 0.13 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HD22 | 3 | 0.13 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HD23 | 3 | 0.13 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:HD21 | 3 | 0.13 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:HD22 | 3 | 0.13 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:HD23 | 3 | 0.13 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:HD21 | 3 | 0.13 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:HD22 | 3 | 0.13 |
| (2,1259) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:HD23 | 3 | 0.13 |
| (2,1248) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HB3 | 14 | 0.13 |
| (2,1248) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HB3 | 14 | 0.13 |
| (2,1248) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HB3 | 14 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1220) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:35:THR:HG21 | 13 | 0.13 |
| (2,1220) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:35:THR:HG22 | 13 | 0.13 |
| (2,1220) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:35:THR:HG23 | 13 | 0.13 |
| (2,1219) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:60:THR:HG21 | 16 | 0.13 |
| (2,1219) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:60:THR:HG22 | 16 | 0.13 |
| (2,1219) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:60:THR:HG23 | 16 | 0.13 |
| (2,1203) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:63:GLU:H | 9 | 0.13 |
| (2,1203) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:63:GLU:H | 13 | 0.13 |
| (2,1203) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:63:GLU:H | 15 | 0.13 |
| (2,1188) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:63:GLU:H | 8 | 0.13 |
| (2,1174) | 1:A:61:ALA:HB1 | 1:A:58:SER:HB2 | 11 | 0.13 |
| (2,1174) | 1:A:61:ALA:HB2 | 1:A:58:SER:HB2 | 11 | 0.13 |
| (2,1174) | 1:A:61:ALA:HB3 | 1:A:58:SER:HB2 | 11 | 0.13 |
| (2,1174) | 1:A:61:ALA:HB1 | 1:A:58:SER:HB2 | 16 | 0.13 |
| (2,1174) | 1:A:61:ALA:HB2 | 1:A:58:SER:HB2 | 16 | 0.13 |
| (2,1174) | 1:A:61:ALA:HB3 | 1:A:58:SER:HB2 | 16 | 0.13 |
| (2,1154) | 1:A:60:THR:HB | 1:A:63:GLU:H | 13 | 0.13 |
| (2,1135) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:58:SER:HA | 11 | 0.13 |
| (2,1135) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:58:SER:HA | 12 | 0.13 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:56:ILE:HB | 1 | 0.13 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:56:ILE:HB | 1 | 0.13 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:56:ILE:HB | 1 | 0.13 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:56:ILE:HB | 2 | 0.13 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:56:ILE:HB | 2 | 0.13 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:56:ILE:HB | 2 | 0.13 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:56:ILE:HB | 3 | 0.13 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:56:ILE:HB | 3 | 0.13 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:56:ILE:HB | 3 | 0.13 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:56:ILE:HB | 7 | 0.13 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:56:ILE:HB | 7 | 0.13 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:56:ILE:HB | 7 | 0.13 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:56:ILE:HB | 8 | 0.13 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:56:ILE:HB | 8 | 0.13 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:56:ILE:HB | 8 | 0.13 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:56:ILE:HB | 9 | 0.13 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:56:ILE:HB | 9 | 0.13 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:56:ILE:HB | 9 | 0.13 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:56:ILE:HB | 11 | 0.13 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:56:ILE:HB | 11 | 0.13 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:56:ILE:HB | 11 | 0.13 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:56:ILE:HB | 13 | 0.13 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:56:ILE:HB | 13 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:56:ILE:HB | 13 | 0.13 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:56:ILE:HB | 15 | 0.13 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:56:ILE:HB | 15 | 0.13 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:56:ILE:HB | 15 | 0.13 |
| (2,1100) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:90:LEU:HB2 | 15 | 0.13 |
| (2,1100) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:90:LEU:HB2 | 15 | 0.13 |
| (2,1100) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:90:LEU:HB2 | 15 | 0.13 |
| (2,1029) | 1:A:51:PHE:HB3 | 1:A:52:LYS:HG2 | 10 | 0.13 |
| (2,1006) | 1:A:57:ASP:HA | 1:A:57:ASP:H | 4 | 0.13 |
| (2,1006) | 1:A:57:ASP:HA | 1:A:57:ASP:H | 15 | 0.13 |
| (2,1005) | 1:A:57:ASP:HA | 1:A:57:ASP:HB2 | 3 | 0.13 |
| (2,1005) | 1:A:57:ASP:HA | 1:A:57:ASP:HB2 | 10 | 0.13 |
| (2,1005) | 1:A:57:ASP:HA | 1:A:57:ASP:HB2 | 14 | 0.13 |
| (2,1004) | 1:A:57:ASP:HB3 | 1:A:57:ASP:HA | 7 | 0.13 |
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD21 | 4 | 0.13 |
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD22 | 4 | 0.13 |
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD23 | 4 | 0.13 |
| (1,86) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:28:LEU:HD11 | 1 | 0.13 |
| (1,86) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:28:LEU:HD12 | 1 | 0.13 |
| (1,86) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:28:LEU:HD13 | 1 | 0.13 |
| (1,68) | 1:A:20:GLN:H | 1:A:21:GLN:H | 6 | 0.13 |
| (1,600) | 1:A:33:THR:H | 1:A:30:ALA:HA | 1 | 0.13 |
| (1,571) | 1:A:24:THR:H | 1:A:23:GLN:HG2 | 12 | 0.13 |
| (1,532) | 1:A:93:HIS:H | 1:A:93:HIS:HD2 | 2 | 0.13 |
| (1,529) | 1:A:65:ARG:H | 1:A:64:LEU:HB3 | 6 | 0.13 |
| (1,529) | 1:A:65:ARG:H | 1:A:64:LEU:HB3 | 14 | 0.13 |
| (1,52) | 1:A:15:GLY:H | 1:A:15:GLY:HA2 | 4 | 0.13 |
| (1,52) | 1:A:15:GLY:H | 1:A:15:GLY:HA2 | 6 | 0.13 |
| (1,52) | 1:A:15:GLY:H | 1:A:15:GLY:HA2 | 14 | 0.13 |
| (1,52) | 1:A:15:GLY:H | 1:A:15:GLY:HA2 | 16 | 0.13 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG21 | 10 | 0.13 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG22 | 10 | 0.13 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG23 | 10 | 0.13 |
| (1,503) | 1:A:100:GLN:H | 1:A:99:THR:HA | 3 | 0.13 |
| (1,503) | 1:A:100:GLN:H | 1:A:99:THR:HA | 12 | 0.13 |
| (1,503) | 1:A:100:GLN:H | 1:A:99:THR:HA | 15 | 0.13 |
| (1,5) | 1:A:88:HIS:H | 1:A:89:ALA:H | 1 | 0.13 |
| (1,416) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 1 | 0.13 |
| (1,416) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 1 | 0.13 |
| (1,416) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 1 | 0.13 |
| (1,416) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 2 | 0.13 |
| (1,416) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 2 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,416) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 2 | 0.13 |
| (1,398) | 1:A:44:SER:H | 1:A:43:GLU:HG2 | 15 | 0.13 |
| (1,350) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HB3 | 3 | 0.13 |
| (1,347) | 1:A:17:SER:H | 1:A:17:SER:HB2 | 11 | 0.13 |
| (1,346) | 1:A:17:SER:H | 1:A:17:SER:HB3 | 4 | 0.13 |
| (1,242) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:42:PRO:HA | 15 | 0.13 |
| (1,24) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:14:ASN:H | 4 | 0.13 |
| (1,24) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:14:ASN:H | 12 | 0.13 |
| (1,24) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:14:ASN:H | 16 | 0.13 |
| (1,23) | 1:A:44:SER:H | 1:A:45:ILE:H | 4 | 0.13 |
| (1,23) | 1:A:44:SER:H | 1:A:45:ILE:H | 7 | 0.13 |
| (1,224) | 1:A:35:THR:H | 1:A:35:THR:HB | 13 | 0.13 |
| (1,219) | 1:A:7:THR:H | 1:A:6:ALA:HB1 | 16 | 0.13 |
| (1,219) | 1:A:7:THR:H | 1:A:6:ALA:HB2 | 16 | 0.13 |
| (1,219) | 1:A:7:THR:H | 1:A:6:ALA:HB3 | 16 | 0.13 |
| (1,20) | 1:A:35:THR:H | 1:A:34:ALA:H | 1 | 0.13 |
| (1,20) | 1:A:35:THR:H | 1:A:34:ALA:H | 7 | 0.13 |
| (1,187) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HD11 | 4 | 0.13 |
| (1,187) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HD12 | 4 | 0.13 |
| (1,187) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HD13 | 4 | 0.13 |
| (1,185) | 1:A:16:LEU:H | 1:A:16:LEU:HD21 | 6 | 0.13 |
| (1,185) | 1:A:16:LEU:H | 1:A:16:LEU:HD22 | 6 | 0.13 |
| (1,185) | 1:A:16:LEU:H | 1:A:16:LEU:HD23 | 6 | 0.13 |
| (1,17) | 1:A:100:GLN:H | 1:A:99:THR:H | 13 | 0.13 |
| (1,159) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HA | 2 | 0.13 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG21 | 2 | 0.13 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG22 | 2 | 0.13 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG23 | 2 | 0.13 |
