



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Jun 3, 2023 – 07:54 PM EDT

PDB ID : 2N5B
BMRB ID : 25703
Title : Structures of the OXIDIZED state of the mutant D24A of yeast thioredoxin 1
Authors : Iqbal, A.; Moraes, A.H.; Valente, A.P.; Almeida, F.C.L.
Deposited on : 2015-07-13

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

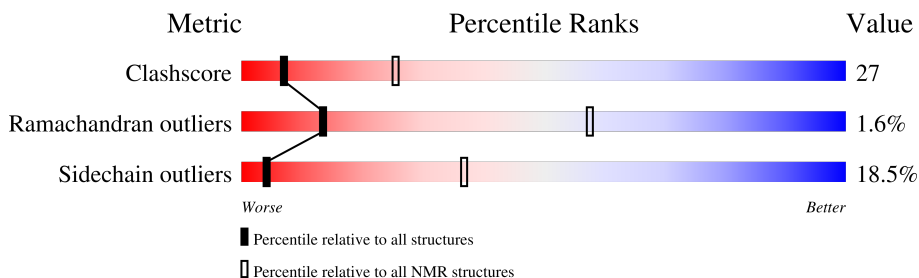
1 Overall quality at a glance

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 | 103 | |

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 14 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:2-A:103 (102) | 0.51 | 14 |

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

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

The models can be grouped into 3 clusters and 1 single-model cluster was found.

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1575 atoms, of which 790 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Thioredoxin-1.

| Mol | Chain | Residues | Atoms | | | | | | Trace |
|-----|-------|----------|-------|-----|-----|-----|-----|---|-------|
| | | | Total | C | H | N | O | S | |
| 1 | A | 103 | 1575 | 506 | 790 | 124 | 149 | 6 | 0 |

There is a discrepancy between the modelled and reference sequences:

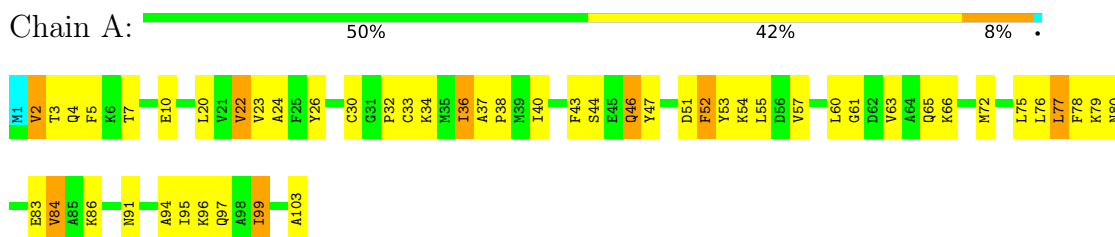
| Chain | Residue | Modelled | Actual | Comment | Reference |
|-------|---------|----------|--------|---------------------|------------|
| A | 24 | ALA | ASP | engineered mutation | UNP P22217 |

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: Thioredoxin-1

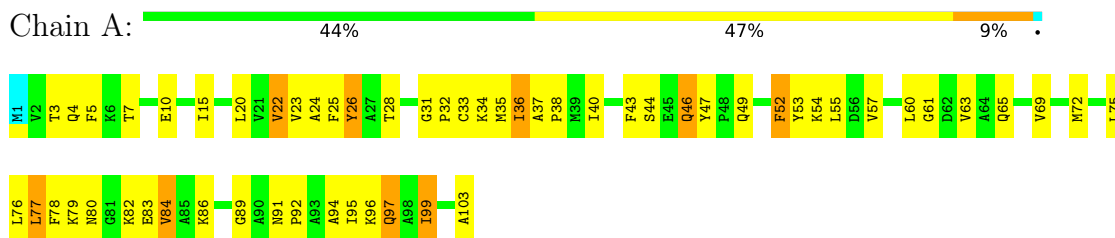


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

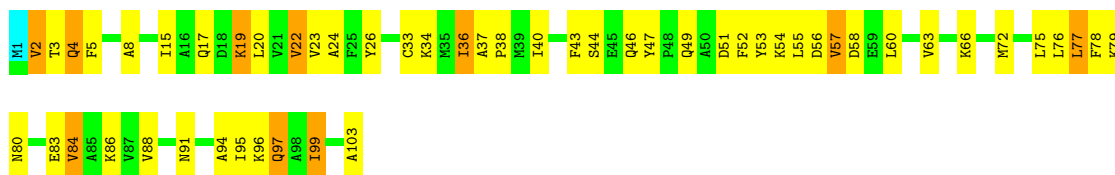
- Molecule 1: Thioredoxin-1



4.2.2 Score per residue for model 2

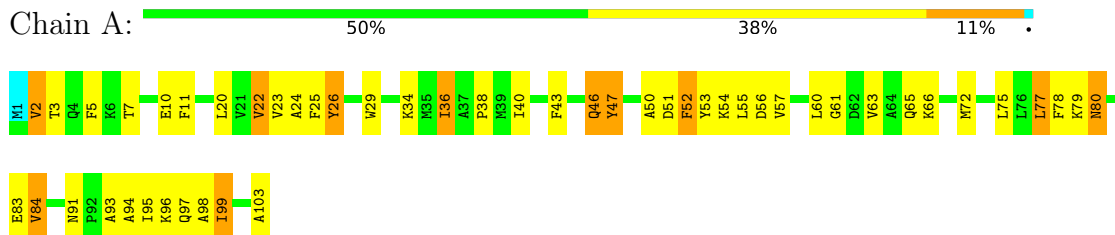
- Molecule 1: Thioredoxin-1





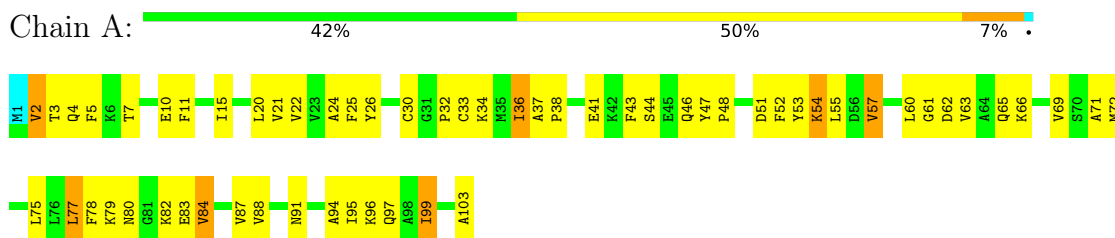
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Thioredoxin-1



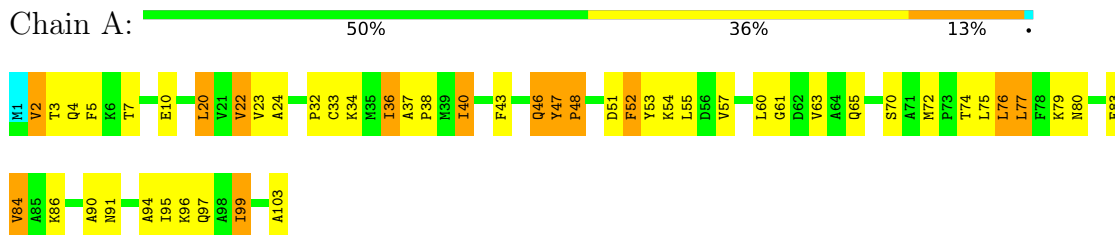
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Thioredoxin-1



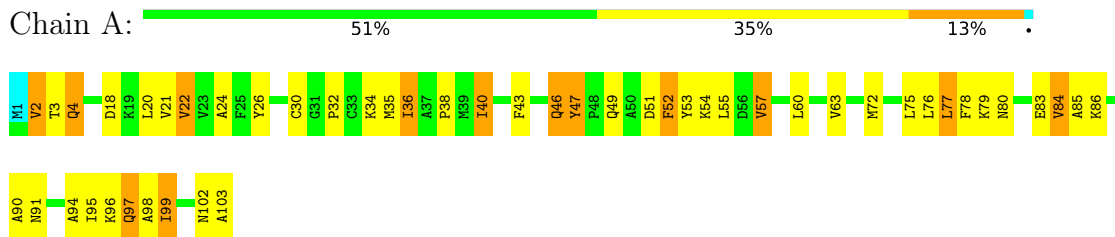
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Thioredoxin-1



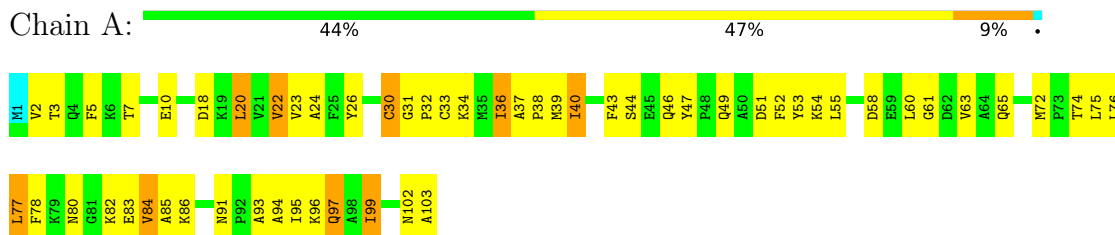
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Thioredoxin-1



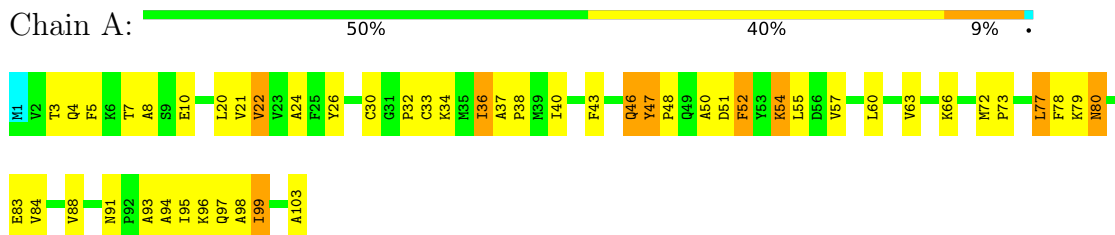
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Thioredoxin-1



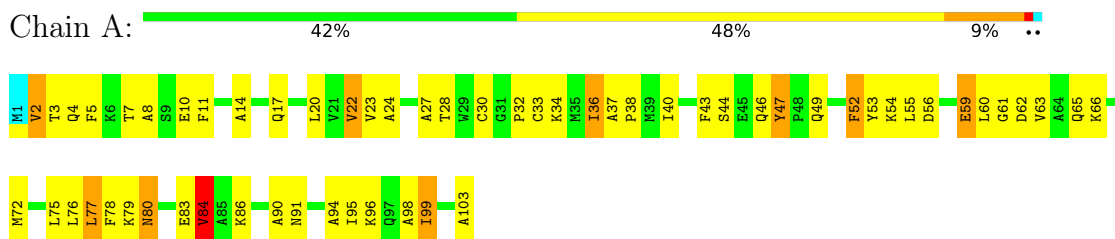
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Thioredoxin-1



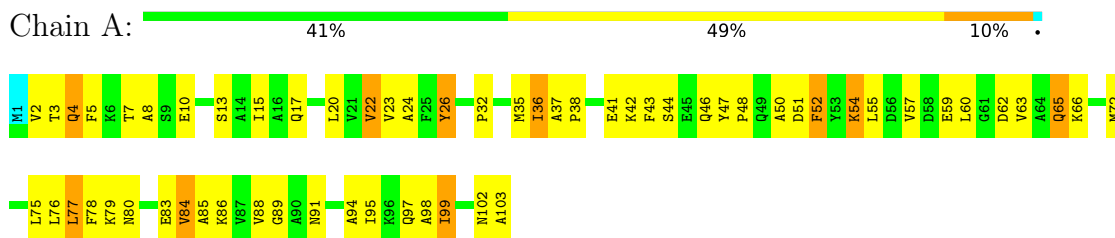
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Thioredoxin-1



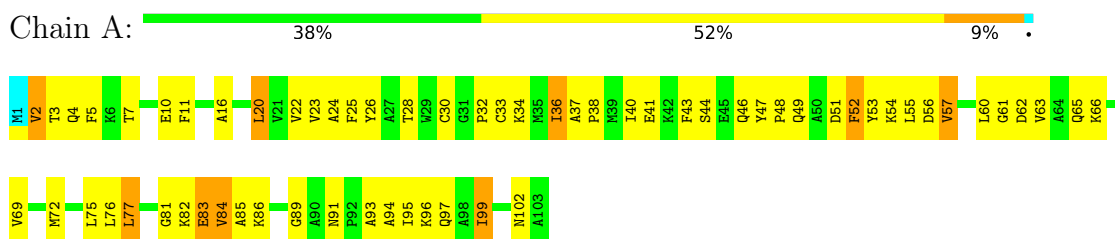
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Thioredoxin-1



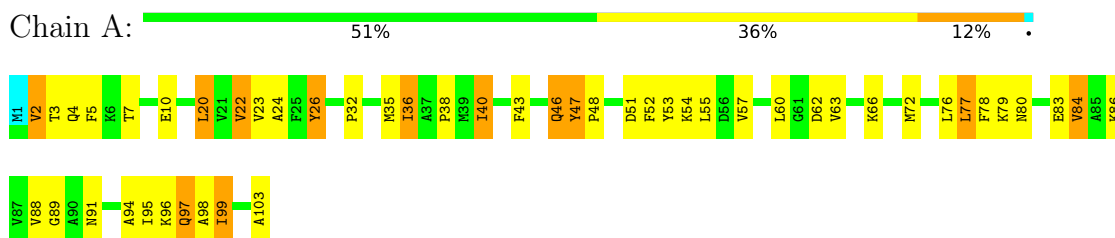
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Thioredoxin-1



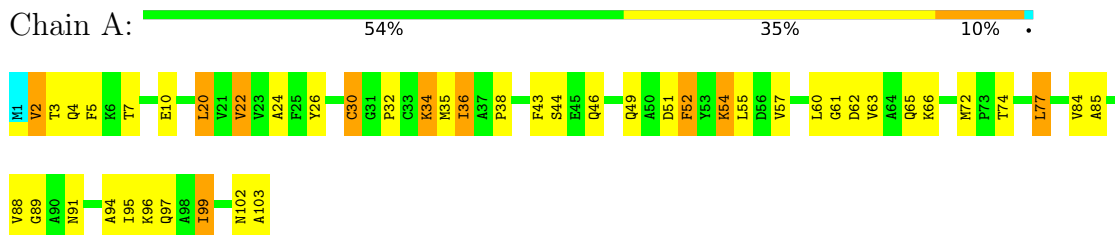
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Thioredoxin-1



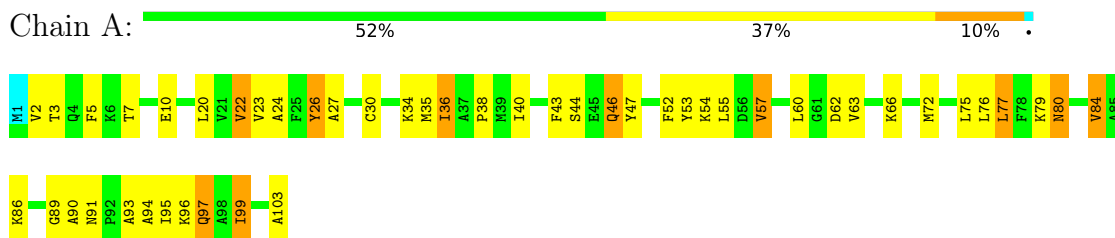
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Thioredoxin-1



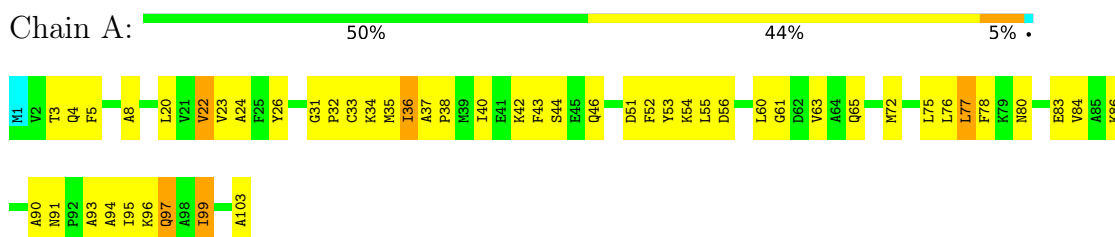
4.2.14 Score per residue for model 14 (medoid)

- Molecule 1: Thioredoxin-1



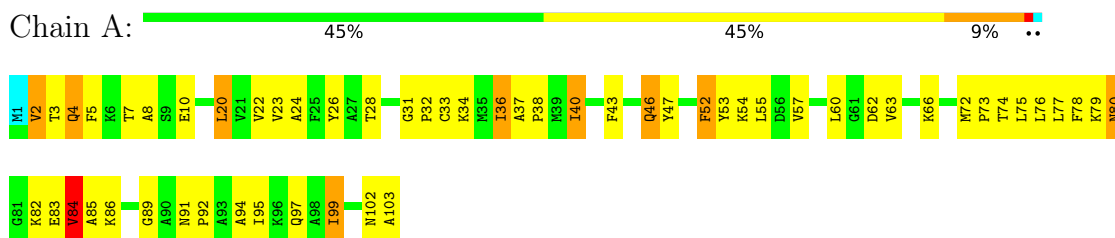
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Thioredoxin-1



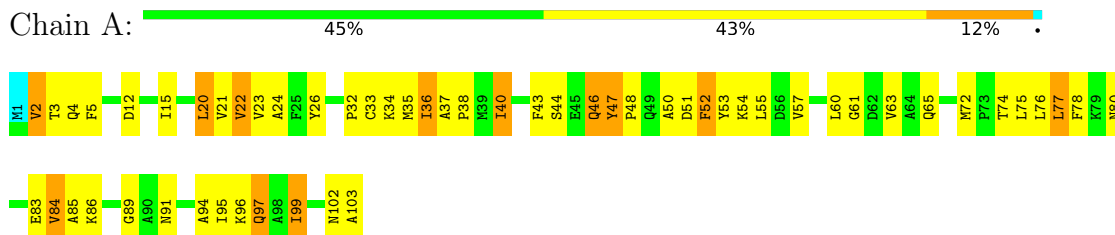
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Thioredoxin-1



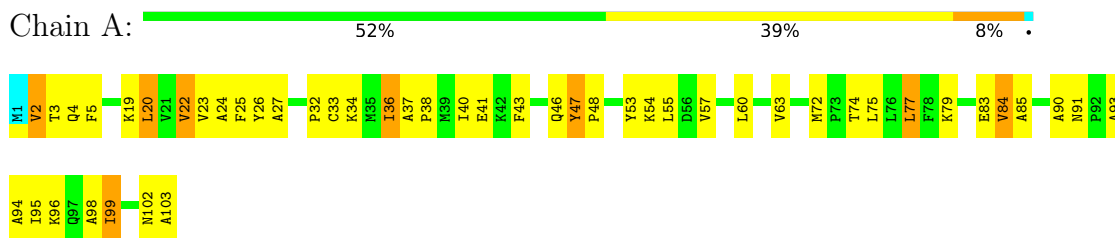
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Thioredoxin-1



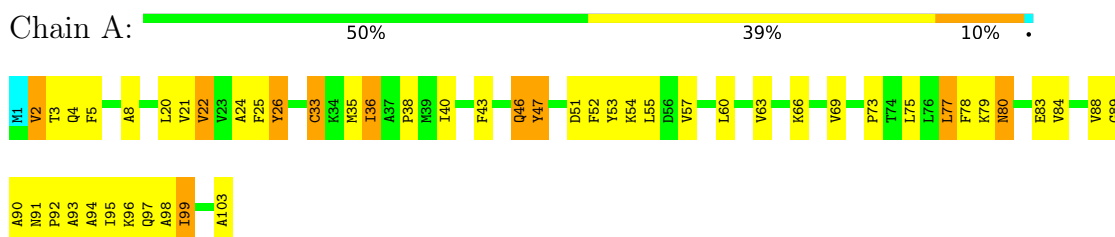
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Thioredoxin-1



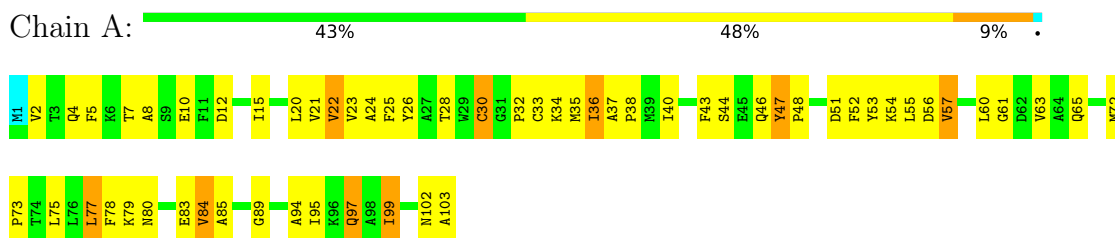
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Thioredoxin-1



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Thioredoxin-1



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 400 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *lowest energy*.

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

| Software name | Classification | Version |
|---------------|--------------------|---------|
| ARIA | structure solution | 2.3 |
| ARIA | refinement | 2.3 |
| CNS | structure solution | |
| CNS | refinement | |

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

| Chemical shift file(s) | working_cs.cif |
|--|----------------|
| Number of chemical shift lists | 1 |
| Total number of shifts | 1178 |
| Number of shifts mapped to atoms | 1178 |
| 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 | 777 | 779 | 779 | 42±5 |
| All | All | 15540 | 15580 | 15580 | 839 |

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 27.