| (1,134) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:25:LEU:HB2 | 15 | 0.13 |
| (1,125) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:21:GLN:HB2 | 4 | 0.13 |
| (1,125) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:21:GLN:HB2 | 12 | 0.13 |
| (1,110) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:52:LYS:HG3 | 15 | 0.13 |
| (1,103) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:71:ASN:HB2 | 16 | 0.13 |
| (2,997) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HG | 12 | 0.12 |
| (2,997) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HG | 12 | 0.12 |
| (2,997) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HG | 12 | 0.12 |
| (2,997) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HG | 14 | 0.12 |
| (2,997) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HG | 14 | 0.12 |
| (2,997) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HG | 14 | 0.12 |
| (2,959) | 1:A:47:PRO:HD3 | 1:A:46:SER:HB3 | 13 | 0.12 |
| (2,930) | 1:A:45:ILE:HB | 1:A:45:ILE:HG13 | 2 | 0.12 |
| (2,930) | 1:A:45:ILE:HB | 1:A:45:ILE:HG13 | 6 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,927) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:56:ILE:HA | 4 | 0.12 |
| (2,927) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:56:ILE:HA | 4 | 0.12 |
| (2,927) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:56:ILE:HA | 4 | 0.12 |
| (2,927) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:56:ILE:HA | 9 | 0.12 |
| (2,927) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:56:ILE:HA | 9 | 0.12 |
| (2,927) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:56:ILE:HA | 9 | 0.12 |
| (2,889) | 1:A:42:PRO:HD2 | 1:A:41:THR:HA | 11 | 0.12 |
| (2,889) | 1:A:42:PRO:HD2 | 1:A:41:THR:HA | 16 | 0.12 |
| (2,874) | 1:A:42:PRO:HB3 | 1:A:42:PRO:HA | 10 | 0.12 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:33:THR:HG21 | 2 | 0.12 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:33:THR:HG22 | 2 | 0.12 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD11 | 1:A:33:THR:HG23 | 2 | 0.12 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:33:THR:HG21 | 2 | 0.12 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:33:THR:HG22 | 2 | 0.12 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD12 | 1:A:33:THR:HG23 | 2 | 0.12 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:33:THR:HG21 | 2 | 0.12 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:33:THR:HG22 | 2 | 0.12 |
| (2,848) | 1:A:37:LEU:HD13 | 1:A:33:THR:HG23 | 2 | 0.12 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG21 | 12 | 0.12 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG22 | 12 | 0.12 |
| (2,813) | 1:A:36:VAL:HA | 1:A:35:THR:HG23 | 12 | 0.12 |
| (2,794) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:36:VAL:H | 2 | 0.12 |
| (2,794) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:36:VAL:H | 2 | 0.12 |
| (2,794) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:36:VAL:H | 2 | 0.12 |
| (2,794) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:36:VAL:H | 5 | 0.12 |
| (2,794) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:36:VAL:H | 5 | 0.12 |
| (2,794) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:36:VAL:H | 5 | 0.12 |
| (2,786) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:34:ALA:HB1 | 6 | 0.12 |
| (2,786) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:34:ALA:HB2 | 6 | 0.12 |
| (2,786) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:34:ALA:HB3 | 6 | 0.12 |
| (2,786) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:34:ALA:HB1 | 12 | 0.12 |
| (2,786) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:34:ALA:HB2 | 12 | 0.12 |
| (2,786) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:34:ALA:HB3 | 12 | 0.12 |
| (2,784) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:37:LEU:H | 3 | 0.12 |
| (2,784) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:37:LEU:H | 9 | 0.12 |
| (2,765) | 1:A:61:ALA:HA | 1:A:56:ILE:HB | 1 | 0.12 |
| (2,765) | 1:A:61:ALA:HA | 1:A:56:ILE:HB | 7 | 0.12 |
| (2,763) | 1:A:61:ALA:HA | 1:A:64:LEU:HA | 12 | 0.12 |
| (2,76) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HE1 | 15 | 0.12 |
| (2,76) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:51:PHE:HE2 | 15 | 0.12 |
| (2,76) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HE1 | 15 | 0.12 |
| (2,76) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:51:PHE:HE2 | 15 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,76) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HE1 | 15 | 0.12 |
| (2,76) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:51:PHE:HE2 | 15 | 0.12 |
| (2,753) | 1:A:75:ASP:HB2 | 1:A:75:ASP:HA | 9 | 0.12 |
| (2,735) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:85:PRO:HB2 | 8 | 0.12 |
| (2,735) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:85:PRO:HB2 | 8 | 0.12 |
| (2,735) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:85:PRO:HB2 | 8 | 0.12 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG11 | 3 | 0.12 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG12 | 3 | 0.12 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG13 | 3 | 0.12 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG11 | 3 | 0.12 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG12 | 3 | 0.12 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG13 | 3 | 0.12 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG11 | 3 | 0.12 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG12 | 3 | 0.12 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG13 | 3 | 0.12 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG11 | 4 | 0.12 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG12 | 4 | 0.12 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG13 | 4 | 0.12 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG11 | 4 | 0.12 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG12 | 4 | 0.12 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG13 | 4 | 0.12 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG11 | 4 | 0.12 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG12 | 4 | 0.12 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG13 | 4 | 0.12 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG11 | 8 | 0.12 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG12 | 8 | 0.12 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG13 | 8 | 0.12 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG11 | 8 | 0.12 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG12 | 8 | 0.12 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG13 | 8 | 0.12 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG11 | 8 | 0.12 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG12 | 8 | 0.12 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG13 | 8 | 0.12 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB1 | 5 | 0.12 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB2 | 5 | 0.12 |
| (2,661) | 1:A:29:VAL:HA | 1:A:32:ALA:HB3 | 5 | 0.12 |
| (2,651) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:H | 15 | 0.12 |
| (2,651) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:H | 15 | 0.12 |
| (2,651) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:H | 15 | 0.12 |
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG21 | 15 | 0.12 |
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG22 | 15 | 0.12 |
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG23 | 15 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,565) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:71:ASN:HB2 | 5 | 0.12 |
| (2,565) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:71:ASN:HB2 | 5 | 0.12 |
| (2,565) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:71:ASN:HB2 | 5 | 0.12 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:64:LEU:HD11 | 14 | 0.12 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:64:LEU:HD12 | 14 | 0.12 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE1 | 1:A:64:LEU:HD13 | 14 | 0.12 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:64:LEU:HD11 | 14 | 0.12 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:64:LEU:HD12 | 14 | 0.12 |
| (2,56) | 1:A:51:PHE:HE2 | 1:A:64:LEU:HD13 | 14 | 0.12 |
| (2,52) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:85:PRO:HA | 14 | 0.12 |
| (2,52) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:85:PRO:HA | 14 | 0.12 |
| (2,51) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HB3 | 3 | 0.12 |
| (2,51) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HB3 | 3 | 0.12 |
| (2,51) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HB3 | 4 | 0.12 |
| (2,51) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HB3 | 4 | 0.12 |
| (2,51) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HB3 | 11 | 0.12 |
| (2,51) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HB3 | 11 | 0.12 |
| (2,51) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HB3 | 13 | 0.12 |
| (2,51) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HB3 | 13 | 0.12 |
| (2,496) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:23:GLN:HG2 | 2 | 0.12 |
| (2,494) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:23:GLN:H | 15 | 0.12 |
| (2,486) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:22:GLN:HB2 | 6 | 0.12 |
| (2,481) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:GLN:HA | 4 | 0.12 |
| (2,473) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HD11 | 8 | 0.12 |
| (2,473) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HD12 | 8 | 0.12 |
| (2,473) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:LEU:HD13 | 8 | 0.12 |
| (2,464) | 1:A:20:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HA | 5 | 0.12 |
| (2,404) | 1:A:23:GLN:HG2 | 1:A:24:THR:H | 5 | 0.12 |
| (2,404) | 1:A:23:GLN:HG2 | 1:A:24:THR:H | 10 | 0.12 |
| (2,404) | 1:A:23:GLN:HG2 | 1:A:24:THR:H | 15 | 0.12 |
| (2,389) | 1:A:19:GLN:HA | 1:A:19:GLN:H | 15 | 0.12 |
| (2,362) | 1:A:17:SER:HA | 1:A:17:SER:H | 3 | 0.12 |
| (2,362) | 1:A:17:SER:HA | 1:A:17:SER:H | 4 | 0.12 |
| (2,362) | 1:A:17:SER:HA | 1:A:17:SER:H | 5 | 0.12 |
| (2,362) | 1:A:17:SER:HA | 1:A:17:SER:H | 10 | 0.12 |
| (2,362) | 1:A:17:SER:HA | 1:A:17:SER:H | 12 | 0.12 |
| (2,361) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:17:SER:H | 12 | 0.12 |
| (2,361) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:17:SER:H | 12 | 0.12 |
| (2,361) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:17:SER:H | 12 | 0.12 |
| (2,351) | 1:A:16:LEU:HA | 1:A:16:LEU:HD21 | 11 | 0.12 |
| (2,351) | 1:A:16:LEU:HA | 1:A:16:LEU:HD22 | 11 | 0.12 |
| (2,351) | 1:A:16:LEU:HA | 1:A:16:LEU:HD23 | 11 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,34) | 1:A:90:LEU:HB3 | 1:A:51:PHE:HZ | 5 | 0.12 |
| (2,314) | 1:A:85:PRO:HD2 | 1:A:84:HIS:H | 5 | 0.12 |
| (2,314) | 1:A:85:PRO:HD2 | 1:A:84:HIS:H | 15 | 0.12 |
| (2,296) | 1:A:68:LEU:HB2 | 1:A:68:LEU:H | 9 | 0.12 |
| (2,269) | 1:A:12:ARG:HG2 | 1:A:13:LEU:H | 7 | 0.12 |
| (2,267) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:13:LEU:H | 5 | 0.12 |
| (2,250) | 1:A:12:ARG:HG2 | 1:A:12:ARG:HB3 | 3 | 0.12 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:50:ALA:H | 4 | 0.12 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:50:ALA:H | 4 | 0.12 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:50:ALA:H | 4 | 0.12 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:50:ALA:H | 6 | 0.12 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:50:ALA:H | 6 | 0.12 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:50:ALA:H | 6 | 0.12 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:50:ALA:H | 12 | 0.12 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:50:ALA:H | 12 | 0.12 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:50:ALA:H | 12 | 0.12 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:50:ALA:H | 13 | 0.12 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:50:ALA:H | 13 | 0.12 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:50:ALA:H | 13 | 0.12 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:50:ALA:H | 14 | 0.12 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:50:ALA:H | 14 | 0.12 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:50:ALA:H | 14 | 0.12 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:50:ALA:H | 15 | 0.12 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:50:ALA:H | 15 | 0.12 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:50:ALA:H | 15 | 0.12 |
| (2,219) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD21 | 5 | 0.12 |
| (2,219) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD22 | 5 | 0.12 |
| (2,219) | 1:A:10:ALA:HA | 1:A:9:LEU:HD23 | 5 | 0.12 |
| (2,194) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HG2 | 13 | 0.12 |
| (2,194) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HG2 | 16 | 0.12 |
| (2,1914) | 1:A:91:THR:HB | 1:A:92:GLN:H | 3 | 0.12 |
| (2,1914) | 1:A:91:THR:HB | 1:A:92:GLN:H | 11 | 0.12 |
| (2,1907) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:56:ILE:HB | 2 | 0.12 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:61:ALA:HB1 | 13 | 0.12 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:61:ALA:HB2 | 13 | 0.12 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:61:ALA:HB3 | 13 | 0.12 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE2 | 1:A:61:ALA:HB1 | 13 | 0.12 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE2 | 1:A:61:ALA:HB2 | 13 | 0.12 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE2 | 1:A:61:ALA:HB3 | 13 | 0.12 |
| (2,1887) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:14:ASN:H | 4 | 0.12 |
| (2,1887) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:14:ASN:H | 12 | 0.12 |
| (2,1887) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:14:ASN:H | 15 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,1836) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:13:LEU:H | 8 | 0.12 |
| (2,1836) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:13:LEU:H | 8 | 0.12 |
| (2,1836) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:13:LEU:H | 8 | 0.12 |
| (2,1806) | 1:A:100:GLN:HG3 | 1:A:97:ARG:HA | 2 | 0.12 |
| (2,1788) | 1:A:99:THR:HB | 1:A:99:THR:H | 3 | 0.12 |
| (2,1769) | 1:A:97:ARG:HA | 1:A:97:ARG:HG3 | 6 | 0.12 |
| (2,1769) | 1:A:97:ARG:HA | 1:A:97:ARG:HG3 | 8 | 0.12 |
| (2,1755) | 1:A:92:GLN:HA | 1:A:95:HIS:HB3 | 5 | 0.12 |
| (2,1741) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HB2 | 14 | 0.12 |
| (2,1720) | 1:A:92:GLN:HG3 | 1:A:89:ALA:HA | 16 | 0.12 |
| (2,1710) | 1:A:92:GLN:HB2 | 1:A:89:ALA:HA | 13 | 0.12 |
| (2,1689) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:91:THR:H | 8 | 0.12 |
| (2,1689) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:91:THR:H | 9 | 0.12 |
| (2,1689) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:91:THR:H | 14 | 0.12 |
| (2,1679) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HB3 | 16 | 0.12 |
| (2,1679) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:HB3 | 16 | 0.12 |
| (2,1679) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:HB3 | 16 | 0.12 |
| (2,1663) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:84:HIS:HB3 | 1 | 0.12 |
| (2,1630) | 1:A:87:PRO:HD3 | 1:A:51:PHE:H | 15 | 0.12 |
| (2,1566) | 1:A:83:ASP:HB2 | 1:A:83:ASP:H | 3 | 0.12 |
| (2,1557) | 1:A:82:PHE:HA | 1:A:82:PHE:HB3 | 11 | 0.12 |
| (2,1543) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:51:PHE:HD1 | 9 | 0.12 |
| (2,1543) | 1:A:81:ILE:HA | 1:A:51:PHE:HD2 | 9 | 0.12 |
| (2,1500) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:74:LEU:H | 4 | 0.12 |
| (2,1500) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:74:LEU:H | 4 | 0.12 |
| (2,1500) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:74:LEU:H | 4 | 0.12 |
| (2,1490) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:79:THR:HB | 4 | 0.12 |
| (2,1439) | 1:A:72:THR:HB | 1:A:74:LEU:HB2 | 7 | 0.12 |
| (2,1439) | 1:A:72:THR:HB | 1:A:74:LEU:HB2 | 12 | 0.12 |
| (2,1409) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:37:LEU:H | 7 | 0.12 |
| (2,1409) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:37:LEU:H | 7 | 0.12 |
| (2,1409) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:37:LEU:H | 7 | 0.12 |
| (2,1409) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:37:LEU:H | 11 | 0.12 |
| (2,1409) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:37:LEU:H | 11 | 0.12 |
| (2,1409) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:37:LEU:H | 11 | 0.12 |
| (2,1404) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:H | 3 | 0.12 |
| (2,1404) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:H | 3 | 0.12 |
| (2,1404) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:H | 3 | 0.12 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:45:ILE:HA | 4 | 0.12 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:45:ILE:HA | 4 | 0.12 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:45:ILE:HA | 4 | 0.12 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD11 | 1:A:45:ILE:HA | 5 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD12 | 1:A:45:ILE:HA | 5 | 0.12 |
| (2,1400) | 1:A:45:ILE:HD13 | 1:A:45:ILE:HA | 5 | 0.12 |
| (2,1379) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:97:ARG:HB2 | 13 | 0.12 |
| (2,1379) | 1:A:97:ARG:HG3 | 1:A:97:ARG:HB2 | 15 | 0.12 |
| (2,1367) | 1:A:97:ARG:HB2 | 1:A:98:LEU:H | 7 | 0.12 |
| (2,133) | 1:A:35:THR:HG21 | 1:A:36:VAL:H | 14 | 0.12 |
| (2,133) | 1:A:35:THR:HG22 | 1:A:36:VAL:H | 14 | 0.12 |
| (2,133) | 1:A:35:THR:HG23 | 1:A:36:VAL:H | 14 | 0.12 |