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

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|-----------------|-----------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:44:SER:HB3 | 1:A:52:PHE:CD2 | 0.92 | 1.98 | 13 | 3 |
| 1:A:34:LYS:O | 1:A:38:PRO:HD2 | 0.83 | 1.72 | 7 | 11 |
| 1:A:30:CYS:SG | 1:A:32:PRO:HD2 | 0.83 | 2.12 | 20 | 3 |
| 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:54:LYS:HG2 | 0.80 | 1.51 | 9 | 5 |
| 1:A:40:ILE:HG21 | 1:A:54:LYS:HD3 | 0.80 | 1.54 | 17 | 4 |
| 1:A:22:VAL:HB | 1:A:77:LEU:HD22 | 0.78 | 1.55 | 13 | 17 |
| 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:54:LYS:HD3 | 0.77 | 1.55 | 9 | 6 |
| 1:A:20:LEU:HG | 1:A:103:ALA:HB2 | 0.75 | 1.59 | 3 | 13 |
| 1:A:91:ASN:HB2 | 1:A:94:ALA:HB3 | 0.73 | 1.58 | 4 | 18 |
| 1:A:34:LYS:O | 1:A:38:PRO:HD3 | 0.71 | 1.86 | 1 | 6 |
| 1:A:44:SER:HB2 | 1:A:52:PHE:CD2 | 0.71 | 2.21 | 10 | 8 |
| 1:A:47:TYR:HE2 | 1:A:52:PHE:N | 0.70 | 1.84 | 3 | 4 |
| 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:52:PHE:CZ | 0.70 | 2.22 | 16 | 3 |
| 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:54:LYS:HG3 | 0.69 | 1.63 | 10 | 4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|-----------------|-----------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:26:TYR:HB2 | 1:A:55:LEU:O | 0.69 | 1.88 | 20 | 8 |
| 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:54:LYS:HG2 | 0.68 | 1.64 | 1 | 8 |
| 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:54:LYS:HE2 | 0.67 | 1.66 | 4 | 1 |
| 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:54:LYS:HG3 | 0.67 | 1.66 | 14 | 4 |
| 1:A:44:SER:HB2 | 1:A:52:PHE:CD1 | 0.66 | 2.25 | 7 | 1 |
| 1:A:5:PHE:HB2 | 1:A:55:LEU:HD21 | 0.66 | 1.65 | 15 | 1 |
| 1:A:79:LYS:HG2 | 1:A:80:ASN:ND2 | 0.66 | 2.06 | 2 | 11 |
| 1:A:26:TYR:CE1 | 1:A:54:LYS:HD2 | 0.66 | 2.24 | 1 | 3 |
| 1:A:36:ILE:HG13 | 1:A:40:ILE:HD12 | 0.66 | 1.67 | 18 | 8 |
| 1:A:95:ILE:O | 1:A:99:ILE:HB | 0.65 | 1.92 | 16 | 20 |
| 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:53:TYR:CE1 | 0.65 | 2.26 | 19 | 1 |
| 1:A:47:TYR:CZ | 1:A:99:ILE:HG13 | 0.65 | 2.27 | 16 | 3 |
| 1:A:47:TYR:CE1 | 1:A:99:ILE:HD11 | 0.64 | 2.27 | 5 | 1 |
| 1:A:32:PRO:O | 1:A:36:ILE:HG23 | 0.63 | 1.93 | 16 | 7 |
| 1:A:26:TYR:O | 1:A:57:VAL:HB | 0.63 | 1.94 | 20 | 6 |
| 1:A:47:TYR:CE2 | 1:A:52:PHE:HB3 | 0.63 | 2.29 | 2 | 4 |
| 1:A:85:ALA:HB2 | 1:A:102:ASN:ND2 | 0.63 | 2.08 | 7 | 9 |
| 1:A:15:ILE:HG22 | 1:A:21:VAL:HG11 | 0.62 | 1.71 | 20 | 1 |
| 1:A:23:VAL:HA | 1:A:53:TYR:O | 0.62 | 1.94 | 3 | 12 |
| 1:A:40:ILE:HG23 | 1:A:52:PHE:CE2 | 0.61 | 2.30 | 1 | 2 |
| 1:A:36:ILE:HG12 | 1:A:36:ILE:O | 0.61 | 1.96 | 7 | 15 |
| 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:54:LYS:CG | 0.60 | 2.25 | 4 | 1 |
| 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:98:ALA:HB1 | 0.60 | 1.73 | 6 | 8 |
| 1:A:7:THR:OG1 | 1:A:10:GLU:HG2 | 0.60 | 1.95 | 13 | 14 |
| 1:A:26:TYR:CZ | 1:A:36:ILE:HD11 | 0.60 | 2.30 | 16 | 1 |
| 1:A:82:LYS:O | 1:A:83:GLU:HB2 | 0.60 | 1.97 | 11 | 2 |
| 1:A:26:TYR:CE2 | 1:A:36:ILE:HD12 | 0.60 | 2.32 | 8 | 2 |
| 1:A:20:LEU:HD21 | 1:A:84:VAL:HG11 | 0.60 | 1.74 | 6 | 6 |
| 1:A:2:VAL:HB | 1:A:52:PHE:CD2 | 0.59 | 2.32 | 17 | 1 |
| 1:A:35:MET:O | 1:A:38:PRO:HD2 | 0.59 | 1.97 | 1 | 9 |
| 1:A:43:PHE:HA | 1:A:46:GLN:HG2 | 0.59 | 1.74 | 18 | 8 |
| 1:A:36:ILE:CG1 | 1:A:40:ILE:HD12 | 0.59 | 2.28 | 1 | 7 |
| 1:A:47:TYR:CE2 | 1:A:52:PHE:N | 0.59 | 2.71 | 6 | 3 |
| 1:A:82:LYS:O | 1:A:83:GLU:HG2 | 0.59 | 1.97 | 16 | 1 |
| 1:A:26:TYR:O | 1:A:56:ASP:HA | 0.59 | 1.98 | 3 | 1 |
| 1:A:46:GLN:O | 1:A:48:PRO:HD3 | 0.58 | 1.98 | 18 | 9 |
| 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:52:PHE:CE2 | 0.58 | 2.33 | 16 | 1 |
| 1:A:30:CYS:HB3 | 1:A:72:MET:SD | 0.58 | 2.38 | 4 | 1 |
| 1:A:5:PHE:H | 1:A:55:LEU:HD22 | 0.58 | 1.57 | 17 | 12 |
| 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:53:TYR:HA | 0.58 | 1.76 | 9 | 4 |
| 1:A:96:LYS:HA | 1:A:99:ILE:HG22 | 0.58 | 1.74 | 12 | 14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|-----------------|-----------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:99:ILE:O | 1:A:103:ALA:HB3 | 0.58 | 1.99 | 3 | 12 |
| 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:75:LEU:CD2 | 0.58 | 2.28 | 4 | 4 |
| 1:A:43:PHE:HA | 1:A:46:GLN:CG | 0.58 | 2.28 | 13 | 7 |
| 1:A:43:PHE:HA | 1:A:46:GLN:HG3 | 0.57 | 1.76 | 16 | 12 |
| 1:A:60:LEU:HB3 | 1:A:63:VAL:CG1 | 0.57 | 2.29 | 6 | 18 |
| 1:A:21:VAL:CG1 | 1:A:78:PHE:HB2 | 0.57 | 2.29 | 20 | 1 |
| 1:A:23:VAL:CG1 | 1:A:55:LEU:HG | 0.57 | 2.30 | 18 | 10 |
| 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:75:LEU:HD13 | 0.57 | 1.77 | 9 | 10 |
| 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:26:TYR:CE1 | 0.57 | 2.35 | 8 | 2 |
| 1:A:55:LEU:HD22 | 1:A:60:LEU:HG | 0.57 | 1.77 | 15 | 1 |
| 1:A:26:TYR:CE1 | 1:A:73:PRO:HB3 | 0.56 | 2.35 | 8 | 1 |
| 1:A:5:PHE:HB2 | 1:A:55:LEU:CD2 | 0.56 | 2.31 | 18 | 6 |
| 1:A:51:ASP:HB3 | 1:A:53:TYR:CE1 | 0.56 | 2.34 | 20 | 1 |
| 1:A:19:LYS:HE2 | 1:A:19:LYS:C | 0.56 | 2.21 | 2 | 1 |
| 1:A:19:LYS:HE2 | 1:A:19:LYS:O | 0.56 | 2.01 | 2 | 1 |
| 1:A:20:LEU:CD2 | 1:A:84:VAL:HG11 | 0.55 | 2.31 | 2 | 15 |
| 1:A:43:PHE:CE2 | 1:A:96:LYS:HG2 | 0.55 | 2.37 | 19 | 4 |
| 1:A:47:TYR:HE2 | 1:A:52:PHE:CD2 | 0.55 | 2.19 | 1 | 1 |
| 1:A:25:PHE:CD2 | 1:A:69:VAL:HG21 | 0.55 | 2.37 | 4 | 4 |
| 1:A:36:ILE:O | 1:A:36:ILE:HG12 | 0.54 | 2.01 | 1 | 3 |
| 1:A:62:ASP:O | 1:A:66:LYS:HG3 | 0.54 | 2.03 | 10 | 7 |
| 1:A:91:ASN:CB | 1:A:94:ALA:HB3 | 0.54 | 2.33 | 11 | 3 |
| 1:A:93:ALA:O | 1:A:96:LYS:HB2 | 0.53 | 2.03 | 11 | 8 |
| 1:A:2:VAL:CG2 | 1:A:54:LYS:HG2 | 0.53 | 2.33 | 2 | 4 |
| 1:A:94:ALA:O | 1:A:97:GLN:HB3 | 0.53 | 2.04 | 10 | 17 |
| 1:A:62:ASP:O | 1:A:66:LYS:HG2 | 0.53 | 2.04 | 9 | 1 |
| 1:A:47:TYR:CE1 | 1:A:99:ILE:HG13 | 0.53 | 2.38 | 16 | 5 |
| 1:A:76:LEU:CD2 | 1:A:86:LYS:HG3 | 0.52 | 2.35 | 1 | 8 |
| 1:A:87:VAL:HG11 | 1:A:91:ASN:ND2 | 0.52 | 2.18 | 4 | 1 |
| 1:A:2:VAL:HG11 | 1:A:54:LYS:HG2 | 0.52 | 1.80 | 7 | 1 |
| 1:A:47:TYR:CE2 | 1:A:52:PHE:CD2 | 0.52 | 2.97 | 1 | 1 |
| 1:A:36:ILE:CG1 | 1:A:40:ILE:HD13 | 0.52 | 2.33 | 5 | 3 |
| 1:A:5:PHE:CB | 1:A:55:LEU:HD21 | 0.52 | 2.34 | 15 | 1 |
| 1:A:76:LEU:HD22 | 1:A:86:LYS:HG2 | 0.51 | 1.82 | 12 | 3 |
| 1:A:47:TYR:CE2 | 1:A:52:PHE:HB2 | 0.51 | 2.40 | 8 | 1 |
| 1:A:44:SER:HB3 | 1:A:52:PHE:CG | 0.51 | 2.37 | 13 | 1 |
| 1:A:79:LYS:O | 1:A:82:LYS:HG2 | 0.51 | 2.05 | 1 | 2 |
| 1:A:8:ALA:CB | 1:A:63:VAL:HB | 0.51 | 2.36 | 15 | 7 |
| 1:A:78:PHE:HA | 1:A:83:GLU:HA | 0.51 | 1.82 | 8 | 14 |
| 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:40:ILE:HD13 | 0.51 | 1.81 | 12 | 1 |
| 1:A:32:PRO:HB3 | 1:A:90:ALA:HB2 | 0.51 | 1.82 | 6 | 5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|-----------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:24:ALA:HA | 1:A:74:THR:O | 0.51 | 2.05 | 13 | 5 |
| 1:A:17:GLN:HB2 | 1:A:19:LYS:NZ | 0.51 | 2.21 | 2 | 1 |
| 1:A:76:LEU:HD22 | 1:A:76:LEU:N | 0.51 | 2.20 | 5 | 1 |
| 1:A:43:PHE:O | 1:A:47:TYR:CD1 | 0.51 | 2.64 | 9 | 3 |
| 1:A:61:GLY:O | 1:A:65:GLN:HG2 | 0.50 | 2.06 | 1 | 8 |
| 1:A:55:LEU:HD13 | 1:A:60:LEU:HG | 0.50 | 1.83 | 5 | 6 |
| 1:A:4:GLN:HA | 1:A:54:LYS:O | 0.50 | 2.06 | 2 | 4 |
| 1:A:31:GLY:N | 1:A:32:PRO:HD2 | 0.50 | 2.21 | 1 | 2 |
| 1:A:26:TYR:CZ | 1:A:73:PRO:HB3 | 0.50 | 2.40 | 8 | 1 |
| 1:A:26:TYR:OH | 1:A:36:ILE:HD13 | 0.50 | 2.07 | 14 | 4 |
| 1:A:33:CYS:O | 1:A:37:ALA:HB2 | 0.50 | 2.07 | 16 | 13 |
| 1:A:43:PHE:N | 1:A:43:PHE:CD1 | 0.50 | 2.79 | 10 | 7 |
| 1:A:27:ALA:HB3 | 1:A:30:CYS:SG | 0.50 | 2.47 | 9 | 2 |
| 1:A:2:VAL:CG2 | 1:A:54:LYS:HB2 | 0.50 | 2.37 | 4 | 1 |
| 1:A:25:PHE:CE2 | 1:A:55:LEU:HD12 | 0.49 | 2.42 | 18 | 2 |
| 1:A:76:LEU:HD22 | 1:A:86:LYS:HG3 | 0.49 | 1.84 | 17 | 2 |
| 1:A:40:ILE:HG23 | 1:A:52:PHE:CZ | 0.49 | 2.42 | 11 | 2 |
| 1:A:77:LEU:O | 1:A:84:VAL:HG12 | 0.49 | 2.08 | 11 | 4 |
| 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:54:LYS:HE3 | 0.49 | 1.83 | 13 | 2 |
| 1:A:26:TYR:CZ | 1:A:36:ILE:HD12 | 0.49 | 2.42 | 13 | 3 |
| 1:A:96:LYS:HA | 1:A:99:ILE:CG2 | 0.49 | 2.37 | 12 | 4 |
| 1:A:2:VAL:CG1 | 1:A:54:LYS:HG2 | 0.49 | 2.37 | 7 | 1 |
| 1:A:32:PRO:O | 1:A:36:ILE:HG22 | 0.49 | 2.08 | 8 | 2 |
| 1:A:22:VAL:CB | 1:A:77:LEU:HD22 | 0.49 | 2.37 | 20 | 2 |
| 1:A:79:LYS:HG3 | 1:A:80:ASN:ND2 | 0.49 | 2.23 | 10 | 3 |
| 1:A:74:THR:HG22 | 1:A:76:LEU:HD11 | 0.49 | 1.85 | 5 | 1 |
| 1:A:44:SER:HB2 | 1:A:52:PHE:CG | 0.49 | 2.43 | 9 | 5 |
| 1:A:44:SER:HA | 1:A:47:TYR:CE1 | 0.49 | 2.43 | 7 | 1 |
| 1:A:21:VAL:O | 1:A:77:LEU:HA | 0.48 | 2.09 | 4 | 4 |
| 1:A:25:PHE:CD2 | 1:A:55:LEU:HD12 | 0.48 | 2.43 | 18 | 1 |
| 1:A:2:VAL:CG2 | 1:A:54:LYS:HE2 | 0.48 | 2.38 | 4 | 1 |
| 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:40:ILE:CG2 | 0.48 | 2.39 | 7 | 1 |
| 1:A:5:PHE:H | 1:A:55:LEU:CD2 | 0.48 | 2.22 | 20 | 4 |
| 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:75:LEU:CD1 | 0.48 | 2.39 | 2 | 10 |
| 1:A:77:LEU:HB2 | 1:A:84:VAL:HG12 | 0.48 | 1.86 | 20 | 2 |
| 1:A:75:LEU:HD12 | 1:A:91:ASN:OD1 | 0.48 | 2.09 | 7 | 1 |
| 1:A:34:LYS:O | 1:A:38:PRO:CD | 0.47 | 2.62 | 17 | 13 |
| 1:A:47:TYR:CD1 | 1:A:47:TYR:O | 0.47 | 2.67 | 6 | 7 |
| 1:A:85:ALA:HB2 | 1:A:102:ASN:HD22 | 0.47 | 1.66 | 7 | 1 |
| 1:A:91:ASN:O | 1:A:95:ILE:HB | 0.47 | 2.09 | 12 | 3 |
| 1:A:13:SER:O | 1:A:17:GLN:HG3 | 0.47 | 2.10 | 10 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|-----------------|-----------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:55:LEU:N | 1:A:55:LEU:HD23 | 0.47 | 2.24 | 6 | 5 |
| 1:A:92:PRO:O | 1:A:95:ILE:HG22 | 0.47 | 2.10 | 1 | 3 |
| 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:103:ALA:CB | 0.47 | 2.40 | 3 | 2 |
| 1:A:36:ILE:HG13 | 1:A:40:ILE:HD13 | 0.47 | 1.84 | 5 | 2 |
| 1:A:96:LYS:HD2 | 1:A:99:ILE:CG2 | 0.47 | 2.39 | 12 | 1 |
| 1:A:25:PHE:O | 1:A:73:PRO:HA | 0.47 | 2.10 | 20 | 1 |
| 1:A:43:PHE:O | 1:A:47:TYR:HD1 | 0.46 | 1.92 | 11 | 1 |
| 1:A:2:VAL:HB | 1:A:52:PHE:HB3 | 0.46 | 1.87 | 19 | 3 |
| 1:A:25:PHE:CE2 | 1:A:69:VAL:HG21 | 0.46 | 2.46 | 11 | 2 |
| 1:A:15:ILE:HB | 1:A:78:PHE:CB | 0.46 | 2.40 | 10 | 5 |
| 1:A:77:LEU:HD23 | 1:A:77:LEU:N | 0.46 | 2.26 | 20 | 6 |
| 1:A:40:ILE:HG21 | 1:A:54:LYS:NZ | 0.46 | 2.26 | 2 | 1 |
| 1:A:8:ALA:HB2 | 1:A:63:VAL:HB | 0.46 | 1.86 | 19 | 2 |
| 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:53:TYR:CE2 | 0.46 | 2.46 | 6 | 2 |
| 1:A:2:VAL:HG11 | 1:A:54:LYS:CE | 0.46 | 2.40 | 7 | 1 |
| 1:A:26:TYR:OH | 1:A:37:ALA:HA | 0.46 | 2.11 | 11 | 2 |
| 1:A:75:LEU:HD13 | 1:A:95:ILE:HD13 | 0.46 | 1.88 | 4 | 3 |
| 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:98:ALA:CB | 0.45 | 2.41 | 6 | 2 |
| 1:A:55:LEU:HD22 | 1:A:60:LEU:CG | 0.45 | 2.41 | 15 | 1 |
| 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:53:TYR:CD2 | 0.45 | 2.46 | 6 | 2 |
| 1:A:43:PHE:CE2 | 1:A:96:LYS:HD3 | 0.45 | 2.46 | 12 | 1 |
| 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:54:LYS:HB2 | 0.45 | 1.89 | 12 | 1 |
| 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:103:ALA:HB3 | 0.45 | 1.88 | 5 | 3 |
| 1:A:39:MET:O | 1:A:43:PHE:HD1 | 0.45 | 1.94 | 7 | 1 |
| 1:A:52:PHE:CD1 | 1:A:52:PHE:N | 0.45 | 2.85 | 13 | 2 |
| 1:A:96:LYS:HD3 | 1:A:99:ILE:HG22 | 0.45 | 1.87 | 9 | 2 |
| 1:A:22:VAL:HB | 1:A:77:LEU:CD2 | 0.45 | 2.42 | 9 | 3 |
| 1:A:26:TYR:CE2 | 1:A:33:CYS:HB3 | 0.45 | 2.46 | 19 | 1 |
| 1:A:40:ILE:CG2 | 1:A:54:LYS:HD3 | 0.45 | 2.42 | 11 | 3 |
| 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:60:LEU:HD22 | 0.44 | 1.89 | 9 | 1 |
| 1:A:60:LEU:HD12 | 1:A:63:VAL:HG21 | 0.44 | 1.88 | 13 | 2 |
| 1:A:51:ASP:HB3 | 1:A:53:TYR:CE2 | 0.44 | 2.47 | 2 | 2 |
| 1:A:71:ALA:HB3 | 1:A:88:VAL:HG12 | 0.44 | 1.90 | 4 | 1 |
| 1:A:55:LEU:HD22 | 1:A:60:LEU:CD2 | 0.44 | 2.43 | 15 | 1 |
| 1:A:95:ILE:O | 1:A:99:ILE:N | 0.44 | 2.49 | 18 | 7 |
| 1:A:47:TYR:HE2 | 1:A:52:PHE:CG | 0.44 | 2.31 | 16 | 1 |
| 1:A:22:VAL:HG13 | 1:A:77:LEU:CD2 | 0.44 | 2.43 | 4 | 1 |
| 1:A:56:ASP:HB3 | 1:A:58:ASP:OD1 | 0.43 | 2.13 | 2 | 1 |
| 1:A:24:ALA:O | 1:A:55:LEU:N | 0.43 | 2.47 | 11 | 3 |
| 1:A:36:ILE:C | 1:A:36:ILE:HD13 | 0.43 | 2.33 | 8 | 2 |
| 1:A:20:LEU:CD1 | 1:A:84:VAL:HG11 | 0.43 | 2.43 | 9 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|-----------------|-----------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:56:ASP:O | 1:A:60:LEU:HB2 | 0.43 | 2.13 | 15 | 1 |
| 1:A:20:LEU:HA | 1:A:79:LYS:HG2 | 0.43 | 1.90 | 18 | 1 |
| 1:A:76:LEU:CD2 | 1:A:86:LYS:HG2 | 0.43 | 2.44 | 10 | 1 |
| 1:A:43:PHE:HE2 | 1:A:92:PRO:O | 0.43 | 1.96 | 19 | 1 |
| 1:A:73:PRO:CD | 1:A:90:ALA:HA | 0.43 | 2.44 | 19 | 1 |
| 1:A:61:GLY:O | 1:A:65:GLN:HG3 | 0.43 | 2.13 | 11 | 3 |
| 1:A:79:LYS:HD3 | 1:A:84:VAL:HG21 | 0.43 | 1.90 | 18 | 1 |
| 1:A:47:TYR:CD1 | 1:A:99:ILE:HD11 | 0.43 | 2.49 | 7 | 1 |
| 1:A:59:GLU:CG | 1:A:60:LEU:HD22 | 0.43 | 2.43 | 9 | 1 |
| 1:A:22:VAL:CG2 | 1:A:77:LEU:HD22 | 0.43 | 2.44 | 7 | 1 |
| 1:A:42:LYS:O | 1:A:46:GLN:HG2 | 0.43 | 2.13 | 10 | 1 |
| 1:A:43:PHE:N | 1:A:43:PHE:HD1 | 0.42 | 2.10 | 10 | 2 |
| 1:A:47:TYR:OH | 1:A:99:ILE:HG21 | 0.42 | 2.14 | 1 | 1 |
| 1:A:26:TYR:CE2 | 1:A:54:LYS:HB3 | 0.42 | 2.48 | 3 | 1 |
| 1:A:76:LEU:HD12 | 1:A:86:LYS:HG3 | 0.42 | 1.90 | 5 | 1 |
| 1:A:52:PHE:CZ | 1:A:99:ILE:HG13 | 0.42 | 2.49 | 19 | 1 |
| 1:A:43:PHE:CD2 | 1:A:96:LYS:HD3 | 0.42 | 2.49 | 1 | 1 |
| 1:A:36:ILE:HG12 | 1:A:40:ILE:CG1 | 0.42 | 2.44 | 19 | 1 |
| 1:A:83:GLU:HG2 | 1:A:84:VAL:N | 0.42 | 2.30 | 1 | 5 |
| 1:A:20:LEU:HG | 1:A:103:ALA:CB | 0.42 | 2.44 | 4 | 2 |
| 1:A:19:LYS:HD3 | 1:A:19:LYS:H | 0.42 | 1.74 | 2 | 1 |
| 1:A:16:ALA:HA | 1:A:81:GLY:N | 0.42 | 2.29 | 11 | 1 |
| 1:A:42:LYS:O | 1:A:46:GLN:HG3 | 0.42 | 2.14 | 15 | 1 |
| 1:A:32:PRO:O | 1:A:35:MET:HG2 | 0.42 | 2.14 | 17 | 2 |
| 1:A:2:VAL:HG11 | 1:A:40:ILE:HG23 | 0.42 | 1.90 | 16 | 1 |
| 1:A:31:GLY:N | 1:A:32:PRO:CD | 0.42 | 2.83 | 1 | 3 |
| 1:A:77:LEU:HB2 | 1:A:84:VAL:CG1 | 0.42 | 2.44 | 20 | 2 |
| 1:A:26:TYR:CE2 | 1:A:36:ILE:HD11 | 0.42 | 2.49 | 16 | 1 |
| 1:A:87:VAL:HG11 | 1:A:91:ASN:HD21 | 0.42 | 1.74 | 4 | 1 |
| 1:A:5:PHE:O | 1:A:60:LEU:HD21 | 0.42 | 2.15 | 17 | 1 |
| 1:A:59:GLU:HG3 | 1:A:60:LEU:HD22 | 0.41 | 1.91 | 10 | 1 |
| 1:A:53:TYR:C | 1:A:54:LYS:HE2 | 0.41 | 2.35 | 6 | 2 |
| 1:A:65:GLN:HA | 1:A:65:GLN:HE21 | 0.41 | 1.75 | 10 | 1 |
| 1:A:26:TYR:OH | 1:A:36:ILE:HD12 | 0.41 | 2.14 | 19 | 1 |
| 1:A:12:ASP:HA | 1:A:15:ILE:HG12 | 0.41 | 1.92 | 20 | 1 |
| 1:A:83:GLU:HG2 | 1:A:84:VAL:H | 0.41 | 1.76 | 18 | 2 |
| 1:A:47:TYR:HB2 | 1:A:50:ALA:HB3 | 0.41 | 1.93 | 17 | 1 |
| 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:102:ASN:OD1 | 0.41 | 2.15 | 11 | 1 |
| 1:A:27:ALA:HB2 | 1:A:57:VAL:HG12 | 0.41 | 1.91 | 18 | 1 |
| 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:75:LEU:HG | 0.41 | 1.93 | 4 | 1 |
| 1:A:97:GLN:HG3 | 1:A:98:ALA:N | 0.41 | 2.30 | 10 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|----------------|-----------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:26:TYR:CD1 | 1:A:73:PRO:HB3 | 0.41 | 2.51 | 16 | 1 |
| 1:A:41:GLU:HA | 1:A:44:SER:OG | 0.41 | 2.16 | 4 | 1 |
| 1:A:77:LEU:HG | 1:A:85:ALA:HB3 | 0.41 | 1.92 | 13 | 1 |
| 1:A:26:TYR:N | 1:A:55:LEU:O | 0.41 | 2.54 | 14 | 1 |
| 1:A:65:GLN:HA | 1:A:65:GLN:OE1 | 0.41 | 2.16 | 15 | 1 |
| 1:A:14:ALA:HA | 1:A:17:GLN:NE2 | 0.40 | 2.31 | 9 | 1 |
| 1:A:2:VAL:HG11 | 1:A:40:ILE:CG2 | 0.40 | 2.46 | 16 | 1 |
| 1:A:37:ALA:O | 1:A:41:GLU:HB2 | 0.40 | 2.16 | 10 | 1 |
| 1:A:22:VAL:HA | 1:A:77:LEU:HA | 0.40 | 1.92 | 8 | 1 |
| 1:A:18:ASP:HA | 1:A:80:ASN:OD1 | 0.40 | 2.16 | 6 | 1 |
| 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:103:ALA:HB1 | 0.40 | 1.94 | 10 | 1 |
| 1:A:96:LYS:HD3 | 1:A:99:ILE:CG2 | 0.40 | 2.47 | 13 | 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 | 101/103 (98%) | 92±3 (91±3%) | 7±2 (7±2%) | 2±1 (2±1%) | 13 | 57 |
| All | All | 2020/2060 (98%) | 1841 (91%) | 147 (7%) | 32 (2%) | 13 | 57 |

All 7 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 | 84 | VAL | 12 |
| 1 | A | 89 | GLY | 10 |
| 1 | A | 88 | VAL | 4 |
| 1 | A | 83 | GLU | 2 |
| 1 | A | 30 | CYS | 2 |
| 1 | A | 48 | PRO | 1 |
| 1 | A | 90 | ALA | 1 |

6.3.2 Protein sidechains [i](#)

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

| Mol | Chain | Analysed | Rotameric | Outliers | Percentiles |
|-----|-------|-----------------|--------------|--------------|-------------|
| 1 | A | 81/82 (99%) | 66±3 (81±3%) | 15±3 (19±3%) | 4 37 |
| All | All | 1620/1640 (99%) | 1320 (81%) | 300 (19%) | 4 37 |

All 38 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 | 36 | ILE | 20 |
| 1 | A | 77 | LEU | 20 |
| 1 | A | 99 | ILE | 20 |
| 1 | A | 3 | THR | 19 |
| 1 | A | 22 | VAL | 19 |
| 1 | A | 72 | MET | 18 |
| 1 | A | 4 | GLN | 17 |
| 1 | A | 57 | VAL | 16 |
| 1 | A | 2 | VAL | 14 |
| 1 | A | 51 | ASP | 12 |
| 1 | A | 52 | PHE | 11 |
| 1 | A | 46 | GLN | 10 |
| 1 | A | 97 | GLN | 10 |
| 1 | A | 47 | TYR | 10 |
| 1 | A | 80 | ASN | 9 |
| 1 | A | 20 | LEU | 8 |
| 1 | A | 26 | TYR | 7 |
| 1 | A | 49 | GLN | 7 |
| 1 | A | 84 | VAL | 7 |
| 1 | A | 40 | ILE | 7 |
| 1 | A | 28 | THR | 5 |
| 1 | A | 54 | LYS | 5 |
| 1 | A | 66 | LYS | 4 |
| 1 | A | 11 | PHE | 4 |
| 1 | A | 30 | CYS | 4 |
| 1 | A | 56 | ASP | 3 |
| 1 | A | 19 | LYS | 2 |
| 1 | A | 88 | VAL | 2 |
| 1 | A | 29 | TRP | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1 | A | 70 | SER | 1 |
| 1 | A | 76 | LEU | 1 |
| 1 | A | 18 | ASP | 1 |
| 1 | A | 58 | ASP | 1 |
| 1 | A | 59 | GLU | 1 |
| 1 | A | 65 | GLN | 1 |
| 1 | A | 34 | LYS | 1 |
| 1 | A | 12 | ASP | 1 |
| 1 | A | 33 | CYS | 1 |

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no monosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation i

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

7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *assigned_chem_shift_list_1*

7.1.1 Bookkeeping i

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

| | |
|---|------|
| Total number of shifts | 1178 |
| Number of shifts mapped to atoms | 1178 |
| 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 |
|------------------------|----------|---------------------------------|----------------------------|
| $^{13}\text{C}_\alpha$ | 102 | -0.85 ± 0.09 | Should be checked |
| $^{13}\text{C}_\beta$ | 98 | -0.10 ± 0.17 | None needed (< 0.5 ppm) |
| $^{13}\text{C}'$ | 90 | 0.63 ± 0.26 | Should be applied |
| ^{15}N | 92 | -0.58 ± 0.40 | None needed (imprecise) |

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. 1170 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1345. 0 out of 16 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

| | Total | ^1H | ^{13}C | ^{15}N |
|-----------|---------------|---------------|-----------------|-----------------|
| Backbone | 480/504 (95%) | 198/203 (98%) | 190/204 (93%) | 92/97 (95%) |
| Sidechain | 608/742 (82%) | 413/487 (85%) | 187/235 (80%) | 8/20 (40%) |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| | Total | ¹H | ¹³C | ¹⁵N |
|----------|-----------------|----------------------|-----------------------|-----------------------|
| Aromatic | 82/99 (83%) | 41/48 (85%) | 40/50 (80%) | 1/1 (100%) |
| Overall | 1170/1345 (87%) | 652/738 (88%) | 417/489 (85%) | 101/118 (86%) |

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 87%, i.e. 1178 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1360. 0 out of 16 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

| | Total | ¹H | ¹³C | ¹⁵N |
|-----------|-----------------|----------------------|-----------------------|-----------------------|
| Backbone | 483/509 (95%) | 199/205 (97%) | 192/206 (93%) | 92/98 (94%) |
| Sidechain | 613/752 (82%) | 416/494 (84%) | 189/238 (79%) | 8/20 (40%) |
| Aromatic | 82/99 (83%) | 41/48 (85%) | 40/50 (80%) | 1/1 (100%) |
| Overall | 1178/1360 (87%) | 656/747 (88%) | 421/494 (85%) | 101/119 (85%) |

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

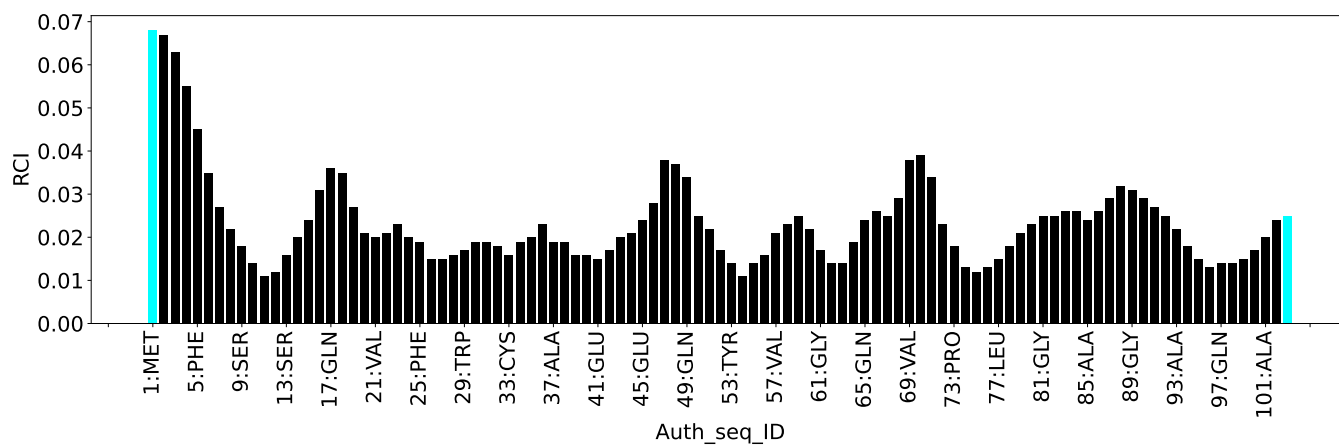
The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

| List Id | Chain | Res | Type | Atom | Shift, ppm | Expected range, ppm | Z-score |
|---------|-------|-----|------|------|------------|---------------------|---------|
| 1 | A | 95 | ILE | CD1 | 21.89 | 5.18 – 21.60 | 5.2 |

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 | 1362 |
| Intra-residue ($ i-j =0$) | 586 |
| Sequential ($ i-j =1$) | 286 |
| Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$) | 187 |
| Long range ($ i-j \geq 5$) | 242 |
| Inter-chain | 0 |
| Hydrogen bond restraints | 61 |
| Disulfide bond restraints | 0 |
| Total dihedral-angle restraints | 168 |
| Number of unmapped restraints | 0 |
| Number of restraints per residue | 14.9 |
| Number of long range restraints per residue ¹ | 2.5 |

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) | 56.5 | 0.2 |
| 0.2-0.5 (Medium) | 50.0 | 0.5 |
| >0.5 (Large) | 56.2 | 3.48 |

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

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

| Bins (°) | Average number of violations per model | Max (°) |
|--------------------|--|---------|
| 1.0-10.0 (Small) | 11.9 | 6.9 |
| 10.0-20.0 (Medium) | None | None |
| >20.0 (Large) | None | None |

9 Distance violation analysis [i](#)

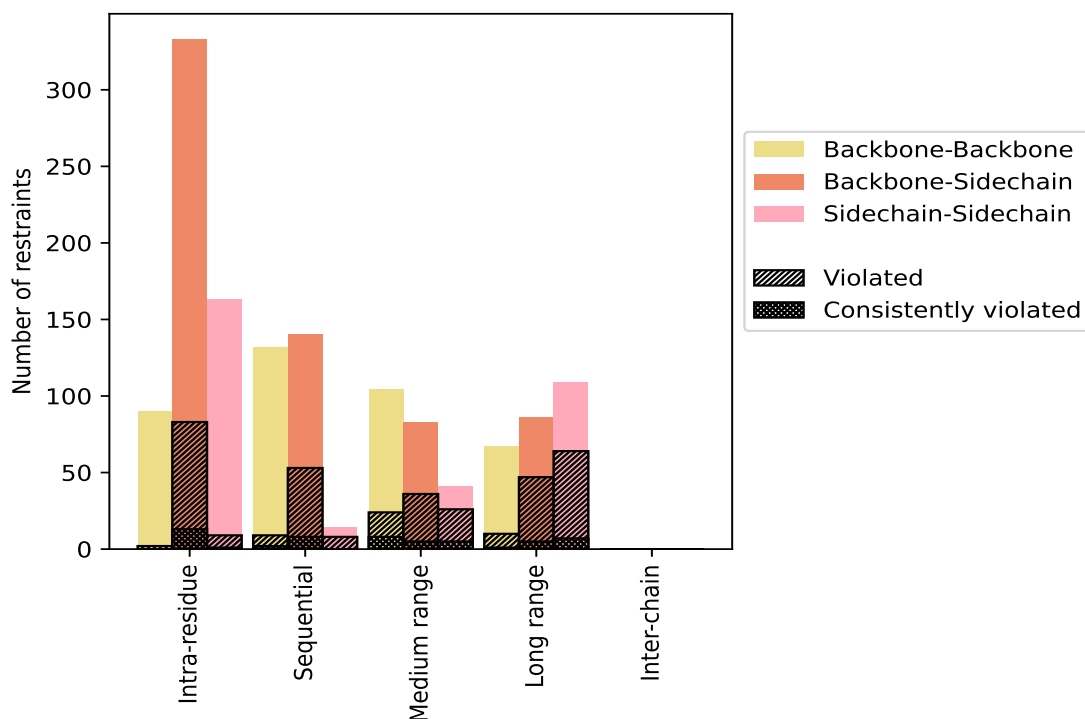
9.1 Summary of distance violations [i](#)