| (2,1320) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:68:LEU:HB2 | 7 | 0.12 |
| (2,1320) | 1:A:68:LEU:HG | 1:A:68:LEU:HB2 | 12 | 0.12 |
| (2,1303) | 1:A:66:ASN:HB3 | 1:A:66:ASN:HD21 | 3 | 0.12 |
| (2,1281) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:65:ARG:HA | 1 | 0.12 |
| (2,1274) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:65:ARG:HG2 | 1 | 0.12 |
| (2,1270) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:68:LEU:HB3 | 15 | 0.12 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:7:THR:HA | 1 | 0.12 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:7:THR:HA | 1 | 0.12 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:7:THR:HA | 1 | 0.12 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:7:THR:HA | 2 | 0.12 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:7:THR:HA | 2 | 0.12 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:7:THR:HA | 2 | 0.12 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:7:THR:HA | 4 | 0.12 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:7:THR:HA | 4 | 0.12 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:7:THR:HA | 4 | 0.12 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:7:THR:HA | 6 | 0.12 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:7:THR:HA | 6 | 0.12 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:7:THR:HA | 6 | 0.12 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:7:THR:HA | 7 | 0.12 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:7:THR:HA | 7 | 0.12 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:7:THR:HA | 7 | 0.12 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:7:THR:HA | 10 | 0.12 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:7:THR:HA | 10 | 0.12 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:7:THR:HA | 10 | 0.12 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:7:THR:HA | 11 | 0.12 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:7:THR:HA | 11 | 0.12 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:7:THR:HA | 11 | 0.12 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:7:THR:HA | 13 | 0.12 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:7:THR:HA | 13 | 0.12 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:7:THR:HA | 13 | 0.12 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:7:THR:HA | 14 | 0.12 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:7:THR:HA | 14 | 0.12 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:7:THR:HA | 14 | 0.12 |
| (2,1248) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HB3 | 3 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1248) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HB3 | 3 | 0.12 |
| (2,1248) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HB3 | 3 | 0.12 |
| (2,1234) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:65:ARG:HA | 2 | 0.12 |
| (2,1234) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:65:ARG:HA | 6 | 0.12 |
| (2,1234) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:65:ARG:HA | 9 | 0.12 |
| (2,1234) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:65:ARG:HA | 14 | 0.12 |
| (2,1231) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:64:LEU:H | 10 | 0.12 |
| (2,1231) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:64:LEU:H | 12 | 0.12 |
| (2,1231) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:64:LEU:H | 15 | 0.12 |
| (2,1219) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:60:THR:HG21 | 5 | 0.12 |
| (2,1219) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:60:THR:HG22 | 5 | 0.12 |
| (2,1219) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:60:THR:HG23 | 5 | 0.12 |
| (2,1219) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:60:THR:HG21 | 9 | 0.12 |
| (2,1219) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:60:THR:HG22 | 9 | 0.12 |
| (2,1219) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:60:THR:HG23 | 9 | 0.12 |
| (2,1188) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:63:GLU:H | 5 | 0.12 |
| (2,1188) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:63:GLU:H | 12 | 0.12 |
| (2,1157) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:60:THR:HB | 16 | 0.12 |
| (2,1157) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:60:THR:HB | 16 | 0.12 |
| (2,1157) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:60:THR:HB | 16 | 0.12 |
| (2,1154) | 1:A:60:THR:HB | 1:A:63:GLU:H | 12 | 0.12 |
| (2,1135) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:58:SER:HA | 10 | 0.12 |
| (2,1135) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:58:SER:HA | 15 | 0.12 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:56:ILE:HB | 4 | 0.12 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:56:ILE:HB | 4 | 0.12 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:56:ILE:HB | 4 | 0.12 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:56:ILE:HB | 5 | 0.12 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:56:ILE:HB | 5 | 0.12 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:56:ILE:HB | 5 | 0.12 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:56:ILE:HB | 6 | 0.12 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:56:ILE:HB | 6 | 0.12 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:56:ILE:HB | 6 | 0.12 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:56:ILE:HB | 10 | 0.12 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:56:ILE:HB | 10 | 0.12 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:56:ILE:HB | 10 | 0.12 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:56:ILE:HB | 12 | 0.12 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:56:ILE:HB | 12 | 0.12 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:56:ILE:HB | 12 | 0.12 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:56:ILE:HB | 14 | 0.12 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:56:ILE:HB | 14 | 0.12 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:56:ILE:HB | 14 | 0.12 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:56:ILE:HB | 16 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:56:ILE:HB | 16 | 0.12 |
| (2,1117) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:56:ILE:HB | 16 | 0.12 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD11 | 5 | 0.12 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD12 | 5 | 0.12 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD13 | 5 | 0.12 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD11 | 5 | 0.12 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD12 | 5 | 0.12 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD13 | 5 | 0.12 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD11 | 5 | 0.12 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD12 | 5 | 0.12 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD13 | 5 | 0.12 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD11 | 16 | 0.12 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD12 | 16 | 0.12 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG21 | 1:A:64:LEU:HD13 | 16 | 0.12 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD11 | 16 | 0.12 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD12 | 16 | 0.12 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG22 | 1:A:64:LEU:HD13 | 16 | 0.12 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD11 | 16 | 0.12 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD12 | 16 | 0.12 |
| (2,1115) | 1:A:56:ILE:HG23 | 1:A:64:LEU:HD13 | 16 | 0.12 |
| (2,1096) | 1:A:56:ILE:HG12 | 1:A:64:LEU:HD11 | 1 | 0.12 |
| (2,1096) | 1:A:56:ILE:HG12 | 1:A:64:LEU:HD12 | 1 | 0.12 |
| (2,1096) | 1:A:56:ILE:HG12 | 1:A:64:LEU:HD13 | 1 | 0.12 |
| (2,1044) | 1:A:52:LYS:HB2 | 1:A:52:LYS:HE2 | 4 | 0.12 |
| (2,1029) | 1:A:51:PHE:HB3 | 1:A:52:LYS:HG2 | 12 | 0.12 |
| (2,1004) | 1:A:57:ASP:HB3 | 1:A:57:ASP:HA | 1 | 0.12 |
| (1,93) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:68:LEU:HA | 10 | 0.12 |
| (1,86) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:28:LEU:HD11 | 16 | 0.12 |
| (1,86) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:28:LEU:HD12 | 16 | 0.12 |
| (1,86) | 1:A:71:ASN:HD21 | 1:A:28:LEU:HD13 | 16 | 0.12 |
| (1,601) | 1:A:33:THR:H | 1:A:34:ALA:H | 8 | 0.12 |
| (1,600) | 1:A:33:THR:H | 1:A:30:ALA:HA | 13 | 0.12 |
| (1,588) | 1:A:96:THR:H | 1:A:96:THR:HB | 3 | 0.12 |
| (1,588) | 1:A:96:THR:H | 1:A:96:THR:HB | 9 | 0.12 |
| (1,588) | 1:A:96:THR:H | 1:A:96:THR:HB | 15 | 0.12 |
| (1,571) | 1:A:24:THR:H | 1:A:23:GLN:HG2 | 5 | 0.12 |
| (1,571) | 1:A:24:THR:H | 1:A:23:GLN:HG2 | 10 | 0.12 |
| (1,571) | 1:A:24:THR:H | 1:A:23:GLN:HG2 | 15 | 0.12 |
| (1,529) | 1:A:65:ARG:H | 1:A:64:LEU:HB3 | 2 | 0.12 |
| (1,529) | 1:A:65:ARG:H | 1:A:64:LEU:HB3 | 4 | 0.12 |
| (1,529) | 1:A:65:ARG:H | 1:A:64:LEU:HB3 | 9 | 0.12 |
| (1,529) | 1:A:65:ARG:H | 1:A:64:LEU:HB3 | 13 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,52) | 1:A:15:GLY:H | 1:A:15:GLY:HA2 | 8 | 0.12 |
| (1,52) | 1:A:15:GLY:H | 1:A:15:GLY:HA2 | 9 | 0.12 |
| (1,52) | 1:A:15:GLY:H | 1:A:15:GLY:HA2 | 10 | 0.12 |
| (1,52) | 1:A:15:GLY:H | 1:A:15:GLY:HA2 | 13 | 0.12 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG21 | 14 | 0.12 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG22 | 14 | 0.12 |
| (1,510) | 1:A:49:THR:H | 1:A:49:THR:HG23 | 14 | 0.12 |
| (1,503) | 1:A:100:GLN:H | 1:A:99:THR:HA | 1 | 0.12 |
| (1,503) | 1:A:100:GLN:H | 1:A:99:THR:HA | 13 | 0.12 |
| (1,503) | 1:A:100:GLN:H | 1:A:99:THR:HA | 14 | 0.12 |
| (1,503) | 1:A:100:GLN:H | 1:A:99:THR:HA | 16 | 0.12 |
| (1,5) | 1:A:88:HIS:H | 1:A:89:ALA:H | 7 | 0.12 |
| (1,5) | 1:A:88:HIS:H | 1:A:89:ALA:H | 16 | 0.12 |
| (1,472) | 1:A:8:ASP:H | 1:A:8:ASP:HB2 | 5 | 0.12 |
| (1,406) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:47:PRO:HA | 4 | 0.12 |
| (1,406) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:47:PRO:HA | 12 | 0.12 |
| (1,406) | 1:A:48:ALA:H | 1:A:47:PRO:HA | 15 | 0.12 |
| (1,347) | 1:A:17:SER:H | 1:A:17:SER:HB2 | 6 | 0.12 |
| (1,292) | 1:A:37:LEU:H | 1:A:36:VAL:HG11 | 4 | 0.12 |
| (1,292) | 1:A:37:LEU:H | 1:A:36:VAL:HG12 | 4 | 0.12 |
| (1,292) | 1:A:37:LEU:H | 1:A:36:VAL:HG13 | 4 | 0.12 |
| (1,292) | 1:A:37:LEU:H | 1:A:36:VAL:HG11 | 5 | 0.12 |
| (1,292) | 1:A:37:LEU:H | 1:A:36:VAL:HG12 | 5 | 0.12 |
| (1,292) | 1:A:37:LEU:H | 1:A:36:VAL:HG13 | 5 | 0.12 |
| (1,29) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:61:ALA:H | 8 | 0.12 |
| (1,273) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:78:PRO:HA | 7 | 0.12 |
| (1,242) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:42:PRO:HA | 11 | 0.12 |
| (1,24) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:14:ASN:H | 6 | 0.12 |
| (1,24) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:14:ASN:H | 7 | 0.12 |
| (1,239) | 1:A:45:ILE:H | 1:A:45:ILE:HG13 | 7 | 0.12 |
| (1,224) | 1:A:35:THR:H | 1:A:35:THR:HB | 3 | 0.12 |
| (1,224) | 1:A:35:THR:H | 1:A:35:THR:HB | 4 | 0.12 |
| (1,224) | 1:A:35:THR:H | 1:A:35:THR:HB | 7 | 0.12 |
| (1,224) | 1:A:35:THR:H | 1:A:35:THR:HB | 15 | 0.12 |
| (1,22) | 1:A:43:GLU:H | 1:A:44:SER:H | 16 | 0.12 |
| (1,20) | 1:A:35:THR:H | 1:A:34:ALA:H | 11 | 0.12 |
| (1,19) | 1:A:35:THR:H | 1:A:36:VAL:H | 10 | 0.12 |
| (1,187) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HD11 | 11 | 0.12 |
| (1,187) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HD12 | 11 | 0.12 |
| (1,187) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HD13 | 11 | 0.12 |
| (1,159) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HA | 4 | 0.12 |
| (1,159) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HA | 6 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,159) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HA | 12 | 0.12 |
| (1,159) | 1:A:5:ALA:H | 1:A:5:ALA:HA | 15 | 0.12 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG21 | 3 | 0.12 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG22 | 3 | 0.12 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG23 | 3 | 0.12 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG21 | 5 | 0.12 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG22 | 5 | 0.12 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG23 | 5 | 0.12 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG21 | 7 | 0.12 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG22 | 7 | 0.12 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG23 | 7 | 0.12 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG21 | 14 | 0.12 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG22 | 14 | 0.12 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG23 | 14 | 0.12 |
| (1,130) | 1:A:69:THR:H | 1:A:69:THR:HB | 13 | 0.12 |
| (1,125) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:21:GLN:HB2 | 14 | 0.12 |
| (1,110) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:52:LYS:HG3 | 12 | 0.12 |
| (1,110) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:52:LYS:HG3 | 14 | 0.12 |
| (1,103) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:71:ASN:HB2 | 8 | 0.12 |
| (1,103) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:71:ASN:HB2 | 9 | 0.12 |
| (1,103) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:71:ASN:HB2 | 15 | 0.12 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD11 | 1 | 0.11 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD12 | 1 | 0.11 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HD13 | 1 | 0.11 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD11 | 1 | 0.11 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD12 | 1 | 0.11 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HD13 | 1 | 0.11 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD11 | 1 | 0.11 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD12 | 1 | 0.11 |
| (2,999) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HD13 | 1 | 0.11 |
| (2,997) | 1:A:49:THR:HG21 | 1:A:54:LEU:HG | 3 | 0.11 |
| (2,997) | 1:A:49:THR:HG22 | 1:A:54:LEU:HG | 3 | 0.11 |
| (2,997) | 1:A:49:THR:HG23 | 1:A:54:LEU:HG | 3 | 0.11 |
| (2,980) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:54:LEU:HG | 4 | 0.11 |
| (2,980) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:54:LEU:HG | 8 | 0.11 |
| (2,977) | 1:A:49:THR:HB | 1:A:49:THR:H | 9 | 0.11 |
| (2,960) | 1:A:47:PRO:HD2 | 1:A:46:SER:HB3 | 3 | 0.11 |
| (2,96) | 1:A:4:SER:HB3 | 1:A:7:THR:HB | 11 | 0.11 |
| (2,913) | 1:A:43:GLU:HG2 | 1:A:42:PRO:HA | 13 | 0.11 |
| (2,889) | 1:A:42:PRO:HD2 | 1:A:41:THR:HA | 12 | 0.11 |
| (2,872) | 1:A:42:PRO:HA | 1:A:30:ALA:HB1 | 9 | 0.11 |
| (2,872) | 1:A:42:PRO:HA | 1:A:30:ALA:HB2 | 9 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,872) | 1:A:42:PRO:HA | 1:A:30:ALA:HB3 | 9 | 0.11 |
| (2,872) | 1:A:42:PRO:HA | 1:A:30:ALA:HB1 | 14 | 0.11 |
| (2,872) | 1:A:42:PRO:HA | 1:A:30:ALA:HB2 | 14 | 0.11 |
| (2,872) | 1:A:42:PRO:HA | 1:A:30:ALA:HB3 | 14 | 0.11 |
| (2,857) | 1:A:37:LEU:HD21 | 1:A:54:LEU:H | 3 | 0.11 |
| (2,857) | 1:A:37:LEU:HD22 | 1:A:54:LEU:H | 3 | 0.11 |
| (2,857) | 1:A:37:LEU:HD23 | 1:A:54:LEU:H | 3 | 0.11 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:64:LEU:H | 12 | 0.11 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:64:LEU:H | 12 | 0.11 |
| (2,827) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:64:LEU:H | 12 | 0.11 |
| (2,794) | 1:A:36:VAL:HG11 | 1:A:36:VAL:H | 13 | 0.11 |
| (2,794) | 1:A:36:VAL:HG12 | 1:A:36:VAL:H | 13 | 0.11 |
| (2,794) | 1:A:36:VAL:HG13 | 1:A:36:VAL:H | 13 | 0.11 |
| (2,786) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:34:ALA:HB1 | 4 | 0.11 |
| (2,786) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:34:ALA:HB2 | 4 | 0.11 |
| (2,786) | 1:A:35:THR:HB | 1:A:34:ALA:HB3 | 4 | 0.11 |
| (2,765) | 1:A:61:ALA:HA | 1:A:56:ILE:HB | 15 | 0.11 |
| (2,736) | 1:A:26:ALA:HA | 1:A:91:THR:HG21 | 5 | 0.11 |
| (2,736) | 1:A:26:ALA:HA | 1:A:91:THR:HG22 | 5 | 0.11 |
| (2,736) | 1:A:26:ALA:HA | 1:A:91:THR:HG23 | 5 | 0.11 |
| (2,731) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:42:PRO:HG2 | 16 | 0.11 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG11 | 9 | 0.11 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG12 | 9 | 0.11 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG13 | 9 | 0.11 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG11 | 9 | 0.11 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG12 | 9 | 0.11 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG13 | 9 | 0.11 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG11 | 9 | 0.11 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG12 | 9 | 0.11 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG13 | 9 | 0.11 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG11 | 15 | 0.11 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG12 | 15 | 0.11 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG13 | 15 | 0.11 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG11 | 15 | 0.11 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG12 | 15 | 0.11 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG13 | 15 | 0.11 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG11 | 15 | 0.11 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG12 | 15 | 0.11 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG13 | 15 | 0.11 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG11 | 16 | 0.11 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG12 | 16 | 0.11 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB1 | 1:A:29:VAL:HG13 | 16 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG11 | 16 | 0.11 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG12 | 16 | 0.11 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB2 | 1:A:29:VAL:HG13 | 16 | 0.11 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG11 | 16 | 0.11 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG12 | 16 | 0.11 |