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

| Restrains type | Count | % ¹ | Violated ³ | | | Consistently Violated ⁴ | | |
|---|-------------|----------------|-----------------------|----------------|----------------|------------------------------------|----------------|----------------|
| | | | Count | % ² | % ¹ | Count | % ² | % ¹ |
| Intra-residue ($i-j =0$) | 586 | 43.0 | 94 | 16.0 | 6.9 | 14 | 2.4 | 1.0 |
| Backbone-Backbone | 90 | 6.6 | 2 | 2.2 | 0.1 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 333 | 24.4 | 83 | 24.9 | 6.1 | 13 | 3.9 | 1.0 |
| Sidechain-Sidechain | 163 | 12.0 | 9 | 5.5 | 0.7 | 1 | 0.6 | 0.1 |
| Sequential ($i-j =1$) | 286 | 21.0 | 70 | 24.5 | 5.1 | 10 | 3.5 | 0.7 |
| Backbone-Backbone | 132 | 9.7 | 9 | 6.8 | 0.7 | 2 | 1.5 | 0.1 |
| Backbone-Sidechain | 140 | 10.3 | 53 | 37.9 | 3.9 | 8 | 5.7 | 0.6 |
| Sidechain-Sidechain | 14 | 1.0 | 8 | 57.1 | 0.6 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Medium range ($i-j >1$ & $i-j <5$) | 187 | 13.7 | 73 | 39.0 | 5.4 | 14 | 7.5 | 1.0 |
| Backbone-Backbone | 63 | 4.6 | 11 | 17.5 | 0.8 | 4 | 6.3 | 0.3 |
| Backbone-Sidechain | 83 | 6.1 | 36 | 43.4 | 2.6 | 5 | 6.0 | 0.4 |
| Sidechain-Sidechain | 41 | 3.0 | 26 | 63.4 | 1.9 | 5 | 12.2 | 0.4 |
| Long range ($i-j \geq 5$) | 242 | 17.8 | 121 | 50.0 | 8.9 | 13 | 5.4 | 1.0 |
| Backbone-Backbone | 47 | 3.5 | 10 | 21.3 | 0.7 | 1 | 2.1 | 0.1 |
| Backbone-Sidechain | 86 | 6.3 | 47 | 54.7 | 3.5 | 5 | 5.8 | 0.4 |
| Sidechain-Sidechain | 109 | 8.0 | 64 | 58.7 | 4.7 | 7 | 6.4 | 0.5 |
| Inter-chain | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Backbone | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Sidechain-Sidechain | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Hydrogen bond | 61 | 4.5 | 13 | 21.3 | 1.0 | 4 | 6.6 | 0.3 |
| Disulfide bond | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Total | 1362 | 100.0 | 371 | 27.2 | 27.2 | 55 | 4.0 | 4.0 |
| Backbone-Backbone | 393 | 28.9 | 45 | 11.5 | 3.3 | 11 | 2.8 | 0.8 |
| Backbone-Sidechain | 642 | 47.1 | 219 | 34.1 | 16.1 | 31 | 4.8 | 2.3 |
| Sidechain-Sidechain | 327 | 24.0 | 107 | 32.7 | 7.9 | 13 | 4.0 | 1.0 |

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

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



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

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

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

| Model ID | Number of violations | | | | | | Mean (Å) | Max (Å) | SD ⁶ (Å) | Median (Å) |
|----------|----------------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-------|----------|---------|---------------------|------------|
| | IR ¹ | SQ ² | MR ³ | LR ⁴ | IC ⁵ | Total | | | | |
| 1 | 36 | 30 | 48 | 45 | 0 | 159 | 0.44 | 1.86 | 0.4 | 0.27 |
| 2 | 43 | 38 | 47 | 48 | 0 | 176 | 0.54 | 1.85 | 0.47 | 0.32 |
| 3 | 41 | 36 | 47 | 46 | 0 | 170 | 0.47 | 3.05 | 0.47 | 0.27 |
| 4 | 40 | 36 | 42 | 51 | 0 | 169 | 0.56 | 3.31 | 0.54 | 0.29 |
| 5 | 40 | 29 | 41 | 46 | 0 | 156 | 0.46 | 2.48 | 0.43 | 0.29 |
| 6 | 33 | 34 | 45 | 45 | 0 | 157 | 0.47 | 2.4 | 0.43 | 0.29 |
| 7 | 40 | 41 | 48 | 65 | 0 | 194 | 0.59 | 3.35 | 0.59 | 0.34 |
| 8 | 46 | 39 | 43 | 44 | 0 | 172 | 0.55 | 2.46 | 0.5 | 0.32 |
| 9 | 36 | 37 | 42 | 58 | 0 | 173 | 0.6 | 3.48 | 0.58 | 0.34 |
| 10 | 29 | 32 | 50 | 44 | 0 | 155 | 0.49 | 1.96 | 0.47 | 0.27 |
| 11 | 37 | 30 | 48 | 37 | 0 | 152 | 0.5 | 2.11 | 0.48 | 0.27 |

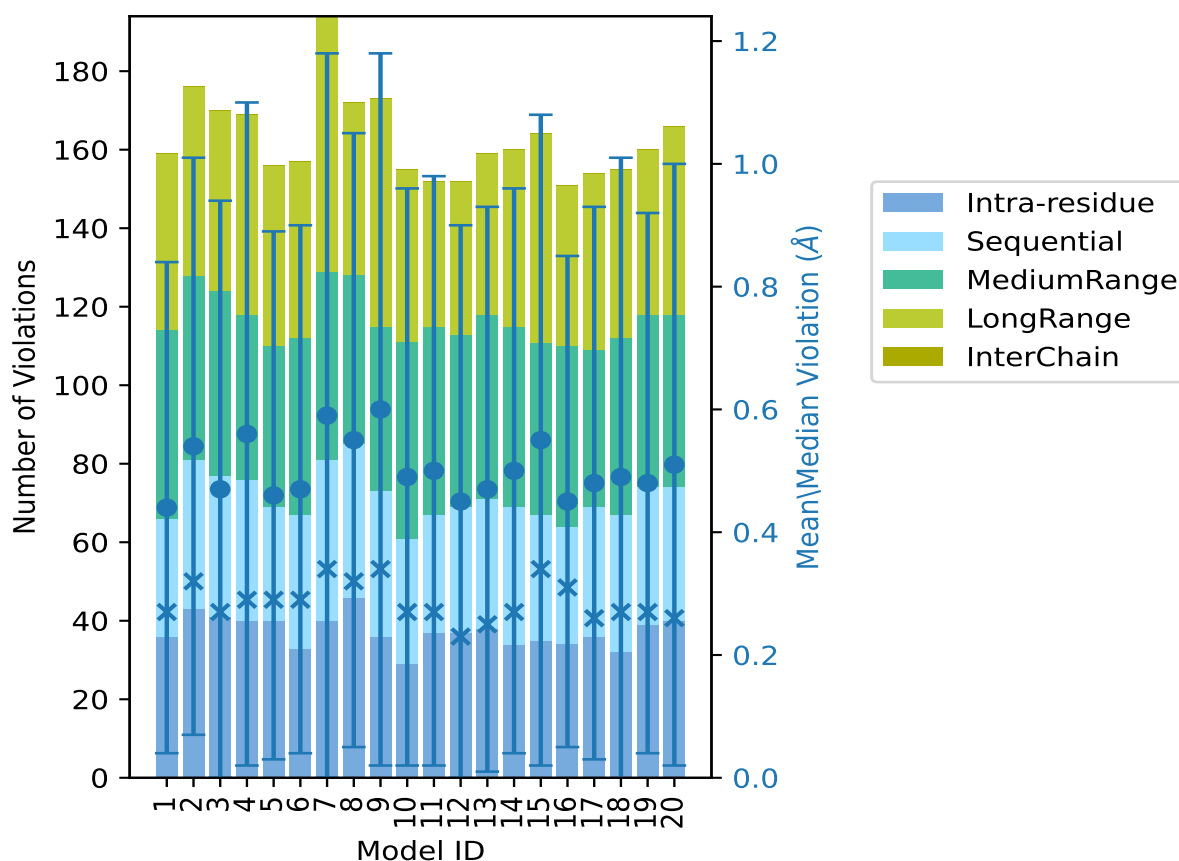
Continued on next page...

Continued from previous page...

| Model ID | Number of violations | | | | | Total | Mean (Å) | Max (Å) | SD ⁶ (Å) | Median (Å) |
|----------|----------------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-------|----------|---------|---------------------|------------|
| | IR ¹ | SQ ² | MR ³ | LR ⁴ | IC ⁵ | | | | | |
| 12 | 37 | 32 | 44 | 39 | 0 | 152 | 0.45 | 2.6 | 0.45 | 0.23 |
| 13 | 38 | 33 | 47 | 41 | 0 | 159 | 0.47 | 2.01 | 0.46 | 0.25 |
| 14 | 34 | 35 | 46 | 45 | 0 | 160 | 0.5 | 2.06 | 0.46 | 0.27 |
| 15 | 35 | 32 | 44 | 53 | 0 | 164 | 0.55 | 2.43 | 0.53 | 0.34 |
| 16 | 34 | 30 | 46 | 41 | 0 | 151 | 0.45 | 2.12 | 0.4 | 0.31 |
| 17 | 36 | 33 | 40 | 45 | 0 | 154 | 0.48 | 1.83 | 0.45 | 0.26 |
| 18 | 32 | 35 | 45 | 43 | 0 | 155 | 0.49 | 3.01 | 0.52 | 0.27 |
| 19 | 39 | 35 | 44 | 42 | 0 | 160 | 0.48 | 1.86 | 0.44 | 0.27 |
| 20 | 40 | 34 | 44 | 48 | 0 | 166 | 0.51 | 2.48 | 0.49 | 0.26 |

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



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

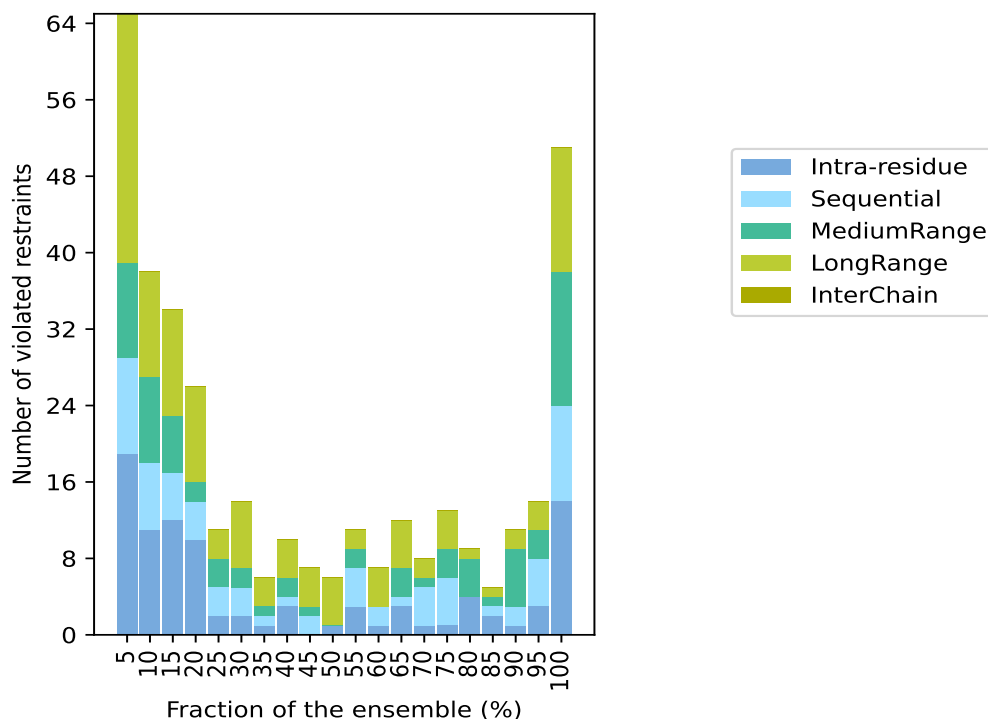
9.3 Distance violation statistics for the ensemble

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, 943(IR:492, SQ:216, MR:114, LR:121, 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 | % |
| 19 | 10 | 10 | 26 | 0 | 65 | 1 | 5.0 |
| 11 | 7 | 9 | 11 | 0 | 38 | 2 | 10.0 |
| 12 | 5 | 6 | 11 | 0 | 34 | 3 | 15.0 |
| 10 | 4 | 2 | 10 | 0 | 26 | 4 | 20.0 |
| 2 | 3 | 3 | 3 | 0 | 11 | 5 | 25.0 |
| 2 | 3 | 2 | 7 | 0 | 14 | 6 | 30.0 |
| 1 | 1 | 1 | 3 | 0 | 6 | 7 | 35.0 |
| 3 | 1 | 2 | 4 | 0 | 10 | 8 | 40.0 |
| 0 | 2 | 1 | 4 | 0 | 7 | 9 | 45.0 |
| 1 | 0 | 0 | 5 | 0 | 6 | 10 | 50.0 |
| 3 | 4 | 2 | 2 | 0 | 11 | 11 | 55.0 |
| 1 | 2 | 0 | 4 | 0 | 7 | 12 | 60.0 |
| 3 | 1 | 3 | 5 | 0 | 12 | 13 | 65.0 |
| 1 | 4 | 1 | 2 | 0 | 8 | 14 | 70.0 |
| 1 | 5 | 3 | 4 | 0 | 13 | 15 | 75.0 |
| 4 | 0 | 4 | 1 | 0 | 9 | 16 | 80.0 |
| 2 | 1 | 1 | 1 | 0 | 5 | 17 | 85.0 |
| 1 | 2 | 6 | 2 | 0 | 11 | 18 | 90.0 |
| 3 | 5 | 3 | 3 | 0 | 14 | 19 | 95.0 |
| 14 | 10 | 14 | 13 | 0 | 51 | 20 | 100.0 |

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

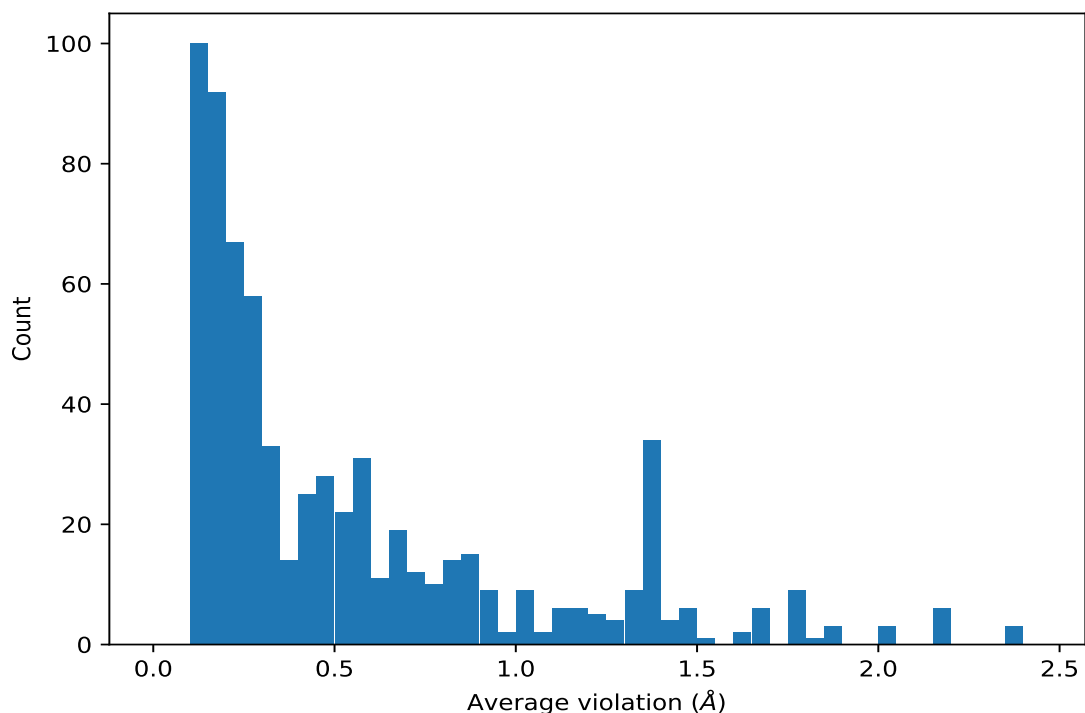
9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble [i](#)