| (2,713) | 1:A:30:ALA:HB3 | 1:A:29:VAL:HG13 | 16 | 0.11 |
| (2,702) | 1:A:83:ASP:HB2 | 1:A:83:ASP:HA | 3 | 0.11 |
| (2,702) | 1:A:83:ASP:HB2 | 1:A:83:ASP:HA | 15 | 0.11 |
| (2,651) | 1:A:28:LEU:HD21 | 1:A:29:VAL:H | 3 | 0.11 |
| (2,651) | 1:A:28:LEU:HD22 | 1:A:29:VAL:H | 3 | 0.11 |
| (2,651) | 1:A:28:LEU:HD23 | 1:A:29:VAL:H | 3 | 0.11 |
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG21 | 13 | 0.11 |
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG22 | 13 | 0.11 |
| (2,575) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:THR:HG23 | 13 | 0.11 |
| (2,565) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:71:ASN:HB2 | 7 | 0.11 |
| (2,565) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:71:ASN:HB2 | 7 | 0.11 |
| (2,565) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:71:ASN:HB2 | 7 | 0.11 |
| (2,565) | 1:A:28:LEU:HD11 | 1:A:71:ASN:HB2 | 14 | 0.11 |
| (2,565) | 1:A:28:LEU:HD12 | 1:A:71:ASN:HB2 | 14 | 0.11 |
| (2,565) | 1:A:28:LEU:HD13 | 1:A:71:ASN:HB2 | 14 | 0.11 |
| (2,548) | 1:A:25:LEU:HA | 1:A:24:THR:HB | 14 | 0.11 |
| (2,51) | 1:A:51:PHE:HD1 | 1:A:51:PHE:HB3 | 16 | 0.11 |
| (2,51) | 1:A:51:PHE:HD2 | 1:A:51:PHE:HB3 | 16 | 0.11 |
| (2,496) | 1:A:23:GLN:HA | 1:A:23:GLN:HG2 | 13 | 0.11 |
| (2,494) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:23:GLN:H | 8 | 0.11 |
| (2,490) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:22:GLN:HA | 3 | 0.11 |
| (2,487) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:95:HIS:HB2 | 1 | 0.11 |
| (2,483) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 6 | 0.11 |
| (2,428) | 1:A:24:THR:HG21 | 1:A:21:GLN:HA | 15 | 0.11 |
| (2,428) | 1:A:24:THR:HG22 | 1:A:21:GLN:HA | 15 | 0.11 |
| (2,428) | 1:A:24:THR:HG23 | 1:A:21:GLN:HA | 15 | 0.11 |
| (2,416) | 1:A:52:LYS:HD2 | 1:A:52:LYS:HE2 | 9 | 0.11 |
| (2,404) | 1:A:23:GLN:HG2 | 1:A:24:THR:H | 1 | 0.11 |
| (2,404) | 1:A:23:GLN:HG2 | 1:A:24:THR:H | 2 | 0.11 |
| (2,404) | 1:A:23:GLN:HG2 | 1:A:24:THR:H | 3 | 0.11 |
| (2,404) | 1:A:23:GLN:HG2 | 1:A:24:THR:H | 7 | 0.11 |
| (2,404) | 1:A:23:GLN:HG2 | 1:A:24:THR:H | 16 | 0.11 |
| (2,402) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:23:GLN:H | 7 | 0.11 |
| (2,362) | 1:A:17:SER:HA | 1:A:17:SER:H | 2 | 0.11 |
| (2,362) | 1:A:17:SER:HA | 1:A:17:SER:H | 8 | 0.11 |
| (2,362) | 1:A:17:SER:HA | 1:A:17:SER:H | 9 | 0.11 |
| (2,362) | 1:A:17:SER:HA | 1:A:17:SER:H | 11 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,362) | 1:A:17:SER:HA | 1:A:17:SER:H | 13 | 0.11 |
| (2,362) | 1:A:17:SER:HA | 1:A:17:SER:H | 14 | 0.11 |
| (2,362) | 1:A:17:SER:HA | 1:A:17:SER:H | 15 | 0.11 |
| (2,354) | 1:A:16:LEU:HG | 1:A:16:LEU:H | 14 | 0.11 |
| (2,314) | 1:A:85:PRO:HD2 | 1:A:84:HIS:H | 4 | 0.11 |
| (2,314) | 1:A:85:PRO:HD2 | 1:A:84:HIS:H | 6 | 0.11 |
| (2,296) | 1:A:68:LEU:HB2 | 1:A:68:LEU:H | 4 | 0.11 |
| (2,296) | 1:A:68:LEU:HB2 | 1:A:68:LEU:H | 8 | 0.11 |
| (2,279) | 1:A:12:ARG:HD3 | 1:A:12:ARG:HA | 1 | 0.11 |
| (2,269) | 1:A:12:ARG:HG2 | 1:A:13:LEU:H | 16 | 0.11 |
| (2,267) | 1:A:12:ARG:HG3 | 1:A:13:LEU:H | 14 | 0.11 |
| (2,250) | 1:A:12:ARG:HG2 | 1:A:12:ARG:HB3 | 4 | 0.11 |
| (2,250) | 1:A:12:ARG:HG2 | 1:A:12:ARG:HB3 | 6 | 0.11 |
| (2,250) | 1:A:12:ARG:HG2 | 1:A:12:ARG:HB3 | 7 | 0.11 |
| (2,250) | 1:A:12:ARG:HG2 | 1:A:12:ARG:HB3 | 14 | 0.11 |
| (2,24) | 1:A:39:HIS:HD2 | 1:A:39:HIS:HB2 | 3 | 0.11 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD11 | 2 | 0.11 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD12 | 2 | 0.11 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB1 | 1:A:98:LEU:HD13 | 2 | 0.11 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD11 | 2 | 0.11 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD12 | 2 | 0.11 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB2 | 1:A:98:LEU:HD13 | 2 | 0.11 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD11 | 2 | 0.11 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD12 | 2 | 0.11 |
| (2,239) | 1:A:10:ALA:HB3 | 1:A:98:LEU:HD13 | 2 | 0.11 |
| (2,237) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:85:PRO:HB3 | 13 | 0.11 |
| (2,237) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:85:PRO:HB3 | 13 | 0.11 |
| (2,237) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:85:PRO:HB3 | 13 | 0.11 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:50:ALA:H | 2 | 0.11 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:50:ALA:H | 2 | 0.11 |
| (2,224) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:50:ALA:H | 2 | 0.11 |
| (2,220) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:10:ALA:HA | 7 | 0.11 |
| (2,220) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:10:ALA:HA | 7 | 0.11 |
| (2,220) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:10:ALA:HA | 7 | 0.11 |
| (2,198) | 1:A:9:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD21 | 13 | 0.11 |
| (2,198) | 1:A:9:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD22 | 13 | 0.11 |
| (2,198) | 1:A:9:LEU:HB2 | 1:A:98:LEU:HD23 | 13 | 0.11 |
| (2,194) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HG2 | 6 | 0.11 |
| (2,194) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HG2 | 7 | 0.11 |
| (2,194) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HG2 | 14 | 0.11 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB1 | 13 | 0.11 |
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB2 | 13 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1916) | 1:A:46:SER:HA | 1:A:48:ALA:HB3 | 13 | 0.11 |
| (2,1907) | 1:A:55:GLY:HA2 | 1:A:56:ILE:HB | 3 | 0.11 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:61:ALA:HB1 | 8 | 0.11 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:61:ALA:HB2 | 8 | 0.11 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE1 | 1:A:61:ALA:HB3 | 8 | 0.11 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE2 | 1:A:61:ALA:HB1 | 8 | 0.11 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE2 | 1:A:61:ALA:HB2 | 8 | 0.11 |
| (2,1896) | 1:A:82:PHE:HE2 | 1:A:61:ALA:HB3 | 8 | 0.11 |
| (2,1850) | 1:A:70:HIS:HD2 | 1:A:70:HIS:HB3 | 8 | 0.11 |
| (2,1850) | 1:A:70:HIS:HD2 | 1:A:70:HIS:HB3 | 13 | 0.11 |
| (2,1849) | 1:A:84:HIS:HD2 | 1:A:84:HIS:H | 9 | 0.11 |
| (2,1849) | 1:A:84:HIS:HD2 | 1:A:84:HIS:H | 10 | 0.11 |
| (2,1835) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:95:HIS:HD2 | 11 | 0.11 |
| (2,1835) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:95:HIS:HD2 | 11 | 0.11 |
| (2,1835) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:95:HIS:HD2 | 11 | 0.11 |
| (2,1835) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:95:HIS:HD2 | 13 | 0.11 |
| (2,1835) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:95:HIS:HD2 | 13 | 0.11 |
| (2,1835) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:95:HIS:HD2 | 13 | 0.11 |
| (2,1813) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:81:ILE:HD11 | 9 | 0.11 |
| (2,1813) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:81:ILE:HD12 | 9 | 0.11 |
| (2,1813) | 1:A:81:ILE:HG12 | 1:A:81:ILE:HD13 | 9 | 0.11 |
| (2,1803) | 1:A:100:GLN:HB2 | 1:A:100:GLN:H | 12 | 0.11 |
| (2,1789) | 1:A:99:THR:HA | 1:A:98:LEU:H | 13 | 0.11 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD11 | 1 | 0.11 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD12 | 1 | 0.11 |
| (2,1781) | 1:A:98:LEU:HA | 1:A:98:LEU:HD13 | 1 | 0.11 |
| (2,1774) | 1:A:97:ARG:HD2 | 1:A:97:ARG:H | 10 | 0.11 |
| (2,1769) | 1:A:97:ARG:HA | 1:A:97:ARG:HG3 | 9 | 0.11 |
| (2,1753) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:95:HIS:HA | 7 | 0.11 |
| (2,1753) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:95:HIS:HA | 10 | 0.11 |
| (2,1753) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:95:HIS:HA | 11 | 0.11 |
| (2,1753) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:95:HIS:HA | 13 | 0.11 |
| (2,1753) | 1:A:95:HIS:HB2 | 1:A:95:HIS:HA | 16 | 0.11 |
| (2,1736) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:93:HIS:HD2 | 6 | 0.11 |
| (2,1710) | 1:A:92:GLN:HB2 | 1:A:89:ALA:HA | 8 | 0.11 |
| (2,1710) | 1:A:92:GLN:HB2 | 1:A:89:ALA:HA | 10 | 0.11 |
| (2,1701) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:28:LEU:HD21 | 13 | 0.11 |
| (2,1701) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:28:LEU:HD22 | 13 | 0.11 |
| (2,1701) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:28:LEU:HD23 | 13 | 0.11 |
| (2,1701) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:28:LEU:HD21 | 13 | 0.11 |
| (2,1701) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:28:LEU:HD22 | 13 | 0.11 |
| (2,1701) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:28:LEU:HD23 | 13 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1701) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:28:LEU:HD21 | 13 | 0.11 |