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

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

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



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

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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG21 | 1:A:53:TYR:HB2 | 20 | 1.66 | 0.03 | 1.66 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG23 | 1:A:53:TYR:HB2 | 20 | 1.66 | 0.03 | 1.66 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG22 | 1:A:53:TYR:HB2 | 20 | 1.66 | 0.03 | 1.66 |
| (2,747) | 1:A:95:ILE:HG12 | 1:A:99:ILE:HG12 | 20 | 1.61 | 0.23 | 1.51 |
| (2,299) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:53:TYR:HB3 | 20 | 1.61 | 0.04 | 1.6 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG23 | 20 | 1.38 | 0.26 | 1.36 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG21 | 20 | 1.38 | 0.26 | 1.36 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG22 | 20 | 1.38 | 0.26 | 1.36 |
| (2,576) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:THR:HA | 20 | 1.37 | 0.55 | 1.71 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG13 | 20 | 1.35 | 1.06 | 1.5 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG11 | 20 | 1.35 | 1.06 | 1.5 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG12 | 20 | 1.35 | 1.06 | 1.5 |
| (2,938) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:21:VAL:H | 20 | 1.29 | 0.29 | 1.38 |
| (2,377) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:92:PRO:HG2 | 20 | 1.25 | 0.08 | 1.25 |
| (2,825) | 1:A:54:LYS:HB2 | 1:A:26:TYR:HB2 | 20 | 1.21 | 0.7 | 1.02 |
| (2,821) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:82:LYS:H | 20 | 1.19 | 0.35 | 1.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,976) | 1:A:39:MET:H | 1:A:36:ILE:HG13 | 20 | 1.16 | 0.08 | 1.15 |
| (2,443) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:43:PHE:HB2 | 20 | 0.97 | 0.22 | 0.87 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG21 | 1:A:92:PRO:HG2 | 20 | 0.88 | 0.34 | 0.71 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG23 | 1:A:92:PRO:HG2 | 20 | 0.88 | 0.34 | 0.71 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG22 | 1:A:92:PRO:HG2 | 20 | 0.88 | 0.34 | 0.71 |
| (2,624) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 20 | 0.82 | 0.16 | 0.86 |
| (2,823) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:83:GLU:HA | 20 | 0.81 | 0.23 | 0.86 |
| (2,399) | 1:A:65:GLN:HG3 | 1:A:61:GLY:HA3 | 20 | 0.81 | 0.43 | 1.08 |
| (2,494) | 1:A:60:LEU:HB3 | 1:A:55:LEU:HB2 | 20 | 0.76 | 0.2 | 0.74 |
| (2,55) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:24:ALA:HA | 20 | 0.7 | 0.13 | 0.72 |
| (2,55) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:HA | 20 | 0.7 | 0.13 | 0.72 |
| (2,890) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:36:ILE:HG13 | 20 | 0.67 | 0.06 | 0.66 |
| (2,1272) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:91:ASN:HB3 | 20 | 0.64 | 0.02 | 0.64 |
| (2,992) | 1:A:43:PHE:HB3 | 1:A:44:SER:H | 20 | 0.6 | 0.08 | 0.59 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:60:LEU:HB2 | 20 | 0.6 | 0.04 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:60:LEU:HB2 | 20 | 0.6 | 0.04 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:60:LEU:HB2 | 20 | 0.6 | 0.04 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB3 | 20 | 0.6 | 0.04 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB1 | 20 | 0.6 | 0.04 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB2 | 20 | 0.6 | 0.04 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB3 | 20 | 0.6 | 0.04 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB1 | 20 | 0.6 | 0.04 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB2 | 20 | 0.6 | 0.04 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB3 | 20 | 0.6 | 0.04 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB1 | 20 | 0.6 | 0.04 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB2 | 20 | 0.6 | 0.04 | 0.6 |
| (2,912) | 1:A:17:GLN:H | 1:A:17:GLN:HB3 | 20 | 0.54 | 0.01 | 0.54 |
| (1,13) | 1:A:38:PRO:N | 1:A:34:LYS:O | 20 | 0.53 | 0.16 | 0.47 |
| (2,421) | 1:A:42:LYS:HA | 1:A:42:LYS:HB3 | 20 | 0.52 | 0.01 | 0.52 |
| (2,751) | 1:A:97:GLN:HA | 1:A:97:GLN:HB3 | 20 | 0.51 | 0.03 | 0.52 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB1 | 1:A:97:GLN:HB2 | 20 | 0.49 | 0.16 | 0.48 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB3 | 1:A:97:GLN:HB2 | 20 | 0.49 | 0.16 | 0.48 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB2 | 1:A:97:GLN:HB2 | 20 | 0.49 | 0.16 | 0.48 |
| (2,990) | 1:A:42:LYS:HB2 | 1:A:43:PHE:H | 20 | 0.47 | 0.09 | 0.48 |
| (2,316) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:55:LEU:H | 20 | 0.44 | 0.12 | 0.42 |
| (2,858) | 1:A:5:PHE:HB3 | 1:A:5:PHE:H | 20 | 0.4 | 0.02 | 0.4 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD11 | 20 | 0.38 | 0.13 | 0.32 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD12 | 20 | 0.38 | 0.13 | 0.32 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD13 | 20 | 0.38 | 0.13 | 0.32 |
| (2,1171) | 1:A:86:LYS:HB2 | 1:A:86:LYS:H | 20 | 0.38 | 0.12 | 0.4 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB1 | 1:A:77:LEU:H | 20 | 0.33 | 0.04 | 0.34 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB3 | 1:A:77:LEU:H | 20 | 0.33 | 0.04 | 0.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB2 | 1:A:77:LEU:H | 20 | 0.33 | 0.04 | 0.34 |
| (2,1023) | 1:A:53:TYR:H | 1:A:53:TYR:HB3 | 20 | 0.32 | 0.02 | 0.33 |
| (2,376) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:36:ILE:HG13 | 20 | 0.3 | 0.1 | 0.3 |
| (2,31) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:39:MET:HB2 | 20 | 0.3 | 0.03 | 0.3 |
| (2,31) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:42:LYS:HB2 | 20 | 0.3 | 0.03 | 0.3 |
| (2,185) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:10:GLU:H | 20 | 0.29 | 0.03 | 0.29 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB1 | 20 | 0.26 | 0.03 | 0.26 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB2 | 20 | 0.26 | 0.03 | 0.26 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB3 | 20 | 0.26 | 0.03 | 0.26 |
| (2,676) | 1:A:86:LYS:HB3 | 1:A:86:LYS:HA | 20 | 0.26 | 0.01 | 0.26 |
| (2,740) | 1:A:95:ILE:HB | 1:A:96:LYS:H | 20 | 0.25 | 0.02 | 0.26 |
| (1,14) | 1:A:39:MET:H | 1:A:35:MET:O | 20 | 0.25 | 0.03 | 0.25 |
| (2,753) | 1:A:98:ALA:HA | 1:A:99:ILE:H | 20 | 0.23 | 0.02 | 0.23 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG21 | 20 | 0.22 | 0.04 | 0.22 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG22 | 20 | 0.22 | 0.04 | 0.22 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG23 | 20 | 0.22 | 0.04 | 0.22 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG21 | 20 | 0.22 | 0.04 | 0.22 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG22 | 20 | 0.22 | 0.04 | 0.22 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG23 | 20 | 0.22 | 0.04 | 0.22 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG21 | 20 | 0.22 | 0.04 | 0.22 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG22 | 20 | 0.22 | 0.04 | 0.22 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG23 | 20 | 0.22 | 0.04 | 0.22 |
| (2,532) | 1:A:60:LEU:HA | 1:A:60:LEU:HB2 | 20 | 0.22 | 0.01 | 0.22 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB1 | 20 | 0.21 | 0.04 | 0.22 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB3 | 20 | 0.21 | 0.04 | 0.22 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB2 | 20 | 0.21 | 0.04 | 0.22 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD13 | 20 | 0.21 | 0.05 | 0.21 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD11 | 20 | 0.21 | 0.05 | 0.21 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD12 | 20 | 0.21 | 0.05 | 0.21 |
| (2,754) | 1:A:98:ALA:HA | 1:A:102:ASN:H | 20 | 0.21 | 0.06 | 0.2 |
| (2,854) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB2 | 20 | 0.19 | 0.03 | 0.2 |
| (1,15) | 1:A:39:MET:N | 1:A:35:MET:O | 20 | 0.19 | 0.03 | 0.19 |
| (2,1224) | 1:A:100:ALA:H | 1:A:102:ASN:H | 20 | 0.19 | 0.02 | 0.19 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG11 | 20 | 0.18 | 0.07 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG13 | 20 | 0.18 | 0.07 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG12 | 20 | 0.18 | 0.07 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG11 | 20 | 0.18 | 0.07 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG13 | 20 | 0.18 | 0.07 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG12 | 20 | 0.18 | 0.07 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG11 | 20 | 0.18 | 0.07 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG13 | 20 | 0.18 | 0.07 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG12 | 20 | 0.18 | 0.07 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,1011) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:51:ASP:H | 20 | 0.18 | 0.03 | 0.2 |
| (2,487) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:75:LEU:HB2 | 20 | 0.17 | 0.01 | 0.17 |
| (2,94) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:14:ALA:HA | 20 | 0.17 | 0.03 | 0.17 |
| (2,94) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:13:SER:HA | 20 | 0.17 | 0.03 | 0.17 |
| (1,47) | 1:A:79:LYS:H | 1:A:83:GLU:O | 20 | 0.16 | 0.02 | 0.15 |
| (2,933) | 1:A:19:LYS:HG2 | 1:A:20:LEU:H | 19 | 1.26 | 0.31 | 1.36 |
| (2,766) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:96:LYS:HD2 | 19 | 0.74 | 0.71 | 0.24 |
| (2,270) | 1:A:19:LYS:HA | 1:A:19:LYS:HE3 | 19 | 0.55 | 0.56 | 0.27 |
| (2,586) | 1:A:68:GLU:HA | 1:A:68:GLU:HB2 | 19 | 0.54 | 0.0 | 0.54 |
| (2,969) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:33:CYS:H | 19 | 0.49 | 0.16 | 0.5 |
| (2,827) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:54:LYS:HD2 | 19 | 0.47 | 0.51 | 0.24 |
| (2,1029) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:53:TYR:HB2 | 19 | 0.41 | 0.15 | 0.44 |
| (2,401) | 1:A:40:ILE:HA | 1:A:43:PHE:HB3 | 19 | 0.35 | 0.14 | 0.37 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG12 | 19 | 0.25 | 0.2 | 0.17 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG11 | 19 | 0.25 | 0.2 | 0.17 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG13 | 19 | 0.25 | 0.2 | 0.17 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG11 | 19 | 0.22 | 0.05 | 0.23 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG12 | 19 | 0.22 | 0.05 | 0.23 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG13 | 19 | 0.22 | 0.05 | 0.23 |
| (2,539) | 1:A:77:LEU:HG | 1:A:76:LEU:HA | 19 | 0.2 | 0.02 | 0.2 |
| (1,22) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:41:GLU:O | 19 | 0.2 | 0.04 | 0.19 |
| (2,420) | 1:A:42:LYS:HA | 1:A:44:SER:H | 19 | 0.2 | 0.04 | 0.2 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:100:ALA:H | 19 | 0.18 | 0.03 | 0.18 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:100:ALA:H | 19 | 0.18 | 0.03 | 0.18 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:100:ALA:H | 19 | 0.18 | 0.03 | 0.18 |
| (2,685) | 1:A:84:VAL:HA | 1:A:84:VAL:HB | 19 | 0.12 | 0.01 | 0.13 |
| (2,537) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:63:VAL:HB | 18 | 1.84 | 0.02 | 1.84 |
| (2,822) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:83:GLU:H | 18 | 1.04 | 0.23 | 1.09 |
| (2,1294) | 1:A:52:PHE:HE2 | 1:A:44:SER:HB3 | 18 | 0.87 | 0.67 | 0.86 |
| (2,1294) | 1:A:52:PHE:HE1 | 1:A:44:SER:HB3 | 18 | 0.87 | 0.67 | 0.86 |
| (2,104) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:43:PHE:HB3 | 18 | 0.76 | 0.16 | 0.8 |
| (2,104) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:44:SER:HB2 | 18 | 0.76 | 0.16 | 0.8 |
| (2,441) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:43:PHE:H | 18 | 0.61 | 0.42 | 0.29 |
| (2,847) | 1:A:3:THR:H | 1:A:53:TYR:HB2 | 18 | 0.45 | 0.12 | 0.43 |
| (2,1055) | 1:A:60:LEU:H | 1:A:59:GLU:HB3 | 18 | 0.41 | 0.14 | 0.38 |
| (2,839) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:31:GLY:HA2 | 18 | 0.3 | 0.07 | 0.3 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB3 | 18 | 0.24 | 0.05 | 0.24 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB1 | 18 | 0.24 | 0.05 | 0.24 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB2 | 18 | 0.24 | 0.05 | 0.24 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD21 | 18 | 0.19 | 0.08 | 0.16 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD22 | 18 | 0.19 | 0.08 | 0.16 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD23 | 18 | 0.19 | 0.08 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD21 | 18 | 0.19 | 0.08 | 0.16 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD23 | 18 | 0.19 | 0.08 | 0.16 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD22 | 18 | 0.19 | 0.08 | 0.16 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG23 | 18 | 0.19 | 0.08 | 0.16 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG21 | 18 | 0.19 | 0.08 | 0.16 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG22 | 18 | 0.19 | 0.08 | 0.16 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD13 | 18 | 0.19 | 0.08 | 0.16 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD11 | 18 | 0.19 | 0.08 | 0.16 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD12 | 18 | 0.19 | 0.08 | 0.16 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG11 | 18 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG13 | 18 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG12 | 18 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,1050) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:59:GLU:H | 17 | 0.69 | 0.04 | 0.69 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:43:PHE:HD2 | 17 | 0.27 | 0.14 | 0.25 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:43:PHE:HD1 | 17 | 0.27 | 0.14 | 0.25 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:47:TYR:HD2 | 17 | 0.27 | 0.14 | 0.25 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:47:TYR:HD1 | 17 | 0.27 | 0.14 | 0.25 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG11 | 17 | 0.21 | 0.06 | 0.21 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG12 | 17 | 0.21 | 0.06 | 0.21 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG13 | 17 | 0.21 | 0.06 | 0.21 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:H | 17 | 0.18 | 0.11 | 0.14 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:H | 17 | 0.18 | 0.11 | 0.14 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:H | 17 | 0.18 | 0.11 | 0.14 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD13 | 17 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD11 | 17 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD12 | 17 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG13 | 1:A:52:PHE:HB3 | 16 | 0.76 | 0.52 | 0.96 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG12 | 1:A:52:PHE:HB3 | 16 | 0.76 | 0.52 | 0.96 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG11 | 1:A:52:PHE:HB3 | 16 | 0.76 | 0.52 | 0.96 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:61:GLY:HA3 | 16 | 0.6 | 0.44 | 0.45 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:61:GLY:HA3 | 16 | 0.6 | 0.44 | 0.45 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:61:GLY:HA3 | 16 | 0.6 | 0.44 | 0.45 |
| (2,364) | 1:A:46:GLN:HA | 1:A:46:GLN:HB2 | 16 | 0.45 | 0.15 | 0.37 |
| (2,1243) | 1:A:4:GLN:HE21 | 1:A:6:LYS:HB3 | 16 | 0.38 | 0.03 | 0.37 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD11 | 16 | 0.31 | 0.0 | 0.31 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD13 | 16 | 0.31 | 0.0 | 0.31 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD12 | 16 | 0.31 | 0.0 | 0.31 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:57:VAL:H | 16 | 0.2 | 0.04 | 0.18 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:57:VAL:H | 16 | 0.2 | 0.04 | 0.18 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:57:VAL:H | 16 | 0.2 | 0.04 | 0.18 |
| (2,582) | 1:A:66:LYS:HB3 | 1:A:66:LYS:H | 16 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:23:VAL:H | 16 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:23:VAL:H | 16 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:23:VAL:H | 16 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (2,1202) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:42:LYS:H | 16 | 0.15 | 0.04 | 0.14 |
| (2,894) | 1:A:13:SER:H | 1:A:12:ASP:HB2 | 15 | 0.82 | 0.05 | 0.82 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG12 | 15 | 0.72 | 0.51 | 0.42 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG11 | 15 | 0.72 | 0.51 | 0.42 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG13 | 15 | 0.72 | 0.51 | 0.42 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 15 | 0.45 | 0.4 | 0.14 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 15 | 0.45 | 0.4 | 0.14 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 15 | 0.45 | 0.4 | 0.14 |
| (2,197) | 1:A:9:SER:HA | 1:A:12:ASP:HB2 | 15 | 0.36 | 0.19 | 0.27 |
| (2,928) | 1:A:19:LYS:H | 1:A:18:ASP:HB2 | 15 | 0.28 | 0.14 | 0.26 |
| (2,1002) | 1:A:47:TYR:H | 1:A:44:SER:H | 15 | 0.22 | 0.05 | 0.22 |
| (2,1013) | 1:A:51:ASP:H | 1:A:51:ASP:HB3 | 15 | 0.21 | 0.05 | 0.22 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:92:PRO:HA | 15 | 0.18 | 0.04 | 0.17 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:92:PRO:HA | 15 | 0.18 | 0.04 | 0.17 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:92:PRO:HA | 15 | 0.18 | 0.04 | 0.17 |
| (2,1139) | 1:A:80:ASN:H | 1:A:79:LYS:HB3 | 15 | 0.17 | 0.04 | 0.17 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG21 | 15 | 0.16 | 0.03 | 0.17 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG23 | 15 | 0.16 | 0.03 | 0.17 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG22 | 15 | 0.16 | 0.03 | 0.17 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:21:VAL:HB | 15 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:21:VAL:HB | 15 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:21:VAL:HB | 15 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (2,1148) | 1:A:79:LYS:H | 1:A:82:LYS:H | 15 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB2 | 15 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB1 | 15 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB3 | 15 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:58:ASP:HB2 | 14 | 1.1 | 1.14 | 1.05 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:58:ASP:HB2 | 14 | 1.1 | 1.14 | 1.05 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:58:ASP:HB2 | 14 | 1.1 | 1.14 | 1.05 |
| (2,1190) | 1:A:96:LYS:H | 1:A:96:LYS:HB3 | 14 | 0.88 | 0.05 | 0.88 |
| (2,1199) | 1:A:97:GLN:H | 1:A:96:LYS:HB3 | 14 | 0.5 | 0.17 | 0.49 |
| (2,679) | 1:A:82:LYS:HB3 | 1:A:83:GLU:H | 14 | 0.46 | 0.15 | 0.52 |
| (2,683) | 1:A:46:GLN:HA | 1:A:47:TYR:H | 14 | 0.34 | 0.18 | 0.32 |
| (2,749) | 1:A:96:LYS:HA | 1:A:43:PHE:HD2 | 14 | 0.28 | 0.26 | 0.22 |
| (2,749) | 1:A:96:LYS:HA | 1:A:43:PHE:HD1 | 14 | 0.28 | 0.26 | 0.22 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD13 | 14 | 0.19 | 0.18 | 0.14 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD11 | 14 | 0.19 | 0.18 | 0.14 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD12 | 14 | 0.19 | 0.18 | 0.14 |
| (1,24) | 1:A:46:GLN:H | 1:A:42:LYS:O | 14 | 0.18 | 0.04 | 0.17 |
| (2,317) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:74:THR:H | 14 | 0.16 | 0.06 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,833) | 1:A:31:GLY:HA3 | 1:A:34:LYS:HB3 | 13 | 1.03 | 0.75 | 1.6 |
| (2,407) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:54:LYS:HD2 | 13 | 0.55 | 0.47 | 0.25 |
| (2,407) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:54:LYS:HD2 | 13 | 0.55 | 0.47 | 0.25 |
| (2,407) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:54:LYS:HD2 | 13 | 0.55 | 0.47 | 0.25 |
| (2,438) | 1:A:46:GLN:HB3 | 1:A:43:PHE:HA | 13 | 0.49 | 0.25 | 0.64 |
| (2,677) | 1:A:86:LYS:HG2 | 1:A:86:LYS:HA | 13 | 0.48 | 0.13 | 0.45 |
| (2,873) | 1:A:7:THR:H | 1:A:5:PHE:HB2 | 13 | 0.26 | 0.09 | 0.24 |
| (2,46) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:2:VAL:HG23 | 13 | 0.25 | 0.21 | 0.17 |
| (2,46) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:2:VAL:HG21 | 13 | 0.25 | 0.21 | 0.17 |
| (2,46) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:2:VAL:HG22 | 13 | 0.25 | 0.21 | 0.17 |
| (2,46) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:77:LEU:HD21 | 13 | 0.25 | 0.21 | 0.17 |
| (2,46) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:77:LEU:HD23 | 13 | 0.25 | 0.21 | 0.17 |
| (2,46) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:77:LEU:HD22 | 13 | 0.25 | 0.21 | 0.17 |
| (2,456) | 1:A:85:ALA:HB1 | 1:A:97:GLN:HE22 | 13 | 0.25 | 0.29 | 0.15 |
| (2,456) | 1:A:85:ALA:HB2 | 1:A:97:GLN:HE22 | 13 | 0.25 | 0.29 | 0.15 |
| (2,456) | 1:A:85:ALA:HB3 | 1:A:97:GLN:HE22 | 13 | 0.25 | 0.29 | 0.15 |
| (2,1281) | 1:A:102:ASN:HD21 | 1:A:20:LEU:HD21 | 13 | 0.24 | 0.39 | 0.14 |
| (2,1281) | 1:A:102:ASN:HD21 | 1:A:20:LEU:HD22 | 13 | 0.24 | 0.39 | 0.14 |
| (2,1281) | 1:A:102:ASN:HD21 | 1:A:20:LEU:HD23 | 13 | 0.24 | 0.39 | 0.14 |
| (2,409) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:40:ILE:H | 13 | 0.23 | 0.04 | 0.23 |
| (2,409) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:40:ILE:H | 13 | 0.23 | 0.04 | 0.23 |
| (2,409) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:40:ILE:H | 13 | 0.23 | 0.04 | 0.23 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ALA:HB3 | 13 | 0.18 | 0.04 | 0.17 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ALA:HB1 | 13 | 0.18 | 0.04 | 0.17 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ALA:HB2 | 13 | 0.18 | 0.04 | 0.17 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ALA:HB3 | 13 | 0.18 | 0.04 | 0.17 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ALA:HB1 | 13 | 0.18 | 0.04 | 0.17 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ALA:HB2 | 13 | 0.18 | 0.04 | 0.17 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ALA:HB3 | 13 | 0.18 | 0.04 | 0.17 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ALA:HB1 | 13 | 0.18 | 0.04 | 0.17 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ALA:HB2 | 13 | 0.18 | 0.04 | 0.17 |
| (2,498) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HG | 13 | 0.18 | 0.03 | 0.17 |
| (2,1290) | 1:A:5:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 13 | 0.12 | 0.01 | 0.13 |
| (2,1290) | 1:A:5:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 13 | 0.12 | 0.01 | 0.13 |
| (2,1079) | 1:A:65:GLN:H | 1:A:66:LYS:HB2 | 12 | 0.57 | 0.64 | 0.13 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB3 | 1:A:47:TYR:HB2 | 12 | 0.52 | 0.62 | 0.28 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB1 | 1:A:47:TYR:HB2 | 12 | 0.52 | 0.62 | 0.28 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB2 | 1:A:47:TYR:HB2 | 12 | 0.52 | 0.62 | 0.28 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB3 | 1:A:47:TYR:HB3 | 12 | 0.52 | 0.62 | 0.28 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB1 | 1:A:47:TYR:HB3 | 12 | 0.52 | 0.62 | 0.28 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB2 | 1:A:47:TYR:HB3 | 12 | 0.52 | 0.62 | 0.28 |
| (2,1174) | 1:A:87:VAL:H | 1:A:86:LYS:HG2 | 12 | 0.39 | 0.27 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,406) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:2:VAL:HG13 | 12 | 0.31 | 0.33 | 0.18 |
| (2,406) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:2:VAL:HG12 | 12 | 0.31 | 0.33 | 0.18 |
| (2,406) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:2:VAL:HG11 | 12 | 0.31 | 0.33 | 0.18 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:5:PHE:HE2 | 12 | 0.31 | 0.47 | 0.17 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:5:PHE:HE1 | 12 | 0.31 | 0.47 | 0.17 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:5:PHE:HE2 | 12 | 0.31 | 0.47 | 0.17 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:5:PHE:HE1 | 12 | 0.31 | 0.47 | 0.17 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:5:PHE:HE2 | 12 | 0.31 | 0.47 | 0.17 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:5:PHE:HE1 | 12 | 0.31 | 0.47 | 0.17 |
| (2,357) | 1:A:29:TRP:HA | 1:A:29:TRP:HD1 | 12 | 0.19 | 0.04 | 0.18 |
| (2,826) | 1:A:87:VAL:HG21 | 1:A:95:ILE:HA | 12 | 0.18 | 0.17 | 0.13 |
| (2,826) | 1:A:87:VAL:HG23 | 1:A:95:ILE:HA | 12 | 0.18 | 0.17 | 0.13 |
| (2,826) | 1:A:87:VAL:HG22 | 1:A:95:ILE:HA | 12 | 0.18 | 0.17 | 0.13 |
| (2,998) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:46:GLN:HG3 | 11 | 1.22 | 0.7 | 1.39 |
| (2,717) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:74:THR:HA | 11 | 1.2 | 0.3 | 1.16 |
| (2,717) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:74:THR:HA | 11 | 1.2 | 0.3 | 1.16 |
| (2,717) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:74:THR:HA | 11 | 1.2 | 0.3 | 1.16 |
| (2,1154) | 1:A:82:LYS:HB3 | 1:A:82:LYS:H | 11 | 0.79 | 0.02 | 0.8 |
| (2,716) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:89:GLY:H | 11 | 0.65 | 0.03 | 0.64 |
| (2,716) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:89:GLY:H | 11 | 0.65 | 0.03 | 0.64 |
| (2,716) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:89:GLY:H | 11 | 0.65 | 0.03 | 0.64 |
| (2,384) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:54:LYS:HD2 | 11 | 0.48 | 0.32 | 0.3 |
| (2,384) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:54:LYS:HD2 | 11 | 0.48 | 0.32 | 0.3 |
| (2,384) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:54:LYS:HD2 | 11 | 0.48 | 0.32 | 0.3 |
| (2,446) | 1:A:47:TYR:HA | 1:A:47:TYR:HD2 | 11 | 0.25 | 0.07 | 0.21 |
| (2,446) | 1:A:47:TYR:HA | 1:A:47:TYR:HD1 | 11 | 0.25 | 0.07 | 0.21 |
| (2,461) | 1:A:51:ASP:HA | 1:A:47:TYR:HD2 | 11 | 0.18 | 0.05 | 0.17 |
| (2,461) | 1:A:51:ASP:HA | 1:A:47:TYR:HD1 | 11 | 0.18 | 0.05 | 0.17 |
| (2,47) | 1:A:94:ALA:HA | 1:A:97:GLN:HB2 | 11 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (2,47) | 1:A:94:ALA:HA | 1:A:97:GLN:HB3 | 11 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,34) | 1:A:98:ALA:H | 1:A:94:ALA:O | 11 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (2,34) | 1:A:42:LYS:HD3 | 1:A:43:PHE:HA | 11 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (2,34) | 1:A:42:LYS:HD2 | 1:A:43:PHE:HA | 11 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (2,319) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:25:PHE:HB2 | 11 | 0.12 | 0.01 | 0.13 |
| (2,536) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:60:LEU:HD13 | 11 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,536) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:60:LEU:HD11 | 11 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,536) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:60:LEU:HD12 | 11 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,154) | 1:A:2:VAL:HA | 1:A:52:PHE:HB3 | 10 | 1.52 | 0.13 | 1.56 |
| (2,155) | 1:A:2:VAL:HB | 1:A:44:SER:HB2 | 10 | 0.92 | 0.95 | 0.55 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB3 | 1:A:57:VAL:HB | 10 | 0.71 | 0.09 | 0.7 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB1 | 1:A:57:VAL:HB | 10 | 0.71 | 0.09 | 0.7 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB2 | 1:A:57:VAL:HB | 10 | 0.71 | 0.09 | 0.7 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB3 | 1:A:65:GLN:HG3 | 10 | 0.71 | 0.09 | 0.7 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB1 | 1:A:65:GLN:HG3 | 10 | 0.71 | 0.09 | 0.7 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB2 | 1:A:65:GLN:HG3 | 10 | 0.71 | 0.09 | 0.7 |
| (2,493) | 1:A:54:LYS:HE2 | 1:A:40:ILE:HG22 | 10 | 0.37 | 0.22 | 0.34 |
| (2,493) | 1:A:54:LYS:HE2 | 1:A:40:ILE:HG21 | 10 | 0.37 | 0.22 | 0.34 |
| (2,493) | 1:A:54:LYS:HE2 | 1:A:40:ILE:HG23 | 10 | 0.37 | 0.22 | 0.34 |
| (2,472) | 1:A:52:PHE:HA | 1:A:47:TYR:HD2 | 10 | 0.25 | 0.1 | 0.22 |
| (2,472) | 1:A:52:PHE:HA | 1:A:47:TYR:HD1 | 10 | 0.25 | 0.1 | 0.22 |
| (2,1038) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:56:ASP:HB2 | 10 | 0.16 | 0.04 | 0.15 |
| (2,161) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:52:PHE:HB3 | 9 | 1.23 | 0.29 | 1.32 |
| (2,161) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:52:PHE:HB3 | 9 | 1.23 | 0.29 | 1.32 |
| (2,161) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:52:PHE:HB3 | 9 | 1.23 | 0.29 | 1.32 |
| (2,496) | 1:A:54:LYS:HE2 | 1:A:2:VAL:HB | 9 | 1.2 | 0.57 | 1.32 |
| (2,1260) | 1:A:80:ASN:HD21 | 1:A:79:LYS:HB2 | 9 | 0.56 | 0.2 | 0.56 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:21:VAL:HA | 9 | 0.34 | 0.59 | 0.13 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:21:VAL:HA | 9 | 0.34 | 0.59 | 0.13 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:21:VAL:HA | 9 | 0.34 | 0.59 | 0.13 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HA | 9 | 0.34 | 0.59 | 0.13 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HA | 9 | 0.34 | 0.59 | 0.13 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HA | 9 | 0.34 | 0.59 | 0.13 |
| (2,440) | 1:A:46:GLN:HG2 | 1:A:43:PHE:HD2 | 9 | 0.3 | 0.16 | 0.24 |
| (2,440) | 1:A:46:GLN:HG2 | 1:A:43:PHE:HD1 | 9 | 0.3 | 0.16 | 0.24 |
| (2,479) | 1:A:2:VAL:HA | 1:A:53:TYR:HA | 9 | 0.17 | 0.04 | 0.17 |
| (1,7) | 1:A:35:MET:H | 1:A:31:GLY:O | 9 | 0.16 | 0.03 | 0.17 |
| (2,661) | 1:A:78:PHE:HB3 | 1:A:21:VAL:HB | 9 | 0.14 | 0.04 | 0.12 |
| (2,863) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 8 | 1.47 | 0.79 | 1.87 |
| (2,863) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 8 | 1.47 | 0.79 | 1.87 |
| (2,863) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 8 | 1.47 | 0.79 | 1.87 |
| (2,1044) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:56:ASP:HB2 | 8 | 1.28 | 0.13 | 1.3 |
| (2,453) | 1:A:50:ALA:HA | 1:A:20:LEU:HB2 | 8 | 0.79 | 0.24 | 0.82 |
| (2,898) | 1:A:14:ALA:H | 1:A:13:SER:HB2 | 8 | 0.71 | 0.05 | 0.7 |
| (2,719) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:86:LYS:HE3 | 8 | 0.68 | 0.37 | 0.68 |
| (2,719) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:86:LYS:HE3 | 8 | 0.68 | 0.37 | 0.68 |
| (2,719) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:86:LYS:HE3 | 8 | 0.68 | 0.37 | 0.68 |
| (2,1155) | 1:A:82:LYS:H | 1:A:82:LYS:HG2 | 8 | 0.46 | 0.21 | 0.48 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:20:LEU:HD21 | 8 | 0.41 | 0.73 | 0.14 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:20:LEU:HD22 | 8 | 0.41 | 0.73 | 0.14 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:20:LEU:HD23 | 8 | 0.41 | 0.73 | 0.14 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:20:LEU:HD21 | 8 | 0.41 | 0.73 | 0.14 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:20:LEU:HD22 | 8 | 0.41 | 0.73 | 0.14 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:20:LEU:HD23 | 8 | 0.41 | 0.73 | 0.14 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:20:LEU:HD21 | 8 | 0.41 | 0.73 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:20:LEU:HD22 | 8 | 0.41 | 0.73 | 0.14 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:20:LEU:HD23 | 8 | 0.41 | 0.73 | 0.14 |
| (2,926) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 8 | 0.14 | 0.01 | 0.13 |
| (2,926) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 8 | 0.14 | 0.01 | 0.13 |
| (2,926) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 8 | 0.14 | 0.01 | 0.13 |
| (2,654) | 1:A:78:PHE:HA | 1:A:85:ALA:H | 8 | 0.13 | 0.02 | 0.14 |
| (2,1164) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:84:VAL:H | 8 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,1164) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:84:VAL:H | 8 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,1164) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:84:VAL:H | 8 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:47:TYR:HE2 | 7 | 1.36 | 1.01 | 1.34 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:47:TYR:HE1 | 7 | 1.36 | 1.01 | 1.34 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:47:TYR:HE2 | 7 | 1.36 | 1.01 | 1.34 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:47:TYR:HE1 | 7 | 1.36 | 1.01 | 1.34 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:47:TYR:HE2 | 7 | 1.36 | 1.01 | 1.34 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:47:TYR:HE1 | 7 | 1.36 | 1.01 | 1.34 |
| (2,1235) | 1:A:33:CYS:H | 1:A:34:LYS:HB3 | 7 | 0.95 | 0.05 | 0.93 |
| (2,1261) | 1:A:80:ASN:HD22 | 1:A:82:LYS:HG2 | 7 | 0.86 | 0.26 | 0.92 |
| (2,546) | 1:A:62:ASP:HA | 1:A:62:ASP:HB3 | 7 | 0.5 | 0.0 | 0.5 |
| (2,508) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:56:ASP:HA | 7 | 0.17 | 0.03 | 0.16 |
| (2,1017) | 1:A:52:PHE:H | 1:A:47:TYR:HD2 | 7 | 0.16 | 0.04 | 0.14 |
| (2,1017) | 1:A:52:PHE:H | 1:A:47:TYR:HD1 | 7 | 0.16 | 0.04 | 0.14 |
| (2,502) | 1:A:55:LEU:HD11 | 1:A:5:PHE:HB3 | 6 | 1.02 | 0.11 | 1.0 |
| (2,502) | 1:A:55:LEU:HD12 | 1:A:5:PHE:HB3 | 6 | 1.02 | 0.11 | 1.0 |
| (2,502) | 1:A:55:LEU:HD13 | 1:A:5:PHE:HB3 | 6 | 1.02 | 0.11 | 1.0 |
| (2,477) | 1:A:52:PHE:HB2 | 1:A:47:TYR:HD2 | 6 | 0.88 | 0.26 | 0.84 |
| (2,477) | 1:A:52:PHE:HB2 | 1:A:47:TYR:HD1 | 6 | 0.88 | 0.26 | 0.84 |
| (2,411) | 1:A:40:ILE:HG22 | 1:A:54:LYS:HD2 | 6 | 0.81 | 0.42 | 0.81 |
| (2,411) | 1:A:40:ILE:HG21 | 1:A:54:LYS:HD2 | 6 | 0.81 | 0.42 | 0.81 |
| (2,411) | 1:A:40:ILE:HG23 | 1:A:54:LYS:HD2 | 6 | 0.81 | 0.42 | 0.81 |
| (2,861) | 1:A:5:PHE:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 6 | 0.55 | 0.14 | 0.56 |
| (2,861) | 1:A:5:PHE:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 6 | 0.55 | 0.14 | 0.56 |
| (2,861) | 1:A:5:PHE:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 6 | 0.55 | 0.14 | 0.56 |
| (2,583) | 1:A:66:LYS:HE2 | 1:A:8:ALA:HB1 | 6 | 0.51 | 0.22 | 0.4 |
| (2,583) | 1:A:66:LYS:HE2 | 1:A:8:ALA:HB2 | 6 | 0.51 | 0.22 | 0.4 |
| (2,583) | 1:A:66:LYS:HE2 | 1:A:8:ALA:HB3 | 6 | 0.51 | 0.22 | 0.4 |
| (2,503) | 1:A:5:PHE:HB2 | 1:A:55:LEU:HD11 | 6 | 0.51 | 0.14 | 0.54 |
| (2,503) | 1:A:5:PHE:HB2 | 1:A:55:LEU:HD12 | 6 | 0.51 | 0.14 | 0.54 |
| (2,503) | 1:A:5:PHE:HB2 | 1:A:55:LEU:HD13 | 6 | 0.51 | 0.14 | 0.54 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD11 | 1:A:23:VAL:HG21 | 6 | 0.49 | 0.1 | 0.47 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD11 | 1:A:23:VAL:HG23 | 6 | 0.49 | 0.1 | 0.47 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD11 | 1:A:23:VAL:HG22 | 6 | 0.49 | 0.1 | 0.47 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD12 | 1:A:23:VAL:HG21 | 6 | 0.49 | 0.1 | 0.47 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD12 | 1:A:23:VAL:HG23 | 6 | 0.49 | 0.1 | 0.47 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD12 | 1:A:23:VAL:HG22 | 6 | 0.49 | 0.1 | 0.47 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD13 | 1:A:23:VAL:HG21 | 6 | 0.49 | 0.1 | 0.47 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD13 | 1:A:23:VAL:HG23 | 6 | 0.49 | 0.1 | 0.47 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD13 | 1:A:23:VAL:HG22 | 6 | 0.49 | 0.1 | 0.47 |
| (2,775) | 1:A:99:ILE:HG21 | 1:A:96:LYS:HD2 | 6 | 0.3 | 0.05 | 0.3 |
| (2,775) | 1:A:99:ILE:HG22 | 1:A:96:LYS:HD2 | 6 | 0.3 | 0.05 | 0.3 |
| (2,775) | 1:A:99:ILE:HG23 | 1:A:96:LYS:HD2 | 6 | 0.3 | 0.05 | 0.3 |
| (2,1189) | 1:A:96:LYS:H | 1:A:96:LYS:HG3 | 6 | 0.21 | 0.03 | 0.22 |
| (2,695) | 1:A:87:VAL:HG12 | 1:A:89:GLY:H | 6 | 0.19 | 0.17 | 0.12 |
| (2,695) | 1:A:87:VAL:HG11 | 1:A:89:GLY:H | 6 | 0.19 | 0.17 | 0.12 |
| (2,695) | 1:A:87:VAL:HG13 | 1:A:89:GLY:H | 6 | 0.19 | 0.17 | 0.12 |
| (2,682) | 1:A:46:GLN:HA | 1:A:46:GLN:HG3 | 6 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (2,972) | 1:A:36:ILE:H | 1:A:35:MET:HB2 | 6 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (2,414) | 1:A:40:ILE:HG22 | 1:A:41:GLU:H | 6 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (2,414) | 1:A:40:ILE:HG21 | 1:A:41:GLU:H | 6 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (2,414) | 1:A:40:ILE:HG23 | 1:A:41:GLU:H | 6 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (2,767) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:100:ALA:H | 6 | 0.12 | 0.02 | 0.11 |
| (2,585) | 1:A:19:LYS:HE3 | 1:A:20:LEU:H | 5 | 1.42 | 0.29 | 1.55 |
| (2,37) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:42:LYS:HG2 | 5 | 1.05 | 0.5 | 1.42 |
| (2,37) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:42:LYS:HG3 | 5 | 1.05 | 0.5 | 1.42 |
| (2,1086) | 1:A:66:LYS:H | 1:A:66:LYS:HG3 | 5 | 0.69 | 0.43 | 1.03 |
| (2,284) | 1:A:20:LEU:HG | 1:A:22:VAL:HG11 | 5 | 0.57 | 0.87 | 0.13 |
| (2,284) | 1:A:20:LEU:HG | 1:A:22:VAL:HG13 | 5 | 0.57 | 0.87 | 0.13 |
| (2,284) | 1:A:20:LEU:HG | 1:A:22:VAL:HG12 | 5 | 0.57 | 0.87 | 0.13 |
| (2,958) | 1:A:26:TYR:H | 1:A:57:VAL:HG23 | 5 | 0.27 | 0.13 | 0.32 |
| (2,958) | 1:A:26:TYR:H | 1:A:57:VAL:HG21 | 5 | 0.27 | 0.13 | 0.32 |
| (2,958) | 1:A:26:TYR:H | 1:A:57:VAL:HG22 | 5 | 0.27 | 0.13 | 0.32 |
| (2,529) | 1:A:58:ASP:HB2 | 1:A:59:GLU:H | 5 | 0.22 | 0.05 | 0.21 |
| (2,85) | 1:A:90:ALA:HB3 | 1:A:32:PRO:HG2 | 5 | 0.14 | 0.02 | 0.15 |
| (2,85) | 1:A:90:ALA:HB1 | 1:A:32:PRO:HG2 | 5 | 0.14 | 0.02 | 0.15 |
| (2,85) | 1:A:90:ALA:HB2 | 1:A:32:PRO:HG2 | 5 | 0.14 | 0.02 | 0.15 |
| (2,85) | 1:A:90:ALA:HB3 | 1:A:32:PRO:HG3 | 5 | 0.14 | 0.02 | 0.15 |
| (2,85) | 1:A:90:ALA:HB1 | 1:A:32:PRO:HG3 | 5 | 0.14 | 0.02 | 0.15 |
| (2,85) | 1:A:90:ALA:HB2 | 1:A:32:PRO:HG3 | 5 | 0.14 | 0.02 | 0.15 |
| (2,191) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:11:PHE:HD1 | 5 | 0.14 | 0.02 | 0.15 |
| (2,191) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:11:PHE:HD2 | 5 | 0.14 | 0.02 | 0.15 |
| (2,1030) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:2:VAL:HB | 5 | 0.14 | 0.03 | 0.14 |
| (2,978) | 1:A:39:MET:HG3 | 1:A:39:MET:H | 5 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,267) | 1:A:19:LYS:HA | 1:A:20:LEU:H | 5 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG23 | 1:A:75:LEU:HD11 | 4 | 1.79 | 0.88 | 1.34 |
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG23 | 1:A:75:LEU:HD13 | 4 | 1.79 | 0.88 | 1.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG23 | 1:A:75:LEU:HD12 | 4 | 1.79 | 0.88 | 1.34 |
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG21 | 1:A:75:LEU:HD11 | 4 | 1.79 | 0.88 | 1.34 |
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG21 | 1:A:75:LEU:HD13 | 4 | 1.79 | 0.88 | 1.34 |
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG21 | 1:A:75:LEU:HD12 | 4 | 1.79 | 0.88 | 1.34 |
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG22 | 1:A:75:LEU:HD11 | 4 | 1.79 | 0.88 | 1.34 |
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG22 | 1:A:75:LEU:HD13 | 4 | 1.79 | 0.88 | 1.34 |
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG22 | 1:A:75:LEU:HD12 | 4 | 1.79 | 0.88 | 1.34 |
| (2,951) | 1:A:76:LEU:H | 1:A:75:LEU:HD11 | 4 | 1.47 | 0.14 | 1.53 |
| (2,951) | 1:A:76:LEU:H | 1:A:75:LEU:HD13 | 4 | 1.47 | 0.14 | 1.53 |
| (2,951) | 1:A:76:LEU:H | 1:A:75:LEU:HD12 | 4 | 1.47 | 0.14 | 1.53 |
| (2,276) | 1:A:25:PHE:HA | 1:A:57:VAL:HG23 | 4 | 1.4 | 0.73 | 1.77 |
| (2,276) | 1:A:25:PHE:HA | 1:A:57:VAL:HG21 | 4 | 1.4 | 0.73 | 1.77 |
| (2,276) | 1:A:25:PHE:HA | 1:A:57:VAL:HG22 | 4 | 1.4 | 0.73 | 1.77 |
| (2,318) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:75:LEU:HD11 | 4 | 1.37 | 0.19 | 1.46 |
| (2,318) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:75:LEU:HD13 | 4 | 1.37 | 0.19 | 1.46 |
| (2,318) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:75:LEU:HD12 | 4 | 1.37 | 0.19 | 1.46 |
| (2,555) | 1:A:63:VAL:HA | 1:A:66:LYS:HG3 | 4 | 0.88 | 0.39 | 1.06 |
| (2,1094) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LYS:HB2 | 4 | 0.76 | 0.06 | 0.78 |
| (2,1252) | 1:A:67:ASN:HD21 | 1:A:66:LYS:HB2 | 4 | 0.72 | 0.16 | 0.77 |
| (2,641) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:75:LEU:HD11 | 4 | 0.67 | 0.07 | 0.7 |
| (2,641) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:75:LEU:HD13 | 4 | 0.67 | 0.07 | 0.7 |
| (2,641) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:75:LEU:HD12 | 4 | 0.67 | 0.07 | 0.7 |
| (2,1085) | 1:A:66:LYS:HB2 | 1:A:66:LYS:H | 4 | 0.66 | 0.07 | 0.62 |
| (2,1246) | 1:A:67:ASN:HD22 | 1:A:66:LYS:HB2 | 4 | 0.6 | 0.24 | 0.7 |
| (2,1263) | 1:A:49:GLN:HE21 | 1:A:20:LEU:HB2 | 4 | 0.48 | 0.12 | 0.48 |
| (2,45) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:103:ALA:HB3 | 4 | 0.4 | 0.17 | 0.44 |
| (2,45) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:103:ALA:HB1 | 4 | 0.4 | 0.17 | 0.44 |
| (2,45) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:103:ALA:HB2 | 4 | 0.4 | 0.17 | 0.44 |
| (2,45) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:50:ALA:HB1 | 4 | 0.4 | 0.17 | 0.44 |
| (2,45) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:50:ALA:HB2 | 4 | 0.4 | 0.17 | 0.44 |
| (2,45) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:50:ALA:HB3 | 4 | 0.4 | 0.17 | 0.44 |
| (2,351) | 1:A:28:THR:HB | 1:A:28:THR:HA | 4 | 0.28 | 0.01 | 0.29 |
| (2,577) | 1:A:66:LYS:HA | 1:A:66:LYS:HB3 | 4 | 0.28 | 0.08 | 0.32 |
| (2,684) | 1:A:83:GLU:HB3 | 1:A:83:GLU:H | 4 | 0.27 | 0.02 | 0.28 |
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:75:LEU:HD11 | 4 | 0.25 | 0.02 | 0.25 |
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:75:LEU:HD13 | 4 | 0.25 | 0.02 | 0.25 |
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:75:LEU:HD12 | 4 | 0.25 | 0.02 | 0.25 |
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:75:LEU:HD11 | 4 | 0.25 | 0.02 | 0.25 |
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:75:LEU:HD13 | 4 | 0.25 | 0.02 | 0.25 |
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:75:LEU:HD12 | 4 | 0.25 | 0.02 | 0.25 |
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:75:LEU:HD11 | 4 | 0.25 | 0.02 | 0.25 |
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:75:LEU:HD13 | 4 | 0.25 | 0.02 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:75:LEU:HD12 | 4 | 0.25 | 0.02 | 0.25 |
| (2,248) | 1:A:16:ALA:HA | 1:A:81:GLY:HA2 | 4 | 0.24 | 0.02 | 0.24 |
| (2,1009) | 1:A:49:GLN:H | 1:A:49:GLN:HG3 | 4 | 0.24 | 0.05 | 0.23 |
| (2,67) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG11 | 4 | 0.22 | 0.1 | 0.2 |
| (2,67) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG12 | 4 | 0.22 | 0.1 | 0.2 |
| (2,67) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG13 | 4 | 0.22 | 0.1 | 0.2 |
| (2,67) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:77:LEU:HG | 4 | 0.22 | 0.1 | 0.2 |
| (2,67) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:77:LEU:HG | 4 | 0.22 | 0.1 | 0.2 |
| (2,67) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:77:LEU:HG | 4 | 0.22 | 0.1 | 0.2 |
| (2,450) | 1:A:49:GLN:HA | 1:A:49:GLN:HB2 | 4 | 0.2 | 0.03 | 0.2 |
| (2,680) | 1:A:82:LYS:HB2 | 1:A:82:LYS:H | 4 | 0.2 | 0.02 | 0.2 |
| (2,1298) | 1:A:26:TYR:HE2 | 1:A:24:ALA:HB1 | 4 | 0.2 | 0.05 | 0.22 |
| (2,1298) | 1:A:26:TYR:HE2 | 1:A:24:ALA:HB2 | 4 | 0.2 | 0.05 | 0.22 |
| (2,1298) | 1:A:26:TYR:HE2 | 1:A:24:ALA:HB3 | 4 | 0.2 | 0.05 | 0.22 |
| (2,1298) | 1:A:26:TYR:HE1 | 1:A:24:ALA:HB1 | 4 | 0.2 | 0.05 | 0.22 |
| (2,1298) | 1:A:26:TYR:HE1 | 1:A:24:ALA:HB2 | 4 | 0.2 | 0.05 | 0.22 |
| (2,1298) | 1:A:26:TYR:HE1 | 1:A:24:ALA:HB3 | 4 | 0.2 | 0.05 | 0.22 |
| (2,219) | 1:A:12:ASP:HB3 | 1:A:12:ASP:H | 4 | 0.16 | 0.01 | 0.16 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:85:ALA:HB1 | 4 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:85:ALA:HB2 | 4 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:85:ALA:HB3 | 4 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:85:ALA:HB1 | 4 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:85:ALA:HB2 | 4 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:85:ALA:HB3 | 4 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:85:ALA:HB1 | 4 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:85:ALA:HB2 | 4 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:85:ALA:HB3 | 4 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (2,1037) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:56:ASP:HB3 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,687) | 1:A:84:VAL:HB | 1:A:77:LEU:HB2 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (2,525) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:25:PHE:HD1 | 3 | 2.18 | 0.06 | 2.22 |
| (2,525) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:25:PHE:HD2 | 3 | 2.18 | 0.06 | 2.22 |
| (2,525) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:25:PHE:HD1 | 3 | 2.18 | 0.06 | 2.22 |
| (2,525) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:25:PHE:HD2 | 3 | 2.18 | 0.06 | 2.22 |
| (2,525) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:25:PHE:HD1 | 3 | 2.18 | 0.06 | 2.22 |
| (2,525) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:25:PHE:HD2 | 3 | 2.18 | 0.06 | 2.22 |
| (2,521) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:29:TRP:HZ2 | 3 | 2.01 | 0.23 | 2.03 |
| (2,521) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:29:TRP:HZ2 | 3 | 2.01 | 0.23 | 2.03 |
| (2,521) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:29:TRP:HZ2 | 3 | 2.01 | 0.23 | 2.03 |
| (2,572) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB3 | 3 | 1.39 | 0.07 | 1.35 |
| (2,572) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB1 | 3 | 1.39 | 0.07 | 1.35 |
| (2,572) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB2 | 3 | 1.39 | 0.07 | 1.35 |
| (2,572) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB3 | 3 | 1.39 | 0.07 | 1.35 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,572) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB1 | 3 | 1.39 | 0.07 | 1.35 |
| (2,572) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB2 | 3 | 1.39 | 0.07 | 1.35 |
| (2,572) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB3 | 3 | 1.39 | 0.07 | 1.35 |
| (2,572) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB1 | 3 | 1.39 | 0.07 | 1.35 |
| (2,572) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB2 | 3 | 1.39 | 0.07 | 1.35 |
| (2,991) | 1:A:44:SER:H | 1:A:2:VAL:HG13 | 3 | 1.13 | 0.7 | 1.49 |
| (2,991) | 1:A:44:SER:H | 1:A:2:VAL:HG12 | 3 | 1.13 | 0.7 | 1.49 |
| (2,991) | 1:A:44:SER:H | 1:A:2:VAL:HG11 | 3 | 1.13 | 0.7 | 1.49 |
| (2,523) | 1:A:25:PHE:HB3 | 1:A:57:VAL:HG23 | 3 | 1.04 | 0.03 | 1.06 |
| (2,523) | 1:A:25:PHE:HB3 | 1:A:57:VAL:HG21 | 3 | 1.04 | 0.03 | 1.06 |
| (2,523) | 1:A:25:PHE:HB3 | 1:A:57:VAL:HG22 | 3 | 1.04 | 0.03 | 1.06 |
| (2,932) | 1:A:19:LYS:HB2 | 1:A:20:LEU:H | 3 | 0.88 | 0.13 | 0.81 |
| (2,1267) | 1:A:49:GLN:HE22 | 1:A:20:LEU:HB2 | 3 | 0.79 | 0.31 | 0.89 |
| (2,269) | 1:A:19:LYS:HA | 1:A:19:LYS:HB2 | 3 | 0.67 | 0.02 | 0.66 |
| (2,540) | 1:A:60:LEU:HG | 1:A:63:VAL:HG12 | 3 | 0.67 | 0.19 | 0.65 |
| (2,540) | 1:A:60:LEU:HG | 1:A:63:VAL:HG11 | 3 | 0.67 | 0.19 | 0.65 |
| (2,540) | 1:A:60:LEU:HG | 1:A:63:VAL:HG13 | 3 | 0.67 | 0.19 | 0.65 |
| (2,517) | 1:A:27:ALA:HB1 | 1:A:57:VAL:HG11 | 3 | 0.62 | 0.09 | 0.64 |
| (2,517) | 1:A:27:ALA:HB1 | 1:A:57:VAL:HG12 | 3 | 0.62 | 0.09 | 0.64 |
| (2,517) | 1:A:27:ALA:HB1 | 1:A:57:VAL:HG13 | 3 | 0.62 | 0.09 | 0.64 |
| (2,517) | 1:A:27:ALA:HB3 | 1:A:57:VAL:HG11 | 3 | 0.62 | 0.09 | 0.64 |
| (2,517) | 1:A:27:ALA:HB3 | 1:A:57:VAL:HG12 | 3 | 0.62 | 0.09 | 0.64 |
| (2,517) | 1:A:27:ALA:HB3 | 1:A:57:VAL:HG13 | 3 | 0.62 | 0.09 | 0.64 |
| (2,517) | 1:A:27:ALA:HB2 | 1:A:57:VAL:HG11 | 3 | 0.62 | 0.09 | 0.64 |
| (2,517) | 1:A:27:ALA:HB2 | 1:A:57:VAL:HG12 | 3 | 0.62 | 0.09 | 0.64 |
| (2,517) | 1:A:27:ALA:HB2 | 1:A:57:VAL:HG13 | 3 | 0.62 | 0.09 | 0.64 |
| (2,324) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:54:LYS:HD2 | 3 | 0.51 | 0.33 | 0.51 |
| (2,324) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:54:LYS:HD2 | 3 | 0.51 | 0.33 | 0.51 |
| (2,324) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:54:LYS:HD2 | 3 | 0.51 | 0.33 | 0.51 |
| (2,513) | 1:A:57:VAL:HA | 1:A:57:VAL:HG23 | 3 | 0.44 | 0.0 | 0.44 |
| (2,513) | 1:A:57:VAL:HA | 1:A:57:VAL:HG21 | 3 | 0.44 | 0.0 | 0.44 |
| (2,513) | 1:A:57:VAL:HA | 1:A:57:VAL:HG22 | 3 | 0.44 | 0.0 | 0.44 |
| (2,340) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:57:VAL:HG11 | 3 | 0.41 | 0.13 | 0.34 |
| (2,340) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:57:VAL:HG12 | 3 | 0.41 | 0.13 | 0.34 |
| (2,340) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:57:VAL:HG13 | 3 | 0.41 | 0.13 | 0.34 |
| (2,182) | 1:A:6:LYS:HD3 | 1:A:6:LYS:HE2 | 3 | 0.38 | 0.0 | 0.38 |
| (2,1048) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:57:VAL:HG11 | 3 | 0.37 | 0.04 | 0.35 |
| (2,1048) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:57:VAL:HG12 | 3 | 0.37 | 0.04 | 0.35 |
| (2,1048) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:57:VAL:HG13 | 3 | 0.37 | 0.04 | 0.35 |
| (2,1006) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:47:TYR:H | 3 | 0.35 | 0.07 | 0.4 |
| (2,1259) | 1:A:80:ASN:HD22 | 1:A:79:LYS:HB3 | 3 | 0.34 | 0.02 | 0.35 |
| (2,989) | 1:A:43:PHE:H | 1:A:41:GLU:HB3 | 3 | 0.32 | 0.23 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,606) | 1:A:70:SER:HA | 1:A:70:SER:HB3 | 3 | 0.32 | 0.0 | 0.32 |
| (2,273) | 1:A:19:LYS:HG2 | 1:A:19:LYS:H | 3 | 0.27 | 0.03 | 0.26 |
| (2,1282) | 1:A:46:GLN:HE22 | 1:A:46:GLN:HG3 | 3 | 0.22 | 0.0 | 0.22 |
| (2,1264) | 1:A:49:GLN:HE21 | 1:A:49:GLN:HB3 | 3 | 0.22 | 0.09 | 0.18 |
| (2,835) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:30:CYS:HB2 | 3 | 0.21 | 0.02 | 0.21 |
| (2,1005) | 1:A:47:TYR:H | 1:A:43:PHE:HA | 3 | 0.16 | 0.03 | 0.14 |
| (2,168) | 1:A:3:THR:HG21 | 1:A:3:THR:H | 3 | 0.16 | 0.03 | 0.15 |
| (2,168) | 1:A:3:THR:HG23 | 1:A:3:THR:H | 3 | 0.16 | 0.03 | 0.15 |
| (2,168) | 1:A:3:THR:HG22 | 1:A:3:THR:H | 3 | 0.16 | 0.03 | 0.15 |
| (2,1046) | 1:A:72:MET:H | 1:A:72:MET:HE1 | 3 | 0.16 | 0.07 | 0.11 |
| (2,1046) | 1:A:72:MET:H | 1:A:72:MET:HE2 | 3 | 0.16 | 0.07 | 0.11 |
| (2,1046) | 1:A:72:MET:H | 1:A:72:MET:HE3 | 3 | 0.16 | 0.07 | 0.11 |
| (2,436) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:42:LYS:HA | 3 | 0.15 | 0.03 | 0.13 |
| (2,973) | 1:A:36:ILE:H | 1:A:36:ILE:HD12 | 3 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (2,973) | 1:A:36:ILE:H | 1:A:36:ILE:HD11 | 3 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (2,973) | 1:A:36:ILE:H | 1:A:36:ILE:HD13 | 3 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (2,163) | 1:A:2:VAL:HA | 1:A:2:VAL:HG13 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (2,163) | 1:A:2:VAL:HA | 1:A:2:VAL:HG12 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (2,163) | 1:A:2:VAL:HA | 1:A:2:VAL:HG11 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,36) | 1:A:101:ALA:H | 1:A:97:GLN:O | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,485) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:24:ALA:HB1 | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,485) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:24:ALA:HB2 | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,485) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:24:ALA:HB3 | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,1033) | 1:A:5:PHE:H | 1:A:55:LEU:H | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,1245) | 1:A:67:ASN:HD22 | 1:A:66:LYS:HG3 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (2,137) | 1:A:101:ALA:H | 1:A:98:ALA:HB1 | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (2,137) | 1:A:101:ALA:H | 1:A:98:ALA:HB3 | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (2,137) | 1:A:101:ALA:H | 1:A:98:ALA:HB2 | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (2,137) | 1:A:98:ALA:HB1 | 1:A:97:GLN:H | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (2,137) | 1:A:98:ALA:HB3 | 1:A:97:GLN:H | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (2,137) | 1:A:98:ALA:HB2 | 1:A:97:GLN:H | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (2,137) | 1:A:97:GLN:H | 1:A:96:LYS:HG3 | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (2,369) | 1:A:35:MET:HA | 1:A:35:MET:HG3 | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,416) | 1:A:41:GLU:HA | 1:A:2:VAL:HG13 | 2 | 2.37 | 0.09 | 2.37 |
| (2,416) | 1:A:41:GLU:HA | 1:A:2:VAL:HG12 | 2 | 2.37 | 0.09 | 2.37 |
| (2,416) | 1:A:41:GLU:HA | 1:A:2:VAL:HG11 | 2 | 2.37 | 0.09 | 2.37 |
| (2,564) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:67:ASN:HD21 | 2 | 1.88 | 0.04 | 1.88 |
| (2,564) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:67:ASN:HD21 | 2 | 1.88 | 0.04 | 1.88 |
| (2,564) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:67:ASN:HD21 | 2 | 1.88 | 0.04 | 1.88 |
| (2,816) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:67:ASN:HD22 | 2 | 1.68 | 0.04 | 1.68 |
| (2,816) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:67:ASN:HD22 | 2 | 1.68 | 0.04 | 1.68 |
| (2,816) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:67:ASN:HD22 | 2 | 1.68 | 0.04 | 1.68 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,160) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:53:TYR:HA | 2 | 1.44 | 0.05 | 1.44 |
| (2,160) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:53:TYR:HA | 2 | 1.44 | 0.05 | 1.44 |
| (2,160) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:53:TYR:HA | 2 | 1.44 | 0.05 | 1.44 |
| (2,1061) | 1:A:61:GLY:H | 1:A:63:VAL:HG12 | 2 | 1.38 | 0.12 | 1.38 |
| (2,1061) | 1:A:61:GLY:H | 1:A:63:VAL:HG11 | 2 | 1.38 | 0.12 | 1.38 |
| (2,1061) | 1:A:61:GLY:H | 1:A:63:VAL:HG13 | 2 | 1.38 | 0.12 | 1.38 |
| (2,158) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:54:LYS:H | 2 | 1.35 | 0.04 | 1.35 |
| (2,158) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:54:LYS:H | 2 | 1.35 | 0.04 | 1.35 |
| (2,158) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:54:LYS:H | 2 | 1.35 | 0.04 | 1.35 |
| (2,283) | 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG11 | 2 | 1.31 | 0.02 | 1.31 |
| (2,283) | 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG13 | 2 | 1.31 | 0.02 | 1.31 |
| (2,283) | 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG12 | 2 | 1.31 | 0.02 | 1.31 |
| (2,283) | 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG11 | 2 | 1.31 | 0.02 | 1.31 |
| (2,283) | 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG13 | 2 | 1.31 | 0.02 | 1.31 |
| (2,283) | 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG12 | 2 | 1.31 | 0.02 | 1.31 |
| (2,283) | 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG11 | 2 | 1.31 | 0.02 | 1.31 |
| (2,283) | 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG13 | 2 | 1.31 | 0.02 | 1.31 |
| (2,283) | 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG12 | 2 | 1.31 | 0.02 | 1.31 |
| (2,1049) | 1:A:59:GLU:H | 1:A:56:ASP:HB2 | 2 | 1.02 | 0.26 | 1.02 |
| (2,981) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:41:GLU:HB3 | 2 | 0.98 | 0.04 | 0.98 |
| (2,1021) | 1:A:53:TYR:H | 1:A:2:VAL:HG23 | 2 | 0.94 | 0.03 | 0.94 |
| (2,1021) | 1:A:53:TYR:H | 1:A:2:VAL:HG21 | 2 | 0.94 | 0.03 | 0.94 |
| (2,1021) | 1:A:53:TYR:H | 1:A:2:VAL:HG22 | 2 | 0.94 | 0.03 | 0.94 |
| (2,1071) | 1:A:63:VAL:H | 1:A:63:VAL:HG12 | 2 | 0.92 | 0.01 | 0.92 |
| (2,1071) | 1:A:63:VAL:H | 1:A:63:VAL:HG11 | 2 | 0.92 | 0.01 | 0.92 |
| (2,1071) | 1:A:63:VAL:H | 1:A:63:VAL:HG13 | 2 | 0.92 | 0.01 | 0.92 |
| (2,272) | 1:A:19:LYS:HB2 | 1:A:19:LYS:HE3 | 2 | 0.9 | 0.07 | 0.9 |
| (2,962) | 1:A:26:TYR:HB3 | 1:A:27:ALA:H | 2 | 0.88 | 0.03 | 0.88 |
| (2,983) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:2:VAL:HG13 | 2 | 0.86 | 0.12 | 0.86 |
| (2,983) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:2:VAL:HG12 | 2 | 0.86 | 0.12 | 0.86 |
| (2,983) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:2:VAL:HG11 | 2 | 0.86 | 0.12 | 0.86 |
| (2,636) | 1:A:76:LEU:HD23 | 1:A:86:LYS:HE3 | 2 | 0.83 | 0.03 | 0.83 |
| (2,636) | 1:A:76:LEU:HD21 | 1:A:86:LYS:HE3 | 2 | 0.83 | 0.03 | 0.83 |
| (2,636) | 1:A:76:LEU:HD22 | 1:A:86:LYS:HE3 | 2 | 0.83 | 0.03 | 0.83 |
| (2,1140) | 1:A:80:ASN:H | 1:A:79:LYS:HG3 | 2 | 0.82 | 0.02 | 0.82 |
| (2,159) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:3:THR:H | 2 | 0.8 | 0.08 | 0.8 |
| (2,159) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:3:THR:H | 2 | 0.8 | 0.08 | 0.8 |
| (2,159) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:3:THR:H | 2 | 0.8 | 0.08 | 0.8 |
| (2,814) | 1:A:55:LEU:HB3 | 1:A:25:PHE:HD1 | 2 | 0.58 | 0.45 | 0.58 |
| (2,814) | 1:A:55:LEU:HB3 | 1:A:25:PHE:HD2 | 2 | 0.58 | 0.45 | 0.58 |
| (2,289) | 1:A:88:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG21 | 2 | 0.34 | 0.01 | 0.34 |
| (2,289) | 1:A:88:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG23 | 2 | 0.34 | 0.01 | 0.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

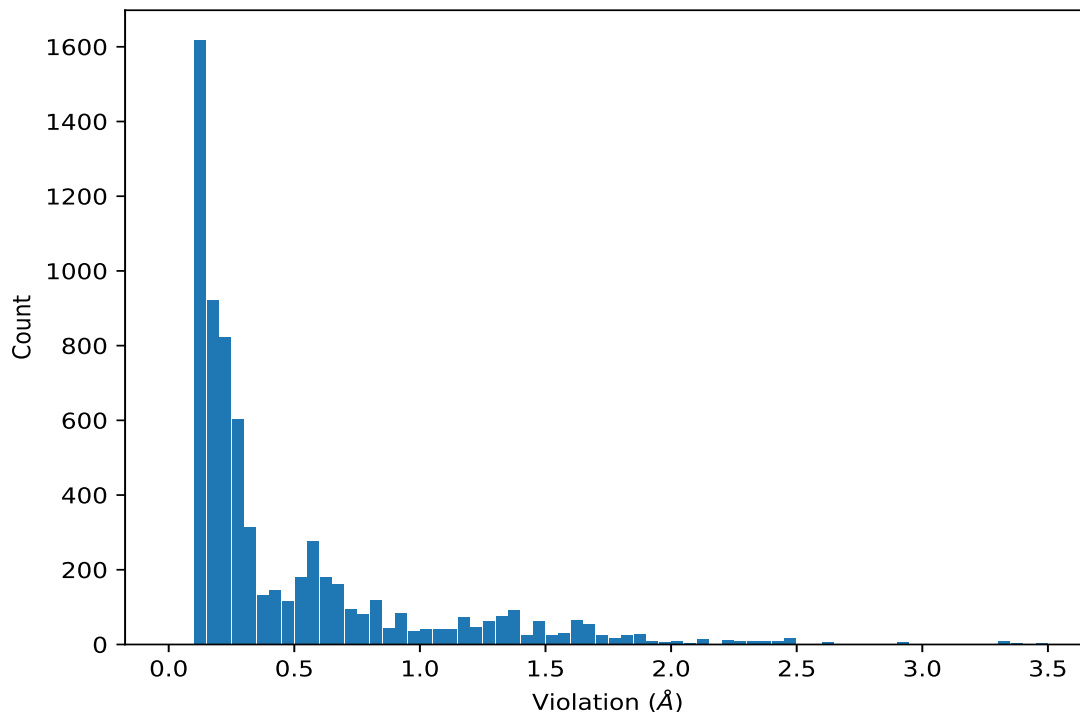
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,289) | 1:A:88:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG22 | 2 | 0.34 | 0.01 | 0.34 |
| (2,794) | 1:A:26:TYR:HA | 1:A:26:TYR:HD2 | 2 | 0.32 | 0.02 | 0.32 |
| (2,794) | 1:A:26:TYR:HA | 1:A:26:TYR:HD1 | 2 | 0.32 | 0.02 | 0.32 |
| (2,836) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:31:GLY:HA2 | 2 | 0.3 | 0.01 | 0.3 |
| (2,994) | 1:A:44:SER:H | 1:A:44:SER:HB3 | 2 | 0.3 | 0.02 | 0.3 |
| (2,405) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:41:GLU:H | 2 | 0.2 | 0.03 | 0.2 |
| (2,442) | 1:A:68:GLU:HG3 | 1:A:68:GLU:H | 2 | 0.2 | 0.04 | 0.2 |
| (2,777) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:60:LEU:HD13 | 2 | 0.2 | 0.02 | 0.2 |
| (2,777) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:60:LEU:HD11 | 2 | 0.2 | 0.02 | 0.2 |
| (2,777) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:60:LEU:HD12 | 2 | 0.2 | 0.02 | 0.2 |
| (2,927) | 1:A:19:LYS:H | 1:A:80:ASN:H | 2 | 0.18 | 0.08 | 0.18 |
| (2,444) | 1:A:47:TYR:HA | 1:A:49:GLN:H | 2 | 0.18 | 0.0 | 0.18 |
| (2,667) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG22 | 2 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (2,667) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG21 | 2 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (2,667) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG23 | 2 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (2,1236) | 1:A:49:GLN:H | 1:A:47:TYR:HD2 | 2 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (2,1236) | 1:A:49:GLN:H | 1:A:47:TYR:HD1 | 2 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (2,1212) | 1:A:100:ALA:H | 1:A:96:LYS:HD2 | 2 | 0.16 | 0.06 | 0.16 |
| (2,383) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:40:ILE:HB | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (2,383) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:40:ILE:HB | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (2,383) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:40:ILE:HB | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (2,35) | 1:A:42:LYS:HD3 | 1:A:42:LYS:HG2 | 2 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (2,35) | 1:A:42:LYS:HD3 | 1:A:42:LYS:HG3 | 2 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (2,714) | 1:A:88:VAL:HB | 1:A:88:VAL:H | 2 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (2,152) | 1:A:2:VAL:HA | 1:A:2:VAL:HG23 | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (2,152) | 1:A:2:VAL:HA | 1:A:2:VAL:HG21 | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (2,152) | 1:A:2:VAL:HA | 1:A:2:VAL:HG22 | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,5) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:12:ASP:O | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,8) | 1:A:35:MET:N | 1:A:31:GLY:O | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (2,251) | 1:A:16:ALA:HA | 1:A:17:GLN:H | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,449) | 1:A:49:GLN:HA | 1:A:50:ALA:H | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,579) | 1:A:66:LYS:HA | 1:A:66:LYS:H | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,764) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:99:ILE:HA | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,764) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:99:ILE:HA | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,764) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:99:ILE:HA | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |

¹Number of violated models, ²Standard deviation

9.5 All violated distance restraints [i](#)

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

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



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

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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:58:ASP:HB2 | 9 | 3.48 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:58:ASP:HB2 | 9 | 3.48 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:58:ASP:HB2 | 9 | 3.48 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:58:ASP:HB2 | 7 | 3.35 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:58:ASP:HB2 | 7 | 3.35 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:58:ASP:HB2 | 7 | 3.35 |
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG23 | 1:A:75:LEU:HD11 | 4 | 3.31 |
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG23 | 1:A:75:LEU:HD13 | 4 | 3.31 |
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG23 | 1:A:75:LEU:HD12 | 4 | 3.31 |
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG21 | 1:A:75:LEU:HD11 | 4 | 3.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG21 | 1:A:75:LEU:HD13 | 4 | 3.31 |
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG21 | 1:A:75:LEU:HD12 | 4 | 3.31 |
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG22 | 1:A:75:LEU:HD11 | 4 | 3.31 |
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG22 | 1:A:75:LEU:HD13 | 4 | 3.31 |
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG22 | 1:A:75:LEU:HD12 | 4 | 3.31 |
| (2,155) | 1:A:2:VAL:HB | 1:A:44:SER:HB2 | 7 | 3.16 |
| (2,825) | 1:A:54:LYS:HB2 | 1:A:26:TYR:HB2 | 3 | 3.05 |
| (2,825) | 1:A:54:LYS:HB2 | 1:A:26:TYR:HB2 | 18 | 3.01 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:47:TYR:HE2 | 18 | 2.92 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:47:TYR:HE1 | 18 | 2.92 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:47:TYR:HE2 | 18 | 2.92 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:47:TYR:HE1 | 18 | 2.92 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:47:TYR:HE2 | 18 | 2.92 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:47:TYR:HE1 | 18 | 2.92 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:47:TYR:HE2 | 12 | 2.6 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:47:TYR:HE1 | 12 | 2.6 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:47:TYR:HE2 | 12 | 2.6 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:47:TYR:HE1 | 12 | 2.6 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:47:TYR:HE2 | 12 | 2.6 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:47:TYR:HE1 | 12 | 2.6 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG13 | 3 | 2.49 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG11 | 3 | 2.49 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG12 | 3 | 2.49 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG13 | 5 | 2.48 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG11 | 5 | 2.48 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG12 | 5 | 2.48 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG13 | 18 | 2.48 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG11 | 18 | 2.48 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG12 | 18 | 2.48 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG13 | 20 | 2.48 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG11 | 20 | 2.48 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG12 | 20 | 2.48 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG13 | 7 | 2.46 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG11 | 7 | 2.46 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG12 | 7 | 2.46 |
| (2,416) | 1:A:41:GLU:HA | 1:A:2:VAL:HG13 | 8 | 2.46 |
| (2,416) | 1:A:41:GLU:HA | 1:A:2:VAL:HG12 | 8 | 2.46 |
| (2,416) | 1:A:41:GLU:HA | 1:A:2:VAL:HG11 | 8 | 2.46 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG13 | 9 | 2.44 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG11 | 9 | 2.44 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG12 | 9 | 2.44 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG13 | 15 | 2.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG11 | 15 | 2.43 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG12 | 15 | 2.43 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG13 | 4 | 2.42 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG11 | 4 | 2.42 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG12 | 4 | 2.42 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG13 | 6 | 2.4 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG11 | 6 | 2.4 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG12 | 6 | 2.4 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG23 | 4 | 2.4 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG21 | 4 | 2.4 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG22 | 4 | 2.4 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:58:ASP:HB2 | 15 | 2.38 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:58:ASP:HB2 | 15 | 2.38 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:58:ASP:HB2 | 15 | 2.38 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:20:LEU:HD21 | 9 | 2.34 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:20:LEU:HD22 | 9 | 2.34 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:20:LEU:HD23 | 9 | 2.34 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:20:LEU:HD21 | 9 | 2.34 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:20:LEU:HD22 | 9 | 2.34 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:20:LEU:HD23 | 9 | 2.34 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:20:LEU:HD21 | 9 | 2.34 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:20:LEU:HD22 | 9 | 2.34 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:20:LEU:HD23 | 9 | 2.34 |
| (2,284) | 1:A:20:LEU:HG | 1:A:22:VAL:HG11 | 4 | 2.3 |
| (2,284) | 1:A:20:LEU:HG | 1:A:22:VAL:HG13 | 4 | 2.3 |
| (2,284) | 1:A:20:LEU:HG | 1:A:22:VAL:HG12 | 4 | 2.3 |
| (2,521) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:29:TRP:HZ2 | 15 | 2.29 |
| (2,521) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:29:TRP:HZ2 | 15 | 2.29 |
| (2,521) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:29:TRP:HZ2 | 15 | 2.29 |
| (2,416) | 1:A:41:GLU:HA | 1:A:2:VAL:HG13 | 7 | 2.28 |
| (2,416) | 1:A:41:GLU:HA | 1:A:2:VAL:HG12 | 7 | 2.28 |
| (2,416) | 1:A:41:GLU:HA | 1:A:2:VAL:HG11 | 7 | 2.28 |
| (2,525) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:25:PHE:HD1 | 7 | 2.23 |
| (2,525) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:25:PHE:HD2 | 7 | 2.23 |
| (2,525) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:25:PHE:HD1 | 7 | 2.23 |
| (2,525) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:25:PHE:HD2 | 7 | 2.23 |
| (2,525) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:25:PHE:HD1 | 7 | 2.23 |
| (2,525) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:25:PHE:HD2 | 7 | 2.23 |
| (2,525) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:25:PHE:HD1 | 9 | 2.22 |
| (2,525) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:25:PHE:HD2 | 9 | 2.22 |
| (2,525) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:25:PHE:HD1 | 9 | 2.22 |
| (2,525) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:25:PHE:HD2 | 9 | 2.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,525) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:25:PHE:HD1 | 9 | 2.22 |
| (2,525) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:25:PHE:HD2 | 9 | 2.22 |
| (2,155) | 1:A:2:VAL:HB | 1:A:44:SER:HB2 | 8 | 2.15 |
| (2,863) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 16 | 2.12 |
| (2,863) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 16 | 2.12 |
| (2,863) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 16 | 2.12 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB3 | 1:A:47:TYR:HB2 | 11 | 2.11 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB1 | 1:A:47:TYR:HB2 | 11 | 2.11 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB2 | 1:A:47:TYR:HB2 | 11 | 2.11 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB3 | 1:A:47:TYR:HB3 | 11 | 2.11 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB1 | 1:A:47:TYR:HB3 | 11 | 2.11 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB2 | 1:A:47:TYR:HB3 | 11 | 2.11 |
| (2,525) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:25:PHE:HD1 | 15 | 2.1 |
| (2,525) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:25:PHE:HD2 | 15 | 2.1 |
| (2,525) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:25:PHE:HD1 | 15 | 2.1 |
| (2,525) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:25:PHE:HD2 | 15 | 2.1 |
| (2,525) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:25:PHE:HD1 | 15 | 2.1 |
| (2,525) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:25:PHE:HD2 | 15 | 2.1 |
| (2,863) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 14 | 2.06 |
| (2,863) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 14 | 2.06 |
| (2,863) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 14 | 2.06 |
| (2,521) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:29:TRP:HZ2 | 9 | 2.03 |
| (2,521) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:29:TRP:HZ2 | 9 | 2.03 |
| (2,521) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:29:TRP:HZ2 | 9 | 2.03 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:21:VAL:HA | 9 | 2.01 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:21:VAL:HA | 9 | 2.01 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:21:VAL:HA | 9 | 2.01 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HA | 9 | 2.01 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HA | 9 | 2.01 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HA | 9 | 2.01 |
| (2,270) | 1:A:19:LYS:HA | 1:A:19:LYS:HE3 | 13 | 2.01 |
| (2,747) | 1:A:95:ILE:HG12 | 1:A:99:ILE:HG12 | 12 | 1.99 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG12 | 20 | 1.97 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG11 | 20 | 1.97 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG13 | 20 | 1.97 |
| (2,863) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 10 | 1.96 |
| (2,863) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 10 | 1.96 |
| (2,863) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 10 | 1.96 |
| (2,766) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:96:LYS:HD2 | 9 | 1.93 |
| (2,564) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:67:ASN:HD21 | 11 | 1.92 |
| (2,564) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:67:ASN:HD21 | 11 | 1.92 |
| (2,564) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:67:ASN:HD21 | 11 | 1.92 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,747) | 1:A:95:ILE:HG12 | 1:A:99:ILE:HG12 | 7 | 1.91 |
| (2,576) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:THR:HA | 6 | 1.91 |
| (2,276) | 1:A:25:PHE:HA | 1:A:57:VAL:HG23 | 7 | 1.91 |
| (2,276) | 1:A:25:PHE:HA | 1:A:57:VAL:HG21 | 7 | 1.91 |
| (2,276) | 1:A:25:PHE:HA | 1:A:57:VAL:HG22 | 7 | 1.91 |
| (2,833) | 1:A:31:GLY:HA3 | 1:A:34:LYS:HB3 | 11 | 1.9 |
| (2,747) | 1:A:95:ILE:HG12 | 1:A:99:ILE:HG12 | 8 | 1.9 |
| (2,863) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 3 | 1.89 |
| (2,863) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 3 | 1.89 |
| (2,863) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 3 | 1.89 |
| (2,537) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:63:VAL:HB | 8 | 1.88 |
| (2,747) | 1:A:95:ILE:HG12 | 1:A:99:ILE:HG12 | 13 | 1.87 |
| (2,747) | 1:A:95:ILE:HG12 | 1:A:99:ILE:HG12 | 1 | 1.86 |
| (2,537) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:63:VAL:HB | 4 | 1.86 |
| (2,537) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:63:VAL:HB | 5 | 1.86 |
| (2,537) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:63:VAL:HB | 7 | 1.86 |
| (2,537) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:63:VAL:HB | 19 | 1.86 |
| (2,863) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 2 | 1.85 |
| (2,863) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 2 | 1.85 |
| (2,863) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 2 | 1.85 |
| (2,717) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:74:THR:HA | 2 | 1.85 |
| (2,717) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:74:THR:HA | 2 | 1.85 |
| (2,717) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:74:THR:HA | 2 | 1.85 |
| (2,537) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:63:VAL:HB | 1 | 1.85 |
| (2,537) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:63:VAL:HB | 3 | 1.85 |
| (2,537) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:63:VAL:HB | 16 | 1.85 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:5:PHE:HE2 | 20 | 1.85 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:5:PHE:HE1 | 20 | 1.85 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:5:PHE:HE2 | 20 | 1.85 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:5:PHE:HE1 | 20 | 1.85 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:5:PHE:HE2 | 20 | 1.85 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:5:PHE:HE1 | 20 | 1.85 |
| (2,747) | 1:A:95:ILE:HG12 | 1:A:99:ILE:HG12 | 2 | 1.84 |
| (2,537) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:63:VAL:HB | 2 | 1.84 |
| (2,537) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:63:VAL:HB | 9 | 1.84 |
| (2,537) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:63:VAL:HB | 12 | 1.84 |
| (2,537) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:63:VAL:HB | 14 | 1.84 |
| (2,537) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:63:VAL:HB | 20 | 1.84 |
| (2,276) | 1:A:25:PHE:HA | 1:A:57:VAL:HG23 | 15 | 1.84 |
| (2,276) | 1:A:25:PHE:HA | 1:A:57:VAL:HG21 | 15 | 1.84 |
| (2,276) | 1:A:25:PHE:HA | 1:A:57:VAL:HG22 | 15 | 1.84 |
| (2,747) | 1:A:95:ILE:HG12 | 1:A:99:ILE:HG12 | 18 | 1.83 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,576) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:THR:HA | 11 | 1.83 |
| (2,564) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:67:ASN:HD21 | 13 | 1.83 |
| (2,564) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:67:ASN:HD21 | 13 | 1.83 |
| (2,564) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:67:ASN:HD21 | 13 | 1.83 |
| (2,537) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:63:VAL:HB | 17 | 1.83 |
| (2,576) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:THR:HA | 9 | 1.82 |
| (2,537) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:63:VAL:HB | 10 | 1.82 |
| (2,496) | 1:A:54:LYS:HE2 | 1:A:2:VAL:HB | 10 | 1.82 |
| (2,998) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:46:GLN:HG3 | 7 | 1.81 |
| (2,998) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:46:GLN:HG3 | 9 | 1.81 |
| (2,998) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:46:GLN:HG3 | 10 | 1.81 |
| (2,537) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:63:VAL:HB | 15 | 1.81 |
| (2,537) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:63:VAL:HB | 18 | 1.81 |
| (2,825) | 1:A:54:LYS:HB2 | 1:A:26:TYR:HB2 | 4 | 1.8 |
| (2,747) | 1:A:95:ILE:HG12 | 1:A:99:ILE:HG12 | 17 | 1.8 |
| (2,576) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:THR:HA | 17 | 1.8 |
| (2,998) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:46:GLN:HG3 | 2 | 1.79 |
| (2,678) | 1:A:76:LEU:HD23 | 1:A:86:LYS:HA | 5 | 1.79 |
| (2,678) | 1:A:76:LEU:HD21 | 1:A:86:LYS:HA | 5 | 1.79 |
| (2,678) | 1:A:76:LEU:HD22 | 1:A:86:LYS:HA | 5 | 1.79 |
| (2,576) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:THR:HA | 16 | 1.79 |
| (2,537) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:63:VAL:HB | 6 | 1.78 |
| (2,998) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:46:GLN:HG3 | 20 | 1.77 |
| (2,833) | 1:A:31:GLY:HA3 | 1:A:34:LYS:HB3 | 17 | 1.77 |
| (2,576) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:THR:HA | 2 | 1.77 |
| (2,576) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:THR:HA | 19 | 1.77 |
| (2,833) | 1:A:31:GLY:HA3 | 1:A:34:LYS:HB3 | 19 | 1.76 |
| (2,766) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:96:LYS:HD2 | 8 | 1.76 |
| (2,576) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:THR:HA | 18 | 1.76 |
| (2,991) | 1:A:44:SER:H | 1:A:2:VAL:HG13 | 8 | 1.75 |
| (2,991) | 1:A:44:SER:H | 1:A:2:VAL:HG12 | 8 | 1.75 |
| (2,991) | 1:A:44:SER:H | 1:A:2:VAL:HG11 | 8 | 1.75 |
| (2,933) | 1:A:19:LYS:HG2 | 1:A:20:LEU:H | 8 | 1.75 |
| (2,833) | 1:A:31:GLY:HA3 | 1:A:34:LYS:HB3 | 7 | 1.74 |
| (2,717) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:74:THR:HA | 8 | 1.74 |
| (2,717) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:74:THR:HA | 8 | 1.74 |
| (2,717) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:74:THR:HA | 8 | 1.74 |
| (2,585) | 1:A:19:LYS:HE3 | 1:A:20:LEU:H | 13 | 1.74 |
| (2,576) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:THR:HA | 4 | 1.74 |
| (2,576) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:THR:HA | 12 | 1.74 |
| (2,496) | 1:A:54:LYS:HE2 | 1:A:2:VAL:HB | 14 | 1.74 |
| (2,496) | 1:A:54:LYS:HE2 | 1:A:2:VAL:HB | 15 | 1.74 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG21 | 1:A:53:TYR:HB2 | 4 | 1.73 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG23 | 1:A:53:TYR:HB2 | 4 | 1.73 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG22 | 1:A:53:TYR:HB2 | 4 | 1.73 |
| (2,816) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:67:ASN:HD22 | 11 | 1.72 |
| (2,816) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:67:ASN:HD22 | 11 | 1.72 |
| (2,816) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:67:ASN:HD22 | 11 | 1.72 |
| (2,521) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:29:TRP:HZ2 | 7 | 1.72 |
| (2,521) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:29:TRP:HZ2 | 7 | 1.72 |
| (2,521) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:29:TRP:HZ2 | 7 | 1.72 |
| (2,299) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:53:TYR:HB3 | 14 | 1.71 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG21 | 1:A:53:TYR:HB2 | 14 | 1.71 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG23 | 1:A:53:TYR:HB2 | 14 | 1.71 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG22 | 1:A:53:TYR:HB2 | 14 | 1.71 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG21 | 1:A:53:TYR:HB2 | 18 | 1.71 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG23 | 1:A:53:TYR:HB2 | 18 | 1.71 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG22 | 1:A:53:TYR:HB2 | 18 | 1.71 |
| (2,276) | 1:A:25:PHE:HA | 1:A:57:VAL:HG23 | 9 | 1.7 |
| (2,276) | 1:A:25:PHE:HA | 1:A:57:VAL:HG21 | 9 | 1.7 |
| (2,276) | 1:A:25:PHE:HA | 1:A:57:VAL:HG22 | 9 | 1.7 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG21 | 1:A:53:TYR:HB2 | 6 | 1.7 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG23 | 1:A:53:TYR:HB2 | 6 | 1.7 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG22 | 1:A:53:TYR:HB2 | 6 | 1.7 |
| (2,1020) | 1:A:53:TYR:H | 1:A:21:VAL:HG12 | 20 | 1.7 |
| (2,1020) | 1:A:53:TYR:H | 1:A:21:VAL:HG11 | 20 | 1.7 |
| (2,1020) | 1:A:53:TYR:H | 1:A:21:VAL:HG13 | 20 | 1.7 |
| (2,766) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:96:LYS:HD2 | 3 | 1.69 |
| (2,1294) | 1:A:52:PHE:HE2 | 1:A:44:SER:HB3 | 11 | 1.69 |
| (2,1294) | 1:A:52:PHE:HE1 | 1:A:44:SER:HB3 | 11 | 1.69 |
| (2,833) | 1:A:31:GLY:HA3 | 1:A:34:LYS:HB3 | 20 | 1.68 |
| (2,766) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:96:LYS:HD2 | 11 | 1.68 |
| (2,735) | 1:A:94:ALA:HB1 | 1:A:87:VAL:HG12 | 4 | 1.68 |
| (2,735) | 1:A:94:ALA:HB1 | 1:A:87:VAL:HG11 | 4 | 1.68 |
| (2,735) | 1:A:94:ALA:HB1 | 1:A:87:VAL:HG13 | 4 | 1.68 |
| (2,735) | 1:A:94:ALA:HB3 | 1:A:87:VAL:HG12 | 4 | 1.68 |
| (2,735) | 1:A:94:ALA:HB3 | 1:A:87:VAL:HG11 | 4 | 1.68 |
| (2,735) | 1:A:94:ALA:HB3 | 1:A:87:VAL:HG13 | 4 | 1.68 |
| (2,735) | 1:A:94:ALA:HB2 | 1:A:87:VAL:HG12 | 4 | 1.68 |
| (2,735) | 1:A:94:ALA:HB2 | 1:A:87:VAL:HG11 | 4 | 1.68 |
| (2,735) | 1:A:94:ALA:HB2 | 1:A:87:VAL:HG13 | 4 | 1.68 |
| (2,576) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:THR:HA | 8 | 1.68 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG21 | 1:A:53:TYR:HB2 | 3 | 1.68 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG23 | 1:A:53:TYR:HB2 | 3 | 1.68 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG22 | 1:A:53:TYR:HB2 | 3 | 1.68 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG21 | 1:A:53:TYR:HB2 | 10 | 1.68 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG23 | 1:A:53:TYR:HB2 | 10 | 1.68 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG22 | 1:A:53:TYR:HB2 | 10 | 1.68 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG21 | 1:A:53:TYR:HB2 | 19 | 1.68 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG23 | 1:A:53:TYR:HB2 | 19 | 1.68 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG22 | 1:A:53:TYR:HB2 | 19 | 1.68 |
| (2,766) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:96:LYS:HD2 | 13 | 1.67 |
| (2,496) | 1:A:54:LYS:HE2 | 1:A:2:VAL:HB | 1 | 1.67 |
| (2,299) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:53:TYR:HB3 | 4 | 1.67 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG21 | 1:A:53:TYR:HB2 | 9 | 1.67 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG23 | 1:A:53:TYR:HB2 | 9 | 1.67 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG22 | 1:A:53:TYR:HB2 | 9 | 1.67 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG21 | 1:A:53:TYR:HB2 | 11 | 1.67 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG23 | 1:A:53:TYR:HB2 | 11 | 1.67 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG22 | 1:A:53:TYR:HB2 | 11 | 1.67 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG21 | 1:A:53:TYR:HB2 | 17 | 1.67 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG23 | 1:A:53:TYR:HB2 | 17 | 1.67 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG22 | 1:A:53:TYR:HB2 | 17 | 1.67 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB3 | 1:A:47:TYR:HB2 | 5 | 1.66 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB1 | 1:A:47:TYR:HB2 | 5 | 1.66 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB2 | 1:A:47:TYR:HB2 | 5 | 1.66 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB3 | 1:A:47:TYR:HB3 | 5 | 1.66 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB1 | 1:A:47:TYR:HB3 | 5 | 1.66 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB2 | 1:A:47:TYR:HB3 | 5 | 1.66 |
| (2,299) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:53:TYR:HB3 | 6 | 1.66 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG21 | 1:A:53:TYR:HB2 | 15 | 1.66 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG23 | 1:A:53:TYR:HB2 | 15 | 1.66 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG22 | 1:A:53:TYR:HB2 | 15 | 1.66 |
| (2,816) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:67:ASN:HD22 | 13 | 1.65 |
| (2,816) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:67:ASN:HD22 | 13 | 1.65 |
| (2,816) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:67:ASN:HD22 | 13 | 1.65 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG21 | 1:A:53:TYR:HB2 | 2 | 1.65 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG23 | 1:A:53:TYR:HB2 | 2 | 1.65 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG22 | 1:A:53:TYR:HB2 | 2 | 1.65 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG21 | 1:A:53:TYR:HB2 | 12 | 1.65 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG23 | 1:A:53:TYR:HB2 | 12 | 1.65 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG22 | 1:A:53:TYR:HB2 | 12 | 1.65 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG21 | 1:A:53:TYR:HB2 | 16 | 1.65 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG23 | 1:A:53:TYR:HB2 | 16 | 1.65 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG22 | 1:A:53:TYR:HB2 | 16 | 1.65 |
| (2,154) | 1:A:2:VAL:HA | 1:A:52:PHE:HB3 | 4 | 1.65 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:47:TYR:HE2 | 17 | 1.64 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:47:TYR:HE1 | 17 | 1.64 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:47:TYR:HE2 | 17 | 1.64 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:47:TYR:HE1 | 17 | 1.64 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:47:TYR:HE2 | 17 | 1.64 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:47:TYR:HE1 | 17 | 1.64 |
| (2,299) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:53:TYR:HB3 | 20 | 1.64 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG21 | 1:A:53:TYR:HB2 | 1 | 1.64 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG23 | 1:A:53:TYR:HB2 | 1 | 1.64 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG22 | 1:A:53:TYR:HB2 | 1 | 1.64 |
| (2,1294) | 1:A:52:PHE:HE2 | 1:A:44:SER:HB3 | 7 | 1.64 |
| (2,1294) | 1:A:52:PHE:HE1 | 1:A:44:SER:HB3 | 7 | 1.64 |
| (2,458) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:22:VAL:HG11 | 4 | 1.63 |
| (2,458) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:22:VAL:HG13 | 4 | 1.63 |
| (2,458) | 1:A:50:ALA:HB1 | 1:A:22:VAL:HG12 | 4 | 1.63 |
| (2,458) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:22:VAL:HG11 | 4 | 1.63 |
| (2,458) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:22:VAL:HG13 | 4 | 1.63 |
| (2,458) | 1:A:50:ALA:HB2 | 1:A:22:VAL:HG12 | 4 | 1.63 |
| (2,458) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:22:VAL:HG11 | 4 | 1.63 |
| (2,458) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:22:VAL:HG13 | 4 | 1.63 |
| (2,458) | 1:A:50:ALA:HB3 | 1:A:22:VAL:HG12 | 4 | 1.63 |
| (2,270) | 1:A:19:LYS:HA | 1:A:19:LYS:HE3 | 2 | 1.63 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG21 | 1:A:53:TYR:HB2 | 7 | 1.63 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG23 | 1:A:53:TYR:HB2 | 7 | 1.63 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG22 | 1:A:53:TYR:HB2 | 7 | 1.63 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG21 | 1:A:53:TYR:HB2 | 8 | 1.63 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG23 | 1:A:53:TYR:HB2 | 8 | 1.63 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG22 | 1:A:53:TYR:HB2 | 8 | 1.63 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG21 | 1:A:53:TYR:HB2 | 13 | 1.63 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG23 | 1:A:53:TYR:HB2 | 13 | 1.63 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG22 | 1:A:53:TYR:HB2 | 13 | 1.63 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG21 | 1:A:53:TYR:HB2 | 20 | 1.63 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG23 | 1:A:53:TYR:HB2 | 20 | 1.63 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG22 | 1:A:53:TYR:HB2 | 20 | 1.63 |
| (2,863) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 18 | 1.62 |
| (2,863) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 18 | 1.62 |
| (2,863) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 18 | 1.62 |
| (2,827) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:54:LYS:HD2 | 14 | 1.62 |
| (2,585) | 1:A:19:LYS:HE3 | 1:A:20:LEU:H | 19 | 1.62 |
| (2,299) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:53:TYR:HB3 | 19 | 1.62 |
| (2,299) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:53:TYR:HB3 | 7 | 1.61 |
| (2,299) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:53:TYR:HB3 | 17 | 1.61 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,154) | 1:A:2:VAL:HA | 1:A:52:PHE:HB3 | 9 | 1.61 |
| (2,833) | 1:A:31:GLY:HA3 | 1:A:34:LYS:HB3 | 6 | 1.6 |
| (2,833) | 1:A:31:GLY:HA3 | 1:A:34:LYS:HB3 | 8 | 1.6 |
| (2,747) | 1:A:95:ILE:HG12 | 1:A:99:ILE:HG12 | 15 | 1.6 |
| (2,299) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:53:TYR:HB3 | 9 | 1.6 |
| (2,299) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:53:TYR:HB3 | 10 | 1.6 |
| (2,299) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:53:TYR:HB3 | 12 | 1.6 |
| (2,299) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:53:TYR:HB3 | 15 | 1.6 |
| (2,299) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:53:TYR:HB3 | 16 | 1.6 |
| (2,299) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:53:TYR:HB3 | 18 | 1.6 |
| (2,951) | 1:A:76:LEU:H | 1:A:75:LEU:HD11 | 17 | 1.59 |
| (2,951) | 1:A:76:LEU:H | 1:A:75:LEU:HD13 | 17 | 1.59 |
| (2,951) | 1:A:76:LEU:H | 1:A:75:LEU:HD12 | 17 | 1.59 |
| (2,766) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:96:LYS:HD2 | 18 | 1.59 |
| (2,299) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:53:TYR:HB3 | 3 | 1.59 |
| (2,299) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:53:TYR:HB3 | 13 | 1.59 |
| (2,1281) | 1:A:102:ASN:HD21 | 1:A:20:LEU:HD21 | 9 | 1.59 |
| (2,1281) | 1:A:102:ASN:HD21 | 1:A:20:LEU:HD22 | 9 | 1.59 |
| (2,1281) | 1:A:102:ASN:HD21 | 1:A:20:LEU:HD23 | 9 | 1.59 |
| (2,299) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:53:TYR:HB3 | 8 | 1.58 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG21 | 1:A:53:TYR:HB2 | 5 | 1.58 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG23 | 1:A:53:TYR:HB2 | 5 | 1.58 |
| (2,171) | 1:A:3:THR:HG22 | 1:A:53:TYR:HB2 | 5 | 1.58 |
| (2,1294) | 1:A:52:PHE:HE2 | 1:A:44:SER:HB3 | 2 | 1.58 |
| (2,1294) | 1:A:52:PHE:HE1 | 1:A:44:SER:HB3 | 2 | 1.58 |
| (2,1294) | 1:A:52:PHE:HE2 | 1:A:44:SER:HB3 | 14 | 1.58 |
| (2,1294) | 1:A:52:PHE:HE1 | 1:A:44:SER:HB3 | 14 | 1.58 |
| (2,1294) | 1:A:52:PHE:HE2 | 1:A:44:SER:HB3 | 20 | 1.58 |
| (2,1294) | 1:A:52:PHE:HE1 | 1:A:44:SER:HB3 | 20 | 1.58 |
| (2,299) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:53:TYR:HB3 | 1 | 1.57 |
| (2,299) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:53:TYR:HB3 | 11 | 1.57 |
| (2,154) | 1:A:2:VAL:HA | 1:A:52:PHE:HB3 | 7 | 1.57 |
| (2,1079) | 1:A:65:GLN:H | 1:A:66:LYS:HB2 | 3 | 1.57 |
| (2,299) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:53:TYR:HB3 | 2 | 1.56 |
| (2,154) | 1:A:2:VAL:HA | 1:A:52:PHE:HB3 | 2 | 1.56 |
| (2,154) | 1:A:2:VAL:HA | 1:A:52:PHE:HB3 | 10 | 1.56 |
| (2,154) | 1:A:2:VAL:HA | 1:A:52:PHE:HB3 | 14 | 1.56 |
| (2,154) | 1:A:2:VAL:HA | 1:A:52:PHE:HB3 | 20 | 1.56 |
| (2,951) | 1:A:76:LEU:H | 1:A:75:LEU:HD11 | 19 | 1.55 |
| (2,951) | 1:A:76:LEU:H | 1:A:75:LEU:HD13 | 19 | 1.55 |
| (2,951) | 1:A:76:LEU:H | 1:A:75:LEU:HD12 | 19 | 1.55 |
| (2,585) | 1:A:19:LYS:HE3 | 1:A:20:LEU:H | 14 | 1.55 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,299) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:53:TYR:HB3 | 5 | 1.54 |
| (2,1294) | 1:A:52:PHE:HE2 | 1:A:44:SER:HB3 | 15 | 1.54 |
| (2,1294) | 1:A:52:PHE:HE1 | 1:A:44:SER:HB3 | 15 | 1.54 |
| (2,827) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:54:LYS:HD2 | 15 | 1.53 |
| (2,318) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:75:LEU:HD11 | 19 | 1.53 |
| (2,318) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:75:LEU:HD13 | 19 | 1.53 |
| (2,318) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:75:LEU:HD12 | 19 | 1.53 |
| (2,154) | 1:A:2:VAL:HA | 1:A:52:PHE:HB3 | 15 | 1.53 |
| (2,747) | 1:A:95:ILE:HG12 | 1:A:99:ILE:HG12 | 4 | 1.52 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG13 | 2 | 1.52 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG11 | 2 | 1.52 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG12 | 2 | 1.52 |
| (2,951) | 1:A:76:LEU:H | 1:A:75:LEU:HD11 | 7 | 1.51 |
| (2,951) | 1:A:76:LEU:H | 1:A:75:LEU:HD13 | 7 | 1.51 |
| (2,951) | 1:A:76:LEU:H | 1:A:75:LEU:HD12 | 7 | 1.51 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG12 | 19 | 1.51 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG11 | 19 | 1.51 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG13 | 19 | 1.51 |