| (2,1701) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:28:LEU:HD22 | 13 | 0.11 |
| (2,1701) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:28:LEU:HD23 | 13 | 0.11 |
| (2,1701) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:28:LEU:HD21 | 16 | 0.11 |
| (2,1701) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:28:LEU:HD22 | 16 | 0.11 |
| (2,1701) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:28:LEU:HD23 | 16 | 0.11 |
| (2,1701) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:28:LEU:HD21 | 16 | 0.11 |
| (2,1701) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:28:LEU:HD22 | 16 | 0.11 |
| (2,1701) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:28:LEU:HD23 | 16 | 0.11 |
| (2,1701) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:28:LEU:HD21 | 16 | 0.11 |
| (2,1701) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:28:LEU:HD22 | 16 | 0.11 |
| (2,1701) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:28:LEU:HD23 | 16 | 0.11 |
| (2,1695) | 1:A:91:THR:HA | 1:A:90:LEU:HG | 5 | 0.11 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HE1 | 3 | 0.11 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:51:PHE:HE2 | 3 | 0.11 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HE1 | 3 | 0.11 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:51:PHE:HE2 | 3 | 0.11 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HE1 | 3 | 0.11 |
| (2,1682) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:51:PHE:HE2 | 3 | 0.11 |
| (2,1679) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HB3 | 2 | 0.11 |
| (2,1679) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:HB3 | 2 | 0.11 |
| (2,1679) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:HB3 | 2 | 0.11 |
| (2,1679) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HB3 | 6 | 0.11 |
| (2,1679) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:HB3 | 6 | 0.11 |
| (2,1679) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:HB3 | 6 | 0.11 |
| (2,1679) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HB3 | 14 | 0.11 |
| (2,1679) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:HB3 | 14 | 0.11 |
| (2,1679) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:HB3 | 14 | 0.11 |
| (2,1668) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 15 | 0.11 |
| (2,1668) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 15 | 0.11 |
| (2,1668) | 1:A:90:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 15 | 0.11 |
| (2,1602) | 1:A:86:THR:HB | 1:A:88:HIS:H | 10 | 0.11 |
| (2,1569) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:84:HIS:H | 7 | 0.11 |
| (2,1569) | 1:A:83:ASP:HB3 | 1:A:84:HIS:H | 15 | 0.11 |
| (2,1566) | 1:A:83:ASP:HB2 | 1:A:83:ASP:H | 7 | 0.11 |
| (2,1566) | 1:A:83:ASP:HB2 | 1:A:83:ASP:H | 9 | 0.11 |
| (2,1560) | 1:A:82:PHE:HB2 | 1:A:83:ASP:H | 15 | 0.11 |
| (2,1557) | 1:A:82:PHE:HA | 1:A:82:PHE:HB3 | 1 | 0.11 |
| (2,1557) | 1:A:82:PHE:HA | 1:A:82:PHE:HB3 | 4 | 0.11 |
| (2,1557) | 1:A:82:PHE:HA | 1:A:82:PHE:HB3 | 6 | 0.11 |
| (2,1557) | 1:A:82:PHE:HA | 1:A:82:PHE:HB3 | 7 | 0.11 |
| (2,1557) | 1:A:82:PHE:HA | 1:A:82:PHE:HB3 | 8 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1557) | 1:A:82:PHE:HA | 1:A:82:PHE:HB3 | 9 | 0.11 |
| (2,1557) | 1:A:82:PHE:HA | 1:A:82:PHE:HB3 | 10 | 0.11 |
| (2,1557) | 1:A:82:PHE:HA | 1:A:82:PHE:HB3 | 12 | 0.11 |
| (2,1557) | 1:A:82:PHE:HA | 1:A:82:PHE:HB3 | 13 | 0.11 |
| (2,1557) | 1:A:82:PHE:HA | 1:A:82:PHE:HB3 | 15 | 0.11 |
| (2,1557) | 1:A:82:PHE:HA | 1:A:82:PHE:HB3 | 16 | 0.11 |
| (2,1500) | 1:A:72:THR:HG21 | 1:A:74:LEU:H | 7 | 0.11 |
| (2,1500) | 1:A:72:THR:HG22 | 1:A:74:LEU:H | 7 | 0.11 |
| (2,1500) | 1:A:72:THR:HG23 | 1:A:74:LEU:H | 7 | 0.11 |
| (2,1499) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:78:PRO:HB3 | 14 | 0.11 |
| (2,1490) | 1:A:79:THR:HA | 1:A:79:THR:HB | 6 | 0.11 |
| (2,1489) | 1:A:78:PRO:HB3 | 1:A:79:THR:HG21 | 15 | 0.11 |
| (2,1489) | 1:A:78:PRO:HB3 | 1:A:79:THR:HG22 | 15 | 0.11 |
| (2,1489) | 1:A:78:PRO:HB3 | 1:A:79:THR:HG23 | 15 | 0.11 |
| (2,1473) | 1:A:75:ASP:HB3 | 1:A:75:ASP:H | 3 | 0.11 |
| (2,1448) | 1:A:95:HIS:HB3 | 1:A:95:HIS:H | 13 | 0.11 |
| (2,1444) | 1:A:88:HIS:HB3 | 1:A:88:HIS:H | 10 | 0.11 |
| (2,1433) | 1:A:71:ASN:HA | 1:A:70:HIS:HD2 | 15 | 0.11 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG21 | 9 | 0.11 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG22 | 9 | 0.11 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:33:THR:HG23 | 9 | 0.11 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG21 | 9 | 0.11 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG22 | 9 | 0.11 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:33:THR:HG23 | 9 | 0.11 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG21 | 9 | 0.11 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG22 | 9 | 0.11 |
| (2,1417) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:33:THR:HG23 | 9 | 0.11 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD11 | 7 | 0.11 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD12 | 7 | 0.11 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD13 | 7 | 0.11 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD11 | 9 | 0.11 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD12 | 9 | 0.11 |
| (2,1384) | 1:A:81:ILE:HG13 | 1:A:64:LEU:HD13 | 9 | 0.11 |
| (2,1380) | 1:A:97:ARG:HB3 | 1:A:97:ARG:HG3 | 11 | 0.11 |
| (2,1351) | 1:A:70:HIS:HB2 | 1:A:70:HIS:H | 11 | 0.11 |
| (2,1350) | 1:A:70:HIS:HB3 | 1:A:71:ASN:H | 9 | 0.11 |
| (2,1350) | 1:A:70:HIS:HB3 | 1:A:71:ASN:H | 12 | 0.11 |
| (2,133) | 1:A:35:THR:HG21 | 1:A:36:VAL:H | 6 | 0.11 |
| (2,133) | 1:A:35:THR:HG22 | 1:A:36:VAL:H | 6 | 0.11 |
| (2,133) | 1:A:35:THR:HG23 | 1:A:36:VAL:H | 6 | 0.11 |
| (2,1303) | 1:A:66:ASN:HB3 | 1:A:66:ASN:HD21 | 1 | 0.11 |
| (2,1303) | 1:A:66:ASN:HB3 | 1:A:66:ASN:HD21 | 2 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1295) | 1:A:66:ASN:HB3 | 1:A:66:ASN:HA | 3 | 0.11 |
| (2,1281) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:65:ARG:HA | 7 | 0.11 |
| (2,1281) | 1:A:65:ARG:HB2 | 1:A:65:ARG:HA | 15 | 0.11 |
| (2,1278) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:65:ARG:H | 2 | 0.11 |
| (2,1278) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:65:ARG:H | 14 | 0.11 |
| (2,1276) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:62:LEU:HA | 3 | 0.11 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:7:THR:HA | 3 | 0.11 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:7:THR:HA | 3 | 0.11 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:7:THR:HA | 3 | 0.11 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:7:THR:HA | 5 | 0.11 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:7:THR:HA | 5 | 0.11 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:7:THR:HA | 5 | 0.11 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:7:THR:HA | 8 | 0.11 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:7:THR:HA | 8 | 0.11 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:7:THR:HA | 8 | 0.11 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:7:THR:HA | 9 | 0.11 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:7:THR:HA | 9 | 0.11 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:7:THR:HA | 9 | 0.11 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:7:THR:HA | 12 | 0.11 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:7:THR:HA | 12 | 0.11 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:7:THR:HA | 12 | 0.11 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:7:THR:HA | 15 | 0.11 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:7:THR:HA | 15 | 0.11 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:7:THR:HA | 15 | 0.11 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG21 | 1:A:7:THR:HA | 16 | 0.11 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG22 | 1:A:7:THR:HA | 16 | 0.11 |
| (2,127) | 1:A:7:THR:HG23 | 1:A:7:THR:HA | 16 | 0.11 |
| (2,1248) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HB3 | 4 | 0.11 |
| (2,1248) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HB3 | 4 | 0.11 |
| (2,1248) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HB3 | 4 | 0.11 |
| (2,1248) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HB3 | 15 | 0.11 |
| (2,1248) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HB3 | 15 | 0.11 |
| (2,1248) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HB3 | 15 | 0.11 |
| (2,1241) | 1:A:64:LEU:HG | 1:A:64:LEU:HB2 | 8 | 0.11 |
| (2,1234) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:65:ARG:HA | 1 | 0.11 |
| (2,1234) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:65:ARG:HA | 4 | 0.11 |
| (2,1234) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:65:ARG:HA | 5 | 0.11 |