| (2,270) | 1:A:19:LYS:HA | 1:A:19:LYS:HE3 | 14 | 1.51 |
| (2,1294) | 1:A:52:PHE:HE2 | 1:A:44:SER:HB3 | 10 | 1.51 |
| (2,1294) | 1:A:52:PHE:HE1 | 1:A:44:SER:HB3 | 10 | 1.51 |
| (2,747) | 1:A:95:ILE:HG12 | 1:A:99:ILE:HG12 | 16 | 1.5 |
| (2,443) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:43:PHE:HB2 | 10 | 1.5 |
| (2,1061) | 1:A:61:GLY:H | 1:A:63:VAL:HG12 | 11 | 1.5 |
| (2,1061) | 1:A:61:GLY:H | 1:A:63:VAL:HG11 | 11 | 1.5 |
| (2,1061) | 1:A:61:GLY:H | 1:A:63:VAL:HG13 | 11 | 1.5 |
| (2,991) | 1:A:44:SER:H | 1:A:2:VAL:HG13 | 7 | 1.49 |
| (2,991) | 1:A:44:SER:H | 1:A:2:VAL:HG12 | 7 | 1.49 |
| (2,991) | 1:A:44:SER:H | 1:A:2:VAL:HG11 | 7 | 1.49 |
| (2,938) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:21:VAL:H | 1 | 1.49 |
| (2,825) | 1:A:54:LYS:HB2 | 1:A:26:TYR:HB2 | 15 | 1.49 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:61:GLY:HA3 | 9 | 1.49 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:61:GLY:HA3 | 9 | 1.49 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:61:GLY:HA3 | 9 | 1.49 |
| (2,37) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:42:LYS:HG2 | 13 | 1.49 |
| (2,37) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:42:LYS:HG3 | 13 | 1.49 |
| (2,160) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:53:TYR:HA | 8 | 1.49 |
| (2,160) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:53:TYR:HA | 8 | 1.49 |
| (2,160) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:53:TYR:HA | 8 | 1.49 |
| (2,1079) | 1:A:65:GLN:H | 1:A:66:LYS:HB2 | 19 | 1.49 |
| (2,938) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:21:VAL:H | 4 | 1.48 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG21 | 1:A:92:PRO:HG2 | 12 | 1.48 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG23 | 1:A:92:PRO:HG2 | 12 | 1.48 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG22 | 1:A:92:PRO:HG2 | 12 | 1.48 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG13 | 8 | 1.48 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG11 | 8 | 1.48 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG12 | 8 | 1.48 |
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG23 | 1:A:75:LEU:HD11 | 17 | 1.48 |
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG23 | 1:A:75:LEU:HD13 | 17 | 1.48 |
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG23 | 1:A:75:LEU:HD12 | 17 | 1.48 |
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG21 | 1:A:75:LEU:HD11 | 17 | 1.48 |
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG21 | 1:A:75:LEU:HD13 | 17 | 1.48 |
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG21 | 1:A:75:LEU:HD12 | 17 | 1.48 |
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG22 | 1:A:75:LEU:HD11 | 17 | 1.48 |
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG22 | 1:A:75:LEU:HD13 | 17 | 1.48 |
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG22 | 1:A:75:LEU:HD12 | 17 | 1.48 |
| (2,572) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB3 | 7 | 1.48 |
| (2,572) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB1 | 7 | 1.48 |
| (2,572) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB2 | 7 | 1.48 |
| (2,572) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB3 | 7 | 1.48 |
| (2,572) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB1 | 7 | 1.48 |
| (2,572) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB2 | 7 | 1.48 |
| (2,572) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB3 | 7 | 1.48 |
| (2,572) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB1 | 7 | 1.48 |
| (2,572) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB2 | 7 | 1.48 |
| (2,443) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:43:PHE:HB2 | 9 | 1.48 |
| (2,161) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:52:PHE:HB3 | 20 | 1.48 |
| (2,161) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:52:PHE:HB3 | 20 | 1.48 |
| (2,161) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:52:PHE:HB3 | 20 | 1.48 |
| (2,1044) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:56:ASP:HB2 | 6 | 1.48 |
| (2,827) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:54:LYS:HD2 | 1 | 1.47 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG23 | 20 | 1.47 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG21 | 20 | 1.47 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG22 | 20 | 1.47 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:61:GLY:HA3 | 15 | 1.47 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:61:GLY:HA3 | 15 | 1.47 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:61:GLY:HA3 | 15 | 1.47 |
| (2,318) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:75:LEU:HD11 | 7 | 1.47 |
| (2,318) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:75:LEU:HD13 | 7 | 1.47 |
| (2,318) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:75:LEU:HD12 | 7 | 1.47 |
| (2,161) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:52:PHE:HB3 | 15 | 1.47 |
| (2,161) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:52:PHE:HB3 | 15 | 1.47 |
| (2,161) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:52:PHE:HB3 | 15 | 1.47 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG21 | 1:A:92:PRO:HG2 | 10 | 1.46 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG23 | 1:A:92:PRO:HG2 | 10 | 1.46 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG22 | 1:A:92:PRO:HG2 | 10 | 1.46 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG23 | 17 | 1.46 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG21 | 17 | 1.46 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG22 | 17 | 1.46 |
| (2,825) | 1:A:54:LYS:HB2 | 1:A:26:TYR:HB2 | 13 | 1.45 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG23 | 7 | 1.45 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG21 | 7 | 1.45 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG22 | 7 | 1.45 |
| (2,154) | 1:A:2:VAL:HA | 1:A:52:PHE:HB3 | 13 | 1.45 |
| (2,37) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:42:LYS:HG2 | 18 | 1.44 |
| (2,37) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:42:LYS:HG3 | 18 | 1.44 |
| (2,318) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:75:LEU:HD11 | 17 | 1.44 |
| (2,318) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:75:LEU:HD13 | 17 | 1.44 |
| (2,318) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:75:LEU:HD12 | 17 | 1.44 |
| (2,938) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:21:VAL:H | 8 | 1.43 |
| (2,1079) | 1:A:65:GLN:H | 1:A:66:LYS:HB2 | 2 | 1.43 |
| (2,1079) | 1:A:65:GLN:H | 1:A:66:LYS:HB2 | 8 | 1.43 |
| (2,938) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:21:VAL:H | 15 | 1.42 |
| (2,938) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:21:VAL:H | 16 | 1.42 |
| (2,938) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:21:VAL:H | 20 | 1.42 |
| (2,747) | 1:A:95:ILE:HG12 | 1:A:99:ILE:HG12 | 9 | 1.42 |
| (2,747) | 1:A:95:ILE:HG12 | 1:A:99:ILE:HG12 | 11 | 1.42 |
| (2,37) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:42:LYS:HG2 | 11 | 1.42 |
| (2,37) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:42:LYS:HG3 | 11 | 1.42 |
| (2,933) | 1:A:19:LYS:HG2 | 1:A:20:LEU:H | 12 | 1.41 |
| (2,933) | 1:A:19:LYS:HG2 | 1:A:20:LEU:H | 17 | 1.41 |
| (2,747) | 1:A:95:ILE:HG12 | 1:A:99:ILE:HG12 | 14 | 1.41 |
| (2,747) | 1:A:95:ILE:HG12 | 1:A:99:ILE:HG12 | 20 | 1.41 |
| (2,377) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:92:PRO:HG2 | 7 | 1.41 |
| (2,938) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:21:VAL:H | 5 | 1.4 |
| (2,938) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:21:VAL:H | 10 | 1.4 |
| (2,821) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:82:LYS:H | 11 | 1.4 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG21 | 1:A:92:PRO:HG2 | 13 | 1.4 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG23 | 1:A:92:PRO:HG2 | 13 | 1.4 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG22 | 1:A:92:PRO:HG2 | 13 | 1.4 |
| (2,747) | 1:A:95:ILE:HG12 | 1:A:99:ILE:HG12 | 5 | 1.4 |
| (2,747) | 1:A:95:ILE:HG12 | 1:A:99:ILE:HG12 | 19 | 1.4 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG23 | 10 | 1.4 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG21 | 10 | 1.4 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG22 | 10 | 1.4 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG13 | 1:A:52:PHE:HB3 | 9 | 1.4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG12 | 1:A:52:PHE:HB3 | 9 | 1.4 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG11 | 1:A:52:PHE:HB3 | 9 | 1.4 |
| (2,161) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:52:PHE:HB3 | 14 | 1.4 |
| (2,161) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:52:PHE:HB3 | 14 | 1.4 |
| (2,161) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:52:PHE:HB3 | 14 | 1.4 |
| (2,160) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:53:TYR:HA | 7 | 1.4 |
| (2,160) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:53:TYR:HA | 7 | 1.4 |
| (2,160) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:53:TYR:HA | 7 | 1.4 |
| (2,1294) | 1:A:52:PHE:HE2 | 1:A:44:SER:HB3 | 9 | 1.4 |
| (2,1294) | 1:A:52:PHE:HE1 | 1:A:44:SER:HB3 | 9 | 1.4 |
| (2,998) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:46:GLN:HG3 | 18 | 1.39 |
| (2,938) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:21:VAL:H | 7 | 1.39 |
| (2,938) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:21:VAL:H | 11 | 1.39 |
| (2,933) | 1:A:19:LYS:HG2 | 1:A:20:LEU:H | 3 | 1.39 |
| (2,933) | 1:A:19:LYS:HG2 | 1:A:20:LEU:H | 7 | 1.39 |
| (2,933) | 1:A:19:LYS:HG2 | 1:A:20:LEU:H | 11 | 1.39 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG23 | 6 | 1.39 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG21 | 6 | 1.39 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG22 | 6 | 1.39 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG23 | 12 | 1.39 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG21 | 12 | 1.39 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG22 | 12 | 1.39 |
| (2,158) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:54:LYS:H | 8 | 1.39 |
| (2,158) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:54:LYS:H | 8 | 1.39 |
| (2,158) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:54:LYS:H | 8 | 1.39 |
| (2,821) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:82:LYS:H | 5 | 1.38 |
| (2,766) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:96:LYS:HD2 | 14 | 1.38 |
| (2,747) | 1:A:95:ILE:HG12 | 1:A:99:ILE:HG12 | 6 | 1.38 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG23 | 14 | 1.38 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG21 | 14 | 1.38 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG22 | 14 | 1.38 |
| (2,494) | 1:A:60:LEU:HB3 | 1:A:55:LEU:HB2 | 15 | 1.38 |
| (2,377) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:92:PRO:HG2 | 9 | 1.38 |
| (2,998) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:46:GLN:HG3 | 13 | 1.37 |
| (2,976) | 1:A:39:MET:H | 1:A:36:ILE:HG13 | 11 | 1.37 |
| (2,938) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:21:VAL:H | 19 | 1.37 |
| (2,933) | 1:A:19:LYS:HG2 | 1:A:20:LEU:H | 1 | 1.37 |
| (2,933) | 1:A:19:LYS:HG2 | 1:A:20:LEU:H | 9 | 1.37 |
| (2,933) | 1:A:19:LYS:HG2 | 1:A:20:LEU:H | 20 | 1.37 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG23 | 9 | 1.37 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG21 | 9 | 1.37 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG22 | 9 | 1.37 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG23 | 15 | 1.37 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG21 | 15 | 1.37 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG22 | 15 | 1.37 |
| (2,161) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:52:PHE:HB3 | 4 | 1.37 |
| (2,161) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:52:PHE:HB3 | 4 | 1.37 |
| (2,161) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:52:PHE:HB3 | 4 | 1.37 |
| (2,938) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:21:VAL:H | 17 | 1.36 |
| (2,933) | 1:A:19:LYS:HG2 | 1:A:20:LEU:H | 10 | 1.36 |
| (2,821) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:82:LYS:H | 7 | 1.36 |
| (2,377) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:92:PRO:HG2 | 11 | 1.36 |
| (2,1044) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:56:ASP:HB2 | 7 | 1.36 |
| (2,938) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:21:VAL:H | 3 | 1.35 |
| (2,822) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:83:GLU:H | 14 | 1.35 |
| (2,821) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:82:LYS:H | 4 | 1.35 |
| (2,747) | 1:A:95:ILE:HG12 | 1:A:99:ILE:HG12 | 3 | 1.35 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG23 | 2 | 1.35 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG21 | 2 | 1.35 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG22 | 2 | 1.35 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG23 | 13 | 1.35 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG21 | 13 | 1.35 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG22 | 13 | 1.35 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG23 | 18 | 1.35 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG21 | 18 | 1.35 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG22 | 18 | 1.35 |
| (2,572) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB3 | 15 | 1.35 |
| (2,572) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB1 | 15 | 1.35 |
| (2,572) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB2 | 15 | 1.35 |
| (2,572) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB3 | 15 | 1.35 |
| (2,572) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB1 | 15 | 1.35 |
| (2,572) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB2 | 15 | 1.35 |
| (2,572) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB3 | 15 | 1.35 |
| (2,572) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB1 | 15 | 1.35 |
| (2,572) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB2 | 15 | 1.35 |
| (2,411) | 1:A:40:ILE:HG22 | 1:A:54:LYS:HD2 | 15 | 1.35 |
| (2,411) | 1:A:40:ILE:HG21 | 1:A:54:LYS:HD2 | 15 | 1.35 |
| (2,411) | 1:A:40:ILE:HG23 | 1:A:54:LYS:HD2 | 15 | 1.35 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG13 | 1:A:52:PHE:HB3 | 13 | 1.35 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG12 | 1:A:52:PHE:HB3 | 13 | 1.35 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG11 | 1:A:52:PHE:HB3 | 13 | 1.35 |
| (2,938) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:21:VAL:H | 2 | 1.34 |
| (2,938) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:21:VAL:H | 6 | 1.34 |
| (2,933) | 1:A:19:LYS:HG2 | 1:A:20:LEU:H | 16 | 1.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,825) | 1:A:54:LYS:HB2 | 1:A:26:TYR:HB2 | 8 | 1.34 |
| (2,821) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:82:LYS:H | 14 | 1.34 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:47:TYR:HE2 | 8 | 1.34 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:47:TYR:HE1 | 8 | 1.34 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:47:TYR:HE2 | 8 | 1.34 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:47:TYR:HE1 | 8 | 1.34 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:47:TYR:HE2 | 8 | 1.34 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:47:TYR:HE1 | 8 | 1.34 |
| (2,747) | 1:A:95:ILE:HG12 | 1:A:99:ILE:HG12 | 10 | 1.34 |
| (2,635) | 1:A:76:LEU:HD23 | 1:A:87:VAL:H | 5 | 1.34 |
| (2,635) | 1:A:76:LEU:HD21 | 1:A:87:VAL:H | 5 | 1.34 |
| (2,635) | 1:A:76:LEU:HD22 | 1:A:87:VAL:H | 5 | 1.34 |
| (2,443) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:43:PHE:HB2 | 7 | 1.34 |
| (2,441) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:43:PHE:H | 11 | 1.34 |
| (2,1294) | 1:A:52:PHE:HE2 | 1:A:44:SER:HB3 | 4 | 1.34 |
| (2,1294) | 1:A:52:PHE:HE1 | 1:A:44:SER:HB3 | 4 | 1.34 |
| (2,572) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB3 | 9 | 1.33 |
| (2,572) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB1 | 9 | 1.33 |
| (2,572) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB2 | 9 | 1.33 |
| (2,572) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB3 | 9 | 1.33 |
| (2,572) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB1 | 9 | 1.33 |
| (2,572) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB2 | 9 | 1.33 |
| (2,572) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB3 | 9 | 1.33 |
| (2,572) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB1 | 9 | 1.33 |
| (2,572) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB2 | 9 | 1.33 |
| (2,283) | 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG11 | 9 | 1.33 |
| (2,283) | 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG13 | 9 | 1.33 |
| (2,283) | 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG12 | 9 | 1.33 |
| (2,283) | 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG11 | 9 | 1.33 |
| (2,283) | 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG13 | 9 | 1.33 |
| (2,283) | 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG12 | 9 | 1.33 |
| (2,283) | 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG11 | 9 | 1.33 |
| (2,283) | 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG13 | 9 | 1.33 |
| (2,283) | 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG12 | 9 | 1.33 |
| (2,1044) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:56:ASP:HB2 | 10 | 1.33 |
| (2,998) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:46:GLN:HG3 | 11 | 1.32 |
| (2,938) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:21:VAL:H | 12 | 1.32 |
| (2,821) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:82:LYS:H | 1 | 1.32 |
| (2,821) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:82:LYS:H | 2 | 1.32 |
| (2,496) | 1:A:54:LYS:HE2 | 1:A:2:VAL:HB | 12 | 1.32 |
| (2,477) | 1:A:52:PHE:HB2 | 1:A:47:TYR:HD2 | 7 | 1.32 |
| (2,477) | 1:A:52:PHE:HB2 | 1:A:47:TYR:HD1 | 7 | 1.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,377) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:92:PRO:HG2 | 4 | 1.32 |
| (2,161) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:52:PHE:HB3 | 10 | 1.32 |
| (2,161) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:52:PHE:HB3 | 10 | 1.32 |
| (2,161) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:52:PHE:HB3 | 10 | 1.32 |
| (2,976) | 1:A:39:MET:H | 1:A:36:ILE:HG13 | 18 | 1.31 |
| (2,938) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:21:VAL:H | 14 | 1.31 |
| (2,933) | 1:A:19:LYS:HG2 | 1:A:20:LEU:H | 5 | 1.31 |
| (2,821) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:82:LYS:H | 12 | 1.31 |
| (2,821) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:82:LYS:H | 15 | 1.31 |
| (2,407) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:54:LYS:HD2 | 15 | 1.31 |
| (2,407) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:54:LYS:HD2 | 15 | 1.31 |
| (2,407) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:54:LYS:HD2 | 15 | 1.31 |
| (2,377) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:92:PRO:HG2 | 5 | 1.31 |
| (2,158) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:54:LYS:H | 7 | 1.31 |
| (2,158) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:54:LYS:H | 7 | 1.31 |
| (2,158) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:54:LYS:H | 7 | 1.31 |
| (2,933) | 1:A:19:LYS:HG2 | 1:A:20:LEU:H | 19 | 1.3 |
| (2,821) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:82:LYS:H | 6 | 1.3 |
| (2,821) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:82:LYS:H | 19 | 1.3 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG21 | 1:A:92:PRO:HG2 | 9 | 1.3 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG23 | 1:A:92:PRO:HG2 | 9 | 1.3 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG22 | 1:A:92:PRO:HG2 | 9 | 1.3 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG23 | 5 | 1.3 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG21 | 5 | 1.3 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG22 | 5 | 1.3 |
| (2,407) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:54:LYS:HD2 | 14 | 1.3 |
| (2,407) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:54:LYS:HD2 | 14 | 1.3 |
| (2,407) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:54:LYS:HD2 | 14 | 1.3 |
| (2,377) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:92:PRO:HG2 | 6 | 1.3 |
| (2,1044) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:56:ASP:HB2 | 12 | 1.3 |
| (2,933) | 1:A:19:LYS:HG2 | 1:A:20:LEU:H | 6 | 1.29 |
| (2,821) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:82:LYS:H | 3 | 1.29 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG23 | 3 | 1.29 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG21 | 3 | 1.29 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG22 | 3 | 1.29 |
| (2,377) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:92:PRO:HG2 | 15 | 1.29 |
| (2,283) | 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG11 | 4 | 1.29 |
| (2,283) | 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG13 | 4 | 1.29 |
| (2,283) | 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG12 | 4 | 1.29 |
| (2,283) | 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG11 | 4 | 1.29 |
| (2,283) | 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG13 | 4 | 1.29 |
| (2,283) | 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG12 | 4 | 1.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,283) | 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG11 | 4 | 1.29 |
| (2,283) | 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG13 | 4 | 1.29 |
| (2,283) | 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG12 | 4 | 1.29 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG13 | 1:A:52:PHE:HB3 | 10 | 1.29 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG12 | 1:A:52:PHE:HB3 | 10 | 1.29 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG11 | 1:A:52:PHE:HB3 | 10 | 1.29 |
| (2,1044) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:56:ASP:HB2 | 1 | 1.29 |
| (2,825) | 1:A:54:LYS:HB2 | 1:A:26:TYR:HB2 | 20 | 1.28 |
| (2,821) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:82:LYS:H | 16 | 1.28 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG21 | 1:A:92:PRO:HG2 | 7 | 1.28 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG23 | 1:A:92:PRO:HG2 | 7 | 1.28 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG22 | 1:A:92:PRO:HG2 | 7 | 1.28 |
| (2,585) | 1:A:19:LYS:HE3 | 1:A:20:LEU:H | 2 | 1.28 |
| (2,411) | 1:A:40:ILE:HG22 | 1:A:54:LYS:HD2 | 14 | 1.28 |
| (2,411) | 1:A:40:ILE:HG21 | 1:A:54:LYS:HD2 | 14 | 1.28 |
| (2,411) | 1:A:40:ILE:HG23 | 1:A:54:LYS:HD2 | 14 | 1.28 |
| (2,377) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:92:PRO:HG2 | 17 | 1.28 |
| (2,377) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:92:PRO:HG2 | 18 | 1.28 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG13 | 1:A:52:PHE:HB3 | 15 | 1.28 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG12 | 1:A:52:PHE:HB3 | 15 | 1.28 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG11 | 1:A:52:PHE:HB3 | 15 | 1.28 |
| (2,1049) | 1:A:59:GLU:H | 1:A:56:ASP:HB2 | 7 | 1.28 |
| (2,1044) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:56:ASP:HB2 | 2 | 1.28 |
| (2,938) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:21:VAL:H | 9 | 1.27 |
| (2,821) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:82:LYS:H | 8 | 1.27 |
| (2,821) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:82:LYS:H | 9 | 1.27 |
| (2,161) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:52:PHE:HB3 | 2 | 1.27 |
| (2,161) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:52:PHE:HB3 | 2 | 1.27 |
| (2,161) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:52:PHE:HB3 | 2 | 1.27 |
| (2,933) | 1:A:19:LYS:HG2 | 1:A:20:LEU:H | 14 | 1.26 |
| (2,821) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:82:LYS:H | 10 | 1.26 |
| (2,821) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:82:LYS:H | 20 | 1.26 |
| (2,719) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:86:LYS:HE3 | 2 | 1.26 |
| (2,719) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:86:LYS:HE3 | 2 | 1.26 |
| (2,719) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:86:LYS:HE3 | 2 | 1.26 |
| (2,377) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:92:PRO:HG2 | 1 | 1.26 |
| (2,1261) | 1:A:80:ASN:HD22 | 1:A:82:LYS:HG2 | 2 | 1.26 |
| (2,1061) | 1:A:61:GLY:H | 1:A:63:VAL:HG12 | 13 | 1.26 |
| (2,1061) | 1:A:61:GLY:H | 1:A:63:VAL:HG11 | 13 | 1.26 |
| (2,1061) | 1:A:61:GLY:H | 1:A:63:VAL:HG13 | 13 | 1.26 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:61:GLY:HA3 | 7 | 1.25 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:61:GLY:HA3 | 7 | 1.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:61:GLY:HA3 | 7 | 1.25 |
| (2,456) | 1:A:85:ALA:HB1 | 1:A:97:GLN:HE22 | 10 | 1.25 |
| (2,456) | 1:A:85:ALA:HB2 | 1:A:97:GLN:HE22 | 10 | 1.25 |
| (2,456) | 1:A:85:ALA:HB3 | 1:A:97:GLN:HE22 | 10 | 1.25 |
| (2,399) | 1:A:65:GLN:HG3 | 1:A:61:GLY:HA3 | 13 | 1.25 |
| (2,161) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:52:PHE:HB3 | 13 | 1.25 |
| (2,161) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:52:PHE:HB3 | 13 | 1.25 |
| (2,161) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:52:PHE:HB3 | 13 | 1.25 |
| (2,951) | 1:A:76:LEU:H | 1:A:75:LEU:HD11 | 4 | 1.24 |
| (2,951) | 1:A:76:LEU:H | 1:A:75:LEU:HD13 | 4 | 1.24 |
| (2,951) | 1:A:76:LEU:H | 1:A:75:LEU:HD12 | 4 | 1.24 |
| (2,822) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:83:GLU:H | 3 | 1.24 |
| (2,821) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:82:LYS:H | 17 | 1.24 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG21 | 1:A:92:PRO:HG2 | 8 | 1.24 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG23 | 1:A:92:PRO:HG2 | 8 | 1.24 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG22 | 1:A:92:PRO:HG2 | 8 | 1.24 |
| (2,399) | 1:A:65:GLN:HG3 | 1:A:61:GLY:HA3 | 9 | 1.24 |
| (2,377) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:92:PRO:HG2 | 16 | 1.24 |
| (2,377) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:92:PRO:HG2 | 20 | 1.24 |
| (2,976) | 1:A:39:MET:H | 1:A:36:ILE:HG13 | 15 | 1.23 |
| (2,717) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:74:THR:HA | 15 | 1.23 |
| (2,717) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:74:THR:HA | 15 | 1.23 |
| (2,717) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:74:THR:HA | 15 | 1.23 |
| (2,576) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:THR:HA | 20 | 1.23 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG13 | 1:A:52:PHE:HB3 | 14 | 1.23 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG12 | 1:A:52:PHE:HB3 | 14 | 1.23 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG11 | 1:A:52:PHE:HB3 | 14 | 1.23 |
| (2,717) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:74:THR:HA | 6 | 1.22 |
| (2,717) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:74:THR:HA | 6 | 1.22 |
| (2,717) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:74:THR:HA | 6 | 1.22 |
| (2,576) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:THR:HA | 5 | 1.22 |
| (2,576) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:THR:HA | 10 | 1.22 |
| (2,377) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:92:PRO:HG2 | 12 | 1.22 |
| (2,1044) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:56:ASP:HB2 | 16 | 1.22 |
| (2,976) | 1:A:39:MET:H | 1:A:36:ILE:HG13 | 3 | 1.21 |
| (2,976) | 1:A:39:MET:H | 1:A:36:ILE:HG13 | 13 | 1.21 |
| (2,933) | 1:A:19:LYS:HG2 | 1:A:20:LEU:H | 13 | 1.21 |
| (2,822) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:83:GLU:H | 16 | 1.21 |
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG23 | 1:A:75:LEU:HD11 | 7 | 1.21 |
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG23 | 1:A:75:LEU:HD13 | 7 | 1.21 |
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG23 | 1:A:75:LEU:HD12 | 7 | 1.21 |
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG21 | 1:A:75:LEU:HD11 | 7 | 1.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG21 | 1:A:75:LEU:HD13 | 7 | 1.21 |
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG21 | 1:A:75:LEU:HD12 | 7 | 1.21 |
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG22 | 1:A:75:LEU:HD11 | 7 | 1.21 |
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG22 | 1:A:75:LEU:HD13 | 7 | 1.21 |
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG22 | 1:A:75:LEU:HD12 | 7 | 1.21 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG23 | 8 | 1.21 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG21 | 8 | 1.21 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG22 | 8 | 1.21 |
| (2,399) | 1:A:65:GLN:HG3 | 1:A:61:GLY:HA3 | 14 | 1.21 |
| (2,399) | 1:A:65:GLN:HG3 | 1:A:61:GLY:HA3 | 17 | 1.21 |
| (2,377) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:92:PRO:HG2 | 2 | 1.21 |
| (2,377) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:92:PRO:HG2 | 10 | 1.21 |
| (2,377) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:92:PRO:HG2 | 13 | 1.21 |
| (2,933) | 1:A:19:LYS:HG2 | 1:A:20:LEU:H | 18 | 1.2 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG23 | 16 | 1.2 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG21 | 16 | 1.2 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG22 | 16 | 1.2 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG23 | 19 | 1.2 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG21 | 19 | 1.2 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG22 | 19 | 1.2 |
| (2,502) | 1:A:55:LEU:HD11 | 1:A:5:PHE:HB3 | 2 | 1.2 |
| (2,502) | 1:A:55:LEU:HD12 | 1:A:5:PHE:HB3 | 2 | 1.2 |
| (2,502) | 1:A:55:LEU:HD13 | 1:A:5:PHE:HB3 | 2 | 1.2 |
| (2,399) | 1:A:65:GLN:HG3 | 1:A:61:GLY:HA3 | 15 | 1.2 |
| (2,377) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:92:PRO:HG2 | 14 | 1.2 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG13 | 1:A:52:PHE:HB3 | 2 | 1.2 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG12 | 1:A:52:PHE:HB3 | 2 | 1.2 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG11 | 1:A:52:PHE:HB3 | 2 | 1.2 |
| (2,1174) | 1:A:87:VAL:H | 1:A:86:LYS:HG2 | 20 | 1.2 |
| (2,749) | 1:A:96:LYS:HA | 1:A:43:PHE:HD2 | 5 | 1.19 |
| (2,749) | 1:A:96:LYS:HA | 1:A:43:PHE:HD1 | 5 | 1.19 |
| (2,555) | 1:A:63:VAL:HA | 1:A:66:LYS:HG3 | 19 | 1.19 |
| (2,496) | 1:A:54:LYS:HE2 | 1:A:2:VAL:HB | 20 | 1.19 |
| (2,399) | 1:A:65:GLN:HG3 | 1:A:61:GLY:HA3 | 3 | 1.19 |
| (2,399) | 1:A:65:GLN:HG3 | 1:A:61:GLY:HA3 | 4 | 1.19 |
| (2,384) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:54:LYS:HD2 | 16 | 1.19 |
| (2,384) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:54:LYS:HD2 | 16 | 1.19 |
| (2,384) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:54:LYS:HD2 | 16 | 1.19 |
| (2,976) | 1:A:39:MET:H | 1:A:36:ILE:HG13 | 4 | 1.18 |
| (2,825) | 1:A:54:LYS:HB2 | 1:A:26:TYR:HB2 | 11 | 1.18 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG23 | 1 | 1.18 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG21 | 1 | 1.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG22 | 1 | 1.18 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG12 | 6 | 1.18 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG11 | 6 | 1.18 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG13 | 6 | 1.18 |
| (2,399) | 1:A:65:GLN:HG3 | 1:A:61:GLY:HA3 | 12 | 1.18 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG13 | 1:A:52:PHE:HB3 | 17 | 1.18 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG12 | 1:A:52:PHE:HB3 | 17 | 1.18 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG11 | 1:A:52:PHE:HB3 | 17 | 1.18 |
| (2,976) | 1:A:39:MET:H | 1:A:36:ILE:HG13 | 2 | 1.17 |
| (2,976) | 1:A:39:MET:H | 1:A:36:ILE:HG13 | 7 | 1.17 |
| (2,976) | 1:A:39:MET:H | 1:A:36:ILE:HG13 | 20 | 1.17 |
| (2,822) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:83:GLU:H | 2 | 1.17 |
| (2,719) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:86:LYS:HE3 | 8 | 1.17 |
| (2,719) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:86:LYS:HE3 | 8 | 1.17 |
| (2,719) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:86:LYS:HE3 | 8 | 1.17 |
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG23 | 1:A:75:LEU:HD11 | 19 | 1.17 |
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG23 | 1:A:75:LEU:HD13 | 19 | 1.17 |
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG23 | 1:A:75:LEU:HD12 | 19 | 1.17 |
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG21 | 1:A:75:LEU:HD11 | 19 | 1.17 |
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG21 | 1:A:75:LEU:HD13 | 19 | 1.17 |
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG21 | 1:A:75:LEU:HD12 | 19 | 1.17 |
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG22 | 1:A:75:LEU:HD11 | 19 | 1.17 |
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG22 | 1:A:75:LEU:HD13 | 19 | 1.17 |
| (2,639) | 1:A:22:VAL:HG22 | 1:A:75:LEU:HD12 | 19 | 1.17 |
| (2,625) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:87:VAL:HB | 4 | 1.17 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:58:ASP:HB2 | 2 | 1.17 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:58:ASP:HB2 | 2 | 1.17 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:58:ASP:HB2 | 2 | 1.17 |
| (2,441) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:43:PHE:H | 18 | 1.17 |
| (2,270) | 1:A:19:LYS:HA | 1:A:19:LYS:HE3 | 19 | 1.17 |
| (2,822) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:83:GLU:H | 12 | 1.16 |
| (2,822) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:83:GLU:H | 19 | 1.16 |
| (2,717) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:74:THR:HA | 7 | 1.16 |
| (2,717) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:74:THR:HA | 7 | 1.16 |
| (2,717) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:74:THR:HA | 7 | 1.16 |
| (2,717) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:74:THR:HA | 9 | 1.16 |
| (2,717) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:74:THR:HA | 9 | 1.16 |
| (2,717) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:74:THR:HA | 9 | 1.16 |
| (2,576) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:THR:HA | 15 | 1.16 |
| (2,453) | 1:A:50:ALA:HA | 1:A:20:LEU:HB2 | 9 | 1.16 |
| (2,399) | 1:A:65:GLN:HG3 | 1:A:61:GLY:HA3 | 1 | 1.16 |
| (2,377) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:92:PRO:HG2 | 8 | 1.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG13 | 1:A:52:PHE:HB3 | 20 | 1.16 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG12 | 1:A:52:PHE:HB3 | 20 | 1.16 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG11 | 1:A:52:PHE:HB3 | 20 | 1.16 |
| (2,976) | 1:A:39:MET:H | 1:A:36:ILE:HG13 | 16 | 1.15 |
| (2,976) | 1:A:39:MET:H | 1:A:36:ILE:HG13 | 19 | 1.15 |
| (2,822) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:83:GLU:H | 9 | 1.15 |
| (2,576) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:THR:HA | 1 | 1.15 |
| (2,154) | 1:A:2:VAL:HA | 1:A:52:PHE:HB3 | 17 | 1.15 |
| (2,976) | 1:A:39:MET:H | 1:A:36:ILE:HG13 | 1 | 1.14 |
| (2,976) | 1:A:39:MET:H | 1:A:36:ILE:HG13 | 14 | 1.14 |
| (2,823) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:83:GLU:HA | 14 | 1.14 |
| (2,407) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:54:LYS:HD2 | 12 | 1.14 |
| (2,407) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:54:LYS:HD2 | 12 | 1.14 |
| (2,407) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:54:LYS:HD2 | 12 | 1.14 |
| (2,976) | 1:A:39:MET:H | 1:A:36:ILE:HG13 | 6 | 1.13 |
| (2,976) | 1:A:39:MET:H | 1:A:36:ILE:HG13 | 8 | 1.13 |
| (2,822) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:83:GLU:H | 7 | 1.13 |
| (2,441) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:43:PHE:H | 7 | 1.13 |
| (2,441) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:43:PHE:H | 13 | 1.13 |
| (2,576) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:THR:HA | 13 | 1.12 |
| (2,406) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:2:VAL:HG13 | 7 | 1.12 |
| (2,406) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:2:VAL:HG12 | 7 | 1.12 |
| (2,406) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:2:VAL:HG11 | 7 | 1.12 |
| (2,377) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:92:PRO:HG2 | 3 | 1.12 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 14 | 1.12 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 14 | 1.12 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 14 | 1.12 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:58:ASP:HB2 | 1 | 1.11 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:58:ASP:HB2 | 1 | 1.11 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:58:ASP:HB2 | 1 | 1.11 |
| (2,443) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:43:PHE:HB2 | 11 | 1.11 |
| (2,1267) | 1:A:49:GLN:HE22 | 1:A:20:LEU:HB2 | 9 | 1.11 |
| (2,822) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:83:GLU:H | 20 | 1.1 |
| (2,555) | 1:A:63:VAL:HA | 1:A:66:LYS:HG3 | 8 | 1.1 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:58:ASP:HB2 | 11 | 1.1 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:58:ASP:HB2 | 11 | 1.1 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:58:ASP:HB2 | 11 | 1.1 |
| (2,502) | 1:A:55:LEU:HD11 | 1:A:5:PHE:HB3 | 10 | 1.1 |
| (2,502) | 1:A:55:LEU:HD12 | 1:A:5:PHE:HB3 | 10 | 1.1 |
| (2,502) | 1:A:55:LEU:HD13 | 1:A:5:PHE:HB3 | 10 | 1.1 |
| (2,407) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:54:LYS:HD2 | 4 | 1.1 |
| (2,407) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:54:LYS:HD2 | 4 | 1.1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,407) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:54:LYS:HD2 | 4 | 1.1 |
| (2,399) | 1:A:65:GLN:HG3 | 1:A:61:GLY:HA3 | 5 | 1.1 |
| (2,976) | 1:A:39:MET:H | 1:A:36:ILE:HG13 | 9 | 1.09 |
| (2,976) | 1:A:39:MET:H | 1:A:36:ILE:HG13 | 10 | 1.09 |
| (2,494) | 1:A:60:LEU:HB3 | 1:A:55:LEU:HB2 | 6 | 1.09 |
| (2,976) | 1:A:39:MET:H | 1:A:36:ILE:HG13 | 5 | 1.08 |
| (2,976) | 1:A:39:MET:H | 1:A:36:ILE:HG13 | 17 | 1.08 |
| (2,822) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:83:GLU:H | 8 | 1.08 |
| (2,822) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:83:GLU:H | 17 | 1.08 |
| (2,822) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:83:GLU:H | 15 | 1.07 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:58:ASP:HB2 | 20 | 1.07 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:58:ASP:HB2 | 20 | 1.07 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:58:ASP:HB2 | 20 | 1.07 |
| (2,477) | 1:A:52:PHE:HB2 | 1:A:47:TYR:HD2 | 4 | 1.07 |
| (2,477) | 1:A:52:PHE:HB2 | 1:A:47:TYR:HD1 | 4 | 1.07 |
| (2,932) | 1:A:19:LYS:HB2 | 1:A:20:LEU:H | 8 | 1.06 |
| (2,717) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:74:THR:HA | 18 | 1.06 |
| (2,717) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:74:THR:HA | 18 | 1.06 |
| (2,717) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:74:THR:HA | 18 | 1.06 |
| (2,523) | 1:A:25:PHE:HB3 | 1:A:57:VAL:HG23 | 7 | 1.06 |
| (2,523) | 1:A:25:PHE:HB3 | 1:A:57:VAL:HG21 | 7 | 1.06 |
| (2,523) | 1:A:25:PHE:HB3 | 1:A:57:VAL:HG22 | 7 | 1.06 |
| (2,523) | 1:A:25:PHE:HB3 | 1:A:57:VAL:HG23 | 15 | 1.06 |
| (2,523) | 1:A:25:PHE:HB3 | 1:A:57:VAL:HG21 | 15 | 1.06 |
| (2,523) | 1:A:25:PHE:HB3 | 1:A:57:VAL:HG22 | 15 | 1.06 |
| (2,453) | 1:A:50:ALA:HA | 1:A:20:LEU:HB2 | 2 | 1.06 |
| (2,441) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:43:PHE:H | 9 | 1.06 |
| (2,399) | 1:A:65:GLN:HG3 | 1:A:61:GLY:HA3 | 8 | 1.06 |
| (2,1086) | 1:A:66:LYS:H | 1:A:66:LYS:HG3 | 8 | 1.06 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 3 | 1.06 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 3 | 1.06 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 3 | 1.06 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 10 | 1.06 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 10 | 1.06 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 10 | 1.06 |
| (2,825) | 1:A:54:LYS:HB2 | 1:A:26:TYR:HB2 | 5 | 1.05 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:61:GLY:HA3 | 5 | 1.05 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:61:GLY:HA3 | 5 | 1.05 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:61:GLY:HA3 | 5 | 1.05 |
| (2,443) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:43:PHE:HB2 | 2 | 1.05 |
| (2,443) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:43:PHE:HB2 | 20 | 1.05 |
| (2,377) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:92:PRO:HG2 | 19 | 1.05 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1235) | 1:A:33:CYS:H | 1:A:34:LYS:HB3 | 17 | 1.05 |
| (2,825) | 1:A:54:LYS:HB2 | 1:A:26:TYR:HB2 | 6 | 1.04 |
| (2,823) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:83:GLU:HA | 12 | 1.04 |
| (2,822) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:83:GLU:H | 4 | 1.04 |
| (2,822) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:83:GLU:H | 6 | 1.04 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG21 | 1:A:92:PRO:HG2 | 14 | 1.04 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG23 | 1:A:92:PRO:HG2 | 14 | 1.04 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG22 | 1:A:92:PRO:HG2 | 14 | 1.04 |
| (2,318) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:75:LEU:HD11 | 4 | 1.04 |
| (2,318) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:75:LEU:HD13 | 4 | 1.04 |
| (2,318) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:75:LEU:HD12 | 4 | 1.04 |
| (2,1086) | 1:A:66:LYS:H | 1:A:66:LYS:HG3 | 2 | 1.04 |
| (2,814) | 1:A:55:LEU:HB3 | 1:A:25:PHE:HD1 | 20 | 1.03 |
| (2,814) | 1:A:55:LEU:HB3 | 1:A:25:PHE:HD2 | 20 | 1.03 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:58:ASP:HB2 | 16 | 1.03 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:58:ASP:HB2 | 16 | 1.03 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:58:ASP:HB2 | 16 | 1.03 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG12 | 17 | 1.03 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG11 | 17 | 1.03 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG13 | 17 | 1.03 |
| (2,1261) | 1:A:80:ASN:HD22 | 1:A:82:LYS:HG2 | 19 | 1.03 |
| (2,1086) | 1:A:66:LYS:H | 1:A:66:LYS:HG3 | 19 | 1.03 |
| (2,981) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:41:GLU:HB3 | 7 | 1.02 |
| (2,717) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:74:THR:HA | 20 | 1.02 |
| (2,717) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:74:THR:HA | 20 | 1.02 |
| (2,717) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:74:THR:HA | 20 | 1.02 |
| (2,155) | 1:A:2:VAL:HB | 1:A:44:SER:HB2 | 17 | 1.02 |
| (2,825) | 1:A:54:LYS:HB2 | 1:A:26:TYR:HB2 | 7 | 1.01 |
| (2,555) | 1:A:63:VAL:HA | 1:A:66:LYS:HG3 | 2 | 1.01 |
| (2,502) | 1:A:55:LEU:HD11 | 1:A:5:PHE:HB3 | 14 | 1.01 |
| (2,502) | 1:A:55:LEU:HD12 | 1:A:5:PHE:HB3 | 14 | 1.01 |
| (2,502) | 1:A:55:LEU:HD13 | 1:A:5:PHE:HB3 | 14 | 1.01 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG12 | 3 | 1.01 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG11 | 3 | 1.01 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG13 | 3 | 1.01 |
| (2,443) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:43:PHE:HB2 | 18 | 1.01 |
| (2,155) | 1:A:2:VAL:HB | 1:A:44:SER:HB2 | 13 | 1.01 |
| (2,1235) | 1:A:33:CYS:H | 1:A:34:LYS:HB3 | 11 | 1.01 |
| (2,1044) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:56:ASP:HB2 | 18 | 1.01 |
| (2,717) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:74:THR:HA | 3 | 1.0 |
| (2,717) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:74:THR:HA | 3 | 1.0 |
| (2,717) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:74:THR:HA | 3 | 1.0 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG23 | 11 | 0.99 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG21 | 11 | 0.99 |
| (2,627) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:22:VAL:HG22 | 11 | 0.99 |
| (2,523) | 1:A:25:PHE:HB3 | 1:A:57:VAL:HG23 | 9 | 0.99 |
| (2,523) | 1:A:25:PHE:HB3 | 1:A:57:VAL:HG21 | 9 | 0.99 |
| (2,523) | 1:A:25:PHE:HB3 | 1:A:57:VAL:HG22 | 9 | 0.99 |
| (2,502) | 1:A:55:LEU:HD11 | 1:A:5:PHE:HB3 | 16 | 0.99 |
| (2,502) | 1:A:55:LEU:HD12 | 1:A:5:PHE:HB3 | 16 | 0.99 |
| (2,502) | 1:A:55:LEU:HD13 | 1:A:5:PHE:HB3 | 16 | 0.99 |
| (2,502) | 1:A:55:LEU:HD11 | 1:A:5:PHE:HB3 | 18 | 0.99 |
| (2,502) | 1:A:55:LEU:HD12 | 1:A:5:PHE:HB3 | 18 | 0.99 |
| (2,502) | 1:A:55:LEU:HD13 | 1:A:5:PHE:HB3 | 18 | 0.99 |
| (2,983) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:2:VAL:HG13 | 8 | 0.98 |
| (2,983) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:2:VAL:HG12 | 8 | 0.98 |
| (2,983) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:2:VAL:HG11 | 8 | 0.98 |
| (2,947) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:22:VAL:HG23 | 4 | 0.98 |
| (2,947) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:22:VAL:HG21 | 4 | 0.98 |
| (2,947) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:22:VAL:HG22 | 4 | 0.98 |
| (2,822) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:83:GLU:H | 1 | 0.98 |
| (2,441) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:43:PHE:H | 10 | 0.98 |
| (2,384) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:54:LYS:HD2 | 4 | 0.98 |
| (2,384) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:54:LYS:HD2 | 4 | 0.98 |
| (2,384) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:54:LYS:HD2 | 4 | 0.98 |
| (2,976) | 1:A:39:MET:H | 1:A:36:ILE:HG13 | 12 | 0.97 |
| (2,894) | 1:A:13:SER:H | 1:A:12:ASP:HB2 | 2 | 0.97 |
| (2,823) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:83:GLU:HA | 3 | 0.97 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG12 | 10 | 0.97 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG11 | 10 | 0.97 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG13 | 10 | 0.97 |
| (2,272) | 1:A:19:LYS:HB2 | 1:A:19:LYS:HE3 | 2 | 0.97 |
| (2,1021) | 1:A:53:TYR:H | 1:A:2:VAL:HG23 | 7 | 0.97 |
| (2,1021) | 1:A:53:TYR:H | 1:A:2:VAL:HG21 | 7 | 0.97 |
| (2,1021) | 1:A:53:TYR:H | 1:A:2:VAL:HG22 | 7 | 0.97 |
| (2,823) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:83:GLU:HA | 9 | 0.96 |
| (2,406) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:2:VAL:HG13 | 8 | 0.96 |
| (2,406) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:2:VAL:HG12 | 8 | 0.96 |
| (2,406) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:2:VAL:HG11 | 8 | 0.96 |
| (2,57) | 1:A:76:LEU:HA | 1:A:76:LEU:HD23 | 5 | 0.95 |
| (2,57) | 1:A:76:LEU:HA | 1:A:76:LEU:HD21 | 5 | 0.95 |
| (2,57) | 1:A:76:LEU:HA | 1:A:76:LEU:HD22 | 5 | 0.95 |
| (2,57) | 1:A:76:LEU:HD23 | 1:A:86:LYS:HA | 5 | 0.95 |
| (2,57) | 1:A:76:LEU:HD21 | 1:A:86:LYS:HA | 5 | 0.95 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,57) | 1:A:76:LEU:HD22 | 1:A:86:LYS:HA | 5 | 0.95 |
| (2,981) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:41:GLU:HB3 | 2 | 0.94 |
| (2,825) | 1:A:54:LYS:HB2 | 1:A:26:TYR:HB2 | 9 | 0.94 |
| (2,823) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:83:GLU:HA | 19 | 0.94 |
| (2,477) | 1:A:52:PHE:HB2 | 1:A:47:TYR:HD2 | 2 | 0.94 |
| (2,477) | 1:A:52:PHE:HB2 | 1:A:47:TYR:HD1 | 2 | 0.94 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG12 | 13 | 0.94 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG11 | 13 | 0.94 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG13 | 13 | 0.94 |
| (2,161) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:52:PHE:HB3 | 9 | 0.94 |
| (2,161) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:52:PHE:HB3 | 9 | 0.94 |
| (2,161) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:52:PHE:HB3 | 9 | 0.94 |
| (2,1235) | 1:A:33:CYS:H | 1:A:34:LYS:HB3 | 19 | 0.94 |
| (2,1190) | 1:A:96:LYS:H | 1:A:96:LYS:HB3 | 5 | 0.94 |
| (2,1066) | 1:A:62:ASP:H | 1:A:60:LEU:HD13 | 6 | 0.94 |
| (2,1066) | 1:A:62:ASP:H | 1:A:60:LEU:HD11 | 6 | 0.94 |
| (2,1066) | 1:A:62:ASP:H | 1:A:60:LEU:HD12 | 6 | 0.94 |
| (1,13) | 1:A:38:PRO:N | 1:A:34:LYS:O | 10 | 0.94 |
| (2,825) | 1:A:54:LYS:HB2 | 1:A:26:TYR:HB2 | 1 | 0.93 |
| (2,717) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:74:THR:HA | 5 | 0.93 |
| (2,717) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:74:THR:HA | 5 | 0.93 |
| (2,717) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:74:THR:HA | 5 | 0.93 |
| (2,585) | 1:A:19:LYS:HE3 | 1:A:20:LEU:H | 4 | 0.93 |
| (2,1261) | 1:A:80:ASN:HD22 | 1:A:82:LYS:HG2 | 5 | 0.93 |
| (2,1235) | 1:A:33:CYS:H | 1:A:34:LYS:HB3 | 6 | 0.93 |
| (2,1190) | 1:A:96:LYS:H | 1:A:96:LYS:HB3 | 1 | 0.93 |
| (2,1190) | 1:A:96:LYS:H | 1:A:96:LYS:HB3 | 10 | 0.93 |
| (2,1190) | 1:A:96:LYS:H | 1:A:96:LYS:HB3 | 20 | 0.93 |
| (2,715) | 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:77:LEU:HA | 9 | 0.92 |
| (2,715) | 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:77:LEU:HA | 9 | 0.92 |
| (2,715) | 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:77:LEU:HA | 9 | 0.92 |
| (2,443) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:43:PHE:HB2 | 13 | 0.92 |
| (2,324) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:54:LYS:HD2 | 4 | 0.92 |
| (2,324) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:54:LYS:HD2 | 4 | 0.92 |
| (2,324) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:54:LYS:HD2 | 4 | 0.92 |
| (2,1261) | 1:A:80:ASN:HD22 | 1:A:82:LYS:HG2 | 16 | 0.92 |
| (2,1235) | 1:A:33:CYS:H | 1:A:34:LYS:HB3 | 7 | 0.92 |
| (2,1071) | 1:A:63:VAL:H | 1:A:63:VAL:HG12 | 13 | 0.92 |
| (2,1071) | 1:A:63:VAL:H | 1:A:63:VAL:HG11 | 13 | 0.92 |
| (2,1071) | 1:A:63:VAL:H | 1:A:63:VAL:HG13 | 13 | 0.92 |
| (1,13) | 1:A:38:PRO:N | 1:A:34:LYS:O | 12 | 0.92 |
| (2,962) | 1:A:26:TYR:HB3 | 1:A:27:ALA:H | 3 | 0.91 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,825) | 1:A:54:LYS:HB2 | 1:A:26:TYR:HB2 | 12 | 0.91 |
| (2,711) | 1:A:87:VAL:HG21 | 1:A:87:VAL:H | 4 | 0.91 |
| (2,711) | 1:A:87:VAL:HG23 | 1:A:87:VAL:H | 4 | 0.91 |
| (2,711) | 1:A:87:VAL:HG22 | 1:A:87:VAL:H | 4 | 0.91 |
| (2,583) | 1:A:66:LYS:HE2 | 1:A:8:ALA:HB1 | 9 | 0.91 |
| (2,583) | 1:A:66:LYS:HE2 | 1:A:8:ALA:HB2 | 9 | 0.91 |
| (2,583) | 1:A:66:LYS:HE2 | 1:A:8:ALA:HB3 | 9 | 0.91 |
| (2,540) | 1:A:60:LEU:HG | 1:A:63:VAL:HG12 | 11 | 0.91 |
| (2,540) | 1:A:60:LEU:HG | 1:A:63:VAL:HG11 | 11 | 0.91 |
| (2,540) | 1:A:60:LEU:HG | 1:A:63:VAL:HG13 | 11 | 0.91 |
| (2,494) | 1:A:60:LEU:HB3 | 1:A:55:LEU:HB2 | 7 | 0.91 |
| (2,411) | 1:A:40:ILE:HG22 | 1:A:54:LYS:HD2 | 4 | 0.91 |
| (2,411) | 1:A:40:ILE:HG21 | 1:A:54:LYS:HD2 | 4 | 0.91 |
| (2,411) | 1:A:40:ILE:HG23 | 1:A:54:LYS:HD2 | 4 | 0.91 |
| (2,282) | 1:A:20:LEU:HD21 | 1:A:102:ASN:HB2 | 9 | 0.91 |
| (2,282) | 1:A:20:LEU:HD22 | 1:A:102:ASN:HB2 | 9 | 0.91 |
| (2,282) | 1:A:20:LEU:HD23 | 1:A:102:ASN:HB2 | 9 | 0.91 |
| (2,1190) | 1:A:96:LYS:H | 1:A:96:LYS:HB3 | 7 | 0.91 |
| (2,1071) | 1:A:63:VAL:H | 1:A:63:VAL:HG12 | 11 | 0.91 |
| (2,1071) | 1:A:63:VAL:H | 1:A:63:VAL:HG11 | 11 | 0.91 |
| (2,1071) | 1:A:63:VAL:H | 1:A:63:VAL:HG13 | 11 | 0.91 |
| (2,104) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:43:PHE:HB3 | 1 | 0.91 |
| (2,104) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:44:SER:HB2 | 1 | 0.91 |
| (2,823) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:83:GLU:HA | 4 | 0.9 |
| (2,822) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:83:GLU:H | 10 | 0.9 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB1 | 1:A:97:GLN:HB2 | 10 | 0.9 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB3 | 1:A:97:GLN:HB2 | 10 | 0.9 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB2 | 1:A:97:GLN:HB2 | 10 | 0.9 |
| (2,1235) | 1:A:33:CYS:H | 1:A:34:LYS:HB3 | 8 | 0.9 |
| (2,1190) | 1:A:96:LYS:H | 1:A:96:LYS:HB3 | 15 | 0.9 |
| (2,1190) | 1:A:96:LYS:H | 1:A:96:LYS:HB3 | 17 | 0.9 |
| (2,104) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:43:PHE:HB3 | 8 | 0.9 |
| (2,104) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:44:SER:HB2 | 8 | 0.9 |
| (2,1021) | 1:A:53:TYR:H | 1:A:2:VAL:HG23 | 8 | 0.9 |
| (2,1021) | 1:A:53:TYR:H | 1:A:2:VAL:HG21 | 8 | 0.9 |
| (2,1021) | 1:A:53:TYR:H | 1:A:2:VAL:HG22 | 8 | 0.9 |
| (2,827) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:54:LYS:HD2 | 12 | 0.89 |
| (2,1267) | 1:A:49:GLN:HE22 | 1:A:20:LEU:HB2 | 7 | 0.89 |
| (2,1252) | 1:A:67:ASN:HD21 | 1:A:66:LYS:HB2 | 2 | 0.89 |
| (2,1235) | 1:A:33:CYS:H | 1:A:34:LYS:HB3 | 20 | 0.89 |
| (2,823) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:83:GLU:HA | 6 | 0.88 |
| (2,823) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:83:GLU:HA | 15 | 0.88 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,823) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:83:GLU:HA | 17 | 0.88 |
| (2,717) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:74:THR:HA | 4 | 0.88 |
| (2,717) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:74:THR:HA | 4 | 0.88 |
| (2,717) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:74:THR:HA | 4 | 0.88 |
| (2,443) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:43:PHE:HB2 | 15 | 0.88 |
| (2,159) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:3:THR:H | 8 | 0.88 |
| (2,159) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:3:THR:H | 8 | 0.88 |
| (2,159) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:3:THR:H | 8 | 0.88 |
| (1,13) | 1:A:38:PRO:N | 1:A:34:LYS:O | 19 | 0.88 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG21 | 1:A:92:PRO:HG2 | 1 | 0.87 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG23 | 1:A:92:PRO:HG2 | 1 | 0.87 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG22 | 1:A:92:PRO:HG2 | 1 | 0.87 |
| (2,624) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 5 | 0.87 |
| (2,624) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 16 | 0.87 |
| (2,443) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:43:PHE:HB2 | 4 | 0.87 |
| (2,443) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:43:PHE:HB2 | 17 | 0.87 |
| (2,399) | 1:A:65:GLN:HG3 | 1:A:61:GLY:HA3 | 10 | 0.87 |
| (2,1190) | 1:A:96:LYS:H | 1:A:96:LYS:HB3 | 14 | 0.87 |
| (2,1190) | 1:A:96:LYS:H | 1:A:96:LYS:HB3 | 18 | 0.87 |
| (2,962) | 1:A:26:TYR:HB3 | 1:A:27:ALA:H | 18 | 0.86 |
| (2,823) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:83:GLU:HA | 2 | 0.86 |
| (2,823) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:83:GLU:HA | 11 | 0.86 |
| (2,636) | 1:A:76:LEU:HD23 | 1:A:86:LYS:HE3 | 3 | 0.86 |
| (2,636) | 1:A:76:LEU:HD21 | 1:A:86:LYS:HE3 | 3 | 0.86 |
| (2,636) | 1:A:76:LEU:HD22 | 1:A:86:LYS:HE3 | 3 | 0.86 |
| (2,624) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 3 | 0.86 |
| (2,624) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 7 | 0.86 |
| (2,624) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 12 | 0.86 |
| (2,624) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 13 | 0.86 |
| (2,624) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 14 | 0.86 |
| (2,624) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 15 | 0.86 |
| (2,624) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 17 | 0.86 |
| (2,624) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 20 | 0.86 |
| (2,494) | 1:A:60:LEU:HB3 | 1:A:55:LEU:HB2 | 19 | 0.86 |
| (2,443) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:43:PHE:HB2 | 3 | 0.86 |
| (2,443) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:43:PHE:HB2 | 6 | 0.86 |
| (2,104) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:43:PHE:HB3 | 3 | 0.86 |
| (2,104) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:44:SER:HB2 | 3 | 0.86 |
| (2,894) | 1:A:13:SER:H | 1:A:12:ASP:HB2 | 3 | 0.85 |
| (2,827) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:54:LYS:HD2 | 4 | 0.85 |
| (2,823) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:83:GLU:HA | 7 | 0.85 |
| (2,624) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 1 | 0.85 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,624) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 2 | 0.85 |
| (2,624) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 6 | 0.85 |
| (2,624) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 8 | 0.85 |
| (2,624) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 9 | 0.85 |
| (2,624) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 10 | 0.85 |
| (2,624) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 18 | 0.85 |
| (2,624) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 19 | 0.85 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB3 | 1:A:57:VAL:HB | 8 | 0.85 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB1 | 1:A:57:VAL:HB | 8 | 0.85 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB2 | 1:A:57:VAL:HB | 8 | 0.85 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB3 | 1:A:65:GLN:HG3 | 8 | 0.85 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB1 | 1:A:65:GLN:HG3 | 8 | 0.85 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB2 | 1:A:65:GLN:HG3 | 8 | 0.85 |
| (2,502) | 1:A:55:LEU:HD11 | 1:A:5:PHE:HB3 | 3 | 0.85 |
| (2,502) | 1:A:55:LEU:HD12 | 1:A:5:PHE:HB3 | 3 | 0.85 |
| (2,502) | 1:A:55:LEU:HD13 | 1:A:5:PHE:HB3 | 3 | 0.85 |
| (2,453) | 1:A:50:ALA:HA | 1:A:20:LEU:HB2 | 1 | 0.85 |
| (2,1190) | 1:A:96:LYS:H | 1:A:96:LYS:HB3 | 11 | 0.85 |
| (2,1190) | 1:A:96:LYS:H | 1:A:96:LYS:HB3 | 19 | 0.85 |
| (2,894) | 1:A:13:SER:H | 1:A:12:ASP:HB2 | 9 | 0.84 |
| (2,894) | 1:A:13:SER:H | 1:A:12:ASP:HB2 | 10 | 0.84 |
| (2,624) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 11 | 0.84 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD13 | 6 | 0.84 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD11 | 6 | 0.84 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD12 | 6 | 0.84 |
| (2,443) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:43:PHE:HB2 | 12 | 0.84 |
| (2,1155) | 1:A:82:LYS:H | 1:A:82:LYS:HG2 | 12 | 0.84 |
| (2,1140) | 1:A:80:ASN:H | 1:A:79:LYS:HG3 | 18 | 0.84 |
| (2,823) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:83:GLU:HA | 10 | 0.83 |
| (2,823) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:83:GLU:HA | 20 | 0.83 |
| (2,46) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:2:VAL:HG23 | 8 | 0.83 |
| (2,46) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:2:VAL:HG21 | 8 | 0.83 |
| (2,46) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:2:VAL:HG22 | 8 | 0.83 |
| (2,46) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:77:LEU:HD21 | 8 | 0.83 |
| (2,46) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:77:LEU:HD23 | 8 | 0.83 |
| (2,46) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:77:LEU:HD22 | 8 | 0.83 |
| (2,453) | 1:A:50:ALA:HA | 1:A:20:LEU:HB2 | 4 | 0.83 |
| (2,443) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:43:PHE:HB2 | 8 | 0.83 |
| (2,443) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:43:PHE:HB2 | 19 | 0.83 |
| (2,272) | 1:A:19:LYS:HB2 | 1:A:19:LYS:HE3 | 4 | 0.83 |
| (2,1260) | 1:A:80:ASN:HD21 | 1:A:79:LYS:HB2 | 17 | 0.83 |
| (2,1190) | 1:A:96:LYS:H | 1:A:96:LYS:HB3 | 3 | 0.83 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,1190) | 1:A:96:LYS:H | 1:A:96:LYS:HB3 | 8 | 0.83 |
| (2,894) | 1:A:13:SER:H | 1:A:12:ASP:HB2 | 1 | 0.82 |
| (2,894) | 1:A:13:SER:H | 1:A:12:ASP:HB2 | 4 | 0.82 |
| (2,894) | 1:A:13:SER:H | 1:A:12:ASP:HB2 | 11 | 0.82 |
| (2,894) | 1:A:13:SER:H | 1:A:12:ASP:HB2 | 16 | 0.82 |
| (2,825) | 1:A:54:LYS:HB2 | 1:A:26:TYR:HB2 | 19 | 0.82 |
| (2,823) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:83:GLU:HA | 16 | 0.82 |
| (2,55) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:24:ALA:HA | 5 | 0.82 |
| (2,55) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:HA | 5 | 0.82 |
| (2,55) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:24:ALA:HA | 6 | 0.82 |
| (2,55) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:HA | 6 | 0.82 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB3 | 1:A:57:VAL:HB | 17 | 0.82 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB1 | 1:A:57:VAL:HB | 17 | 0.82 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB2 | 1:A:57:VAL:HB | 17 | 0.82 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB3 | 1:A:65:GLN:HG3 | 17 | 0.82 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB1 | 1:A:65:GLN:HG3 | 17 | 0.82 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB2 | 1:A:65:GLN:HG3 | 17 | 0.82 |
| (2,494) | 1:A:60:LEU:HB3 | 1:A:55:LEU:HB2 | 1 | 0.82 |
| (2,494) | 1:A:60:LEU:HB3 | 1:A:55:LEU:HB2 | 13 | 0.82 |
| (2,453) | 1:A:50:ALA:HA | 1:A:20:LEU:HB2 | 7 | 0.82 |
| (2,441) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:43:PHE:H | 20 | 0.82 |
| (2,316) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:55:LEU:H | 19 | 0.82 |
| (2,1246) | 1:A:67:ASN:HD22 | 1:A:66:LYS:HB2 | 2 | 0.82 |
| (2,1154) | 1:A:82:LYS:HB3 | 1:A:82:LYS:H | 14 | 0.82 |
| (2,1154) | 1:A:82:LYS:HB3 | 1:A:82:LYS:H | 17 | 0.82 |
| (2,104) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:43:PHE:HB3 | 18 | 0.82 |
| (2,104) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:44:SER:HB2 | 18 | 0.82 |
| (2,104) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:43:PHE:HB3 | 19 | 0.82 |
| (2,104) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:44:SER:HB2 | 19 | 0.82 |
| (2,932) | 1:A:19:LYS:HB2 | 1:A:20:LEU:H | 4 | 0.81 |
| (2,894) | 1:A:13:SER:H | 1:A:12:ASP:HB2 | 7 | 0.81 |
| (2,894) | 1:A:13:SER:H | 1:A:12:ASP:HB2 | 8 | 0.81 |
| (2,894) | 1:A:13:SER:H | 1:A:12:ASP:HB2 | 13 | 0.81 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB3 | 1:A:57:VAL:HB | 13 | 0.81 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB1 | 1:A:57:VAL:HB | 13 | 0.81 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB2 | 1:A:57:VAL:HB | 13 | 0.81 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB3 | 1:A:65:GLN:HG3 | 13 | 0.81 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB1 | 1:A:65:GLN:HG3 | 13 | 0.81 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB2 | 1:A:65:GLN:HG3 | 13 | 0.81 |
| (2,494) | 1:A:60:LEU:HB3 | 1:A:55:LEU:HB2 | 18 | 0.81 |
| (2,494) | 1:A:60:LEU:HB3 | 1:A:55:LEU:HB2 | 20 | 0.81 |
| (2,155) | 1:A:2:VAL:HB | 1:A:44:SER:HB2 | 4 | 0.81 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1199) | 1:A:97:GLN:H | 1:A:96:LYS:HB3 | 1 | 0.81 |
| (2,1154) | 1:A:82:LYS:HB3 | 1:A:82:LYS:H | 18 | 0.81 |
| (2,898) | 1:A:14:ALA:H | 1:A:13:SER:HB2 | 8 | 0.8 |
| (2,894) | 1:A:13:SER:H | 1:A:12:ASP:HB2 | 12 | 0.8 |
| (2,894) | 1:A:13:SER:H | 1:A:12:ASP:HB2 | 14 | 0.8 |
| (2,677) | 1:A:86:LYS:HG2 | 1:A:86:LYS:HA | 20 | 0.8 |
| (2,636) | 1:A:76:LEU:HD23 | 1:A:86:LYS:HE3 | 5 | 0.8 |
| (2,636) | 1:A:76:LEU:HD21 | 1:A:86:LYS:HE3 | 5 | 0.8 |
| (2,636) | 1:A:76:LEU:HD22 | 1:A:86:LYS:HE3 | 5 | 0.8 |
| (2,55) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:24:ALA:HA | 11 | 0.8 |
| (2,55) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:HA | 11 | 0.8 |
| (2,493) | 