| (2,1231) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:64:LEU:H | 1 | 0.11 |
| (2,1231) | 1:A:63:GLU:HG3 | 1:A:64:LEU:H | 2 | 0.11 |
| (2,1220) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:35:THR:HG21 | 16 | 0.11 |
| (2,1220) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:35:THR:HG22 | 16 | 0.11 |
| (2,1220) | 1:A:63:GLU:HG2 | 1:A:35:THR:HG23 | 16 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1203) | 1:A:62:LEU:HG | 1:A:63:GLU:H | 10 | 0.11 |
| (2,1188) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:63:GLU:H | 15 | 0.11 |
| (2,1135) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:58:SER:HA | 6 | 0.11 |
| (2,1105) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:81:ILE:HA | 9 | 0.11 |
| (2,1105) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:81:ILE:HA | 9 | 0.11 |
| (2,1105) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:81:ILE:HA | 9 | 0.11 |
| (2,1096) | 1:A:56:ILE:HG12 | 1:A:64:LEU:HD11 | 4 | 0.11 |
| (2,1096) | 1:A:56:ILE:HG12 | 1:A:64:LEU:HD12 | 4 | 0.11 |
| (2,1096) | 1:A:56:ILE:HG12 | 1:A:64:LEU:HD13 | 4 | 0.11 |
| (2,1051) | 1:A:52:LYS:HG2 | 1:A:52:LYS:HB2 | 16 | 0.11 |
| (2,1029) | 1:A:51:PHE:HB3 | 1:A:52:LYS:HG2 | 3 | 0.11 |
| (2,1006) | 1:A:57:ASP:HA | 1:A:57:ASP:H | 9 | 0.11 |
| (2,1005) | 1:A:57:ASP:HA | 1:A:57:ASP:HB2 | 4 | 0.11 |
| (2,1005) | 1:A:57:ASP:HA | 1:A:57:ASP:HB2 | 15 | 0.11 |
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD21 | 7 | 0.11 |
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD22 | 7 | 0.11 |
| (2,1002) | 1:A:72:THR:HA | 1:A:9:LEU:HD23 | 7 | 0.11 |
| (2,10) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:25:LEU:HD11 | 13 | 0.11 |
| (2,10) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:25:LEU:HD12 | 13 | 0.11 |
| (2,10) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:25:LEU:HD13 | 13 | 0.11 |
| (2,10) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:25:LEU:HD11 | 15 | 0.11 |
| (2,10) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:25:LEU:HD12 | 15 | 0.11 |
| (2,10) | 1:A:95:HIS:HD2 | 1:A:25:LEU:HD13 | 15 | 0.11 |
| (1,68) | 1:A:20:GLN:H | 1:A:21:GLN:H | 1 | 0.11 |
| (1,68) | 1:A:20:GLN:H | 1:A:21:GLN:H | 7 | 0.11 |
| (1,600) | 1:A:33:THR:H | 1:A:30:ALA:HA | 15 | 0.11 |
| (1,592) | 1:A:101:SER:H | 1:A:101:SER:HB2 | 3 | 0.11 |
| (1,588) | 1:A:96:THR:H | 1:A:96:THR:HB | 2 | 0.11 |
| (1,588) | 1:A:96:THR:H | 1:A:96:THR:HB | 4 | 0.11 |
| (1,588) | 1:A:96:THR:H | 1:A:96:THR:HB | 10 | 0.11 |
| (1,573) | 1:A:24:THR:H | 1:A:24:THR:HB | 14 | 0.11 |
| (1,571) | 1:A:24:THR:H | 1:A:23:GLN:HG2 | 1 | 0.11 |
| (1,571) | 1:A:24:THR:H | 1:A:23:GLN:HG2 | 2 | 0.11 |
| (1,571) | 1:A:24:THR:H | 1:A:23:GLN:HG2 | 3 | 0.11 |
| (1,571) | 1:A:24:THR:H | 1:A:23:GLN:HG2 | 7 | 0.11 |
| (1,571) | 1:A:24:THR:H | 1:A:23:GLN:HG2 | 16 | 0.11 |
| (1,546) | 1:A:83:ASP:H | 1:A:82:PHE:HB2 | 13 | 0.11 |
| (1,503) | 1:A:100:GLN:H | 1:A:99:THR:HA | 7 | 0.11 |
| (1,500) | 1:A:100:GLN:H | 1:A:100:GLN:HB3 | 1 | 0.11 |
| (1,5) | 1:A:88:HIS:H | 1:A:89:ALA:H | 11 | 0.11 |
| (1,498) | 1:A:25:LEU:H | 1:A:25:LEU:HB2 | 3 | 0.11 |
| (1,472) | 1:A:8:ASP:H | 1:A:8:ASP:HB2 | 9 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,442) | 1:A:75:ASP:H | 1:A:75:ASP:HB3 | 3 | 0.11 |
| (1,416) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 7 | 0.11 |
| (1,416) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 7 | 0.11 |
| (1,416) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 7 | 0.11 |
| (1,412) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:10:ALA:HA | 13 | 0.11 |
| (1,356) | 1:A:91:THR:H | 1:A:91:THR:HB | 2 | 0.11 |
| (1,353) | 1:A:91:THR:H | 1:A:90:LEU:HB3 | 2 | 0.11 |
| (1,350) | 1:A:17:SER:H | 1:A:16:LEU:HB3 | 4 | 0.11 |
| (1,347) | 1:A:17:SER:H | 1:A:17:SER:HB2 | 1 | 0.11 |
| (1,347) | 1:A:17:SER:H | 1:A:17:SER:HB2 | 9 | 0.11 |
| (1,3) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:51:PHE:H | 7 | 0.11 |
| (1,292) | 1:A:37:LEU:H | 1:A:36:VAL:HG11 | 14 | 0.11 |
| (1,292) | 1:A:37:LEU:H | 1:A:36:VAL:HG12 | 14 | 0.11 |
| (1,292) | 1:A:37:LEU:H | 1:A:36:VAL:HG13 | 14 | 0.11 |
| (1,268) | 1:A:99:THR:H | 1:A:98:LEU:HD21 | 10 | 0.11 |
| (1,268) | 1:A:99:THR:H | 1:A:98:LEU:HD22 | 10 | 0.11 |
| (1,268) | 1:A:99:THR:H | 1:A:98:LEU:HD23 | 10 | 0.11 |
| (1,24) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:14:ASN:H | 1 | 0.11 |
| (1,24) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:14:ASN:H | 2 | 0.11 |
| (1,24) | 1:A:13:LEU:H | 1:A:14:ASN:H | 15 | 0.11 |
| (1,233) | 1:A:102:HIS:H | 1:A:102:HIS:HB2 | 2 | 0.11 |
| (1,224) | 1:A:35:THR:H | 1:A:35:THR:HB | 1 | 0.11 |
| (1,224) | 1:A:35:THR:H | 1:A:35:THR:HB | 9 | 0.11 |
| (1,224) | 1:A:35:THR:H | 1:A:35:THR:HB | 14 | 0.11 |
| (1,224) | 1:A:35:THR:H | 1:A:35:THR:HB | 16 | 0.11 |
| (1,213) | 1:A:38:GLY:H | 1:A:38:GLY:HA2 | 16 | 0.11 |
| (1,20) | 1:A:35:THR:H | 1:A:34:ALA:H | 3 | 0.11 |
| (1,20) | 1:A:35:THR:H | 1:A:34:ALA:H | 9 | 0.11 |
| (1,19) | 1:A:35:THR:H | 1:A:36:VAL:H | 14 | 0.11 |
| (1,187) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HD11 | 5 | 0.11 |
| (1,187) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HD12 | 5 | 0.11 |
| (1,187) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HD13 | 5 | 0.11 |
| (1,187) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HD11 | 7 | 0.11 |
| (1,187) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HD12 | 7 | 0.11 |
| (1,187) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HD13 | 7 | 0.11 |
| (1,187) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HD11 | 8 | 0.11 |
| (1,187) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HD12 | 8 | 0.11 |
| (1,187) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HD13 | 8 | 0.11 |
| (1,187) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HD11 | 13 | 0.11 |
| (1,187) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HD12 | 13 | 0.11 |
| (1,187) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HD13 | 13 | 0.11 |
| (1,17) | 1:A:100:GLN:H | 1:A:99:THR:H | 10 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|--------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG21 | 1 | 0.11 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG22 | 1 | 0.11 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG23 | 1 | 0.11 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG21 | 4 | 0.11 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG22 | 4 | 0.11 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG23 | 4 | 0.11 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG21 | 6 | 0.11 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG22 | 6 | 0.11 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG23 | 6 | 0.11 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG21 | 8 | 0.11 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG22 | 8 | 0.11 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG23 | 8 | 0.11 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG21 | 10 | 0.11 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG22 | 10 | 0.11 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG23 | 10 | 0.11 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG21 | 11 | 0.11 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG22 | 11 | 0.11 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG23 | 11 | 0.11 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG21 | 12 | 0.11 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG22 | 12 | 0.11 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG23 | 12 | 0.11 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG21 | 13 | 0.11 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG22 | 13 | 0.11 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG23 | 13 | 0.11 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG21 | 16 | 0.11 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG22 | 16 | 0.11 |
| (1,151) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:VAL:HG23 | 16 | 0.11 |
| (1,125) | 1:A:21:GLN:H | 1:A:21:GLN:HB2 | 15 | 0.11 |
| (1,105) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:94:LEU:HD21 | 6 | 0.11 |
| (1,105) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:94:LEU:HD22 | 6 | 0.11 |
| (1,105) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:94:LEU:HD23 | 6 | 0.11 |
| (1,105) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:94:LEU:HD21 | 9 | 0.11 |
| (1,105) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:94:LEU:HD22 | 9 | 0.11 |
| (1,105) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:94:LEU:HD23 | 9 | 0.11 |
| (1,105) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:94:LEU:HD21 | 14 | 0.11 |
| (1,105) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:94:LEU:HD22 | 14 | 0.11 |
| (1,105) | 1:A:73:GLY:H | 1:A:94:LEU:HD23 | 14 | 0.11 |

10 Dihedral-angle violation analysis

No dihedral-angle restraints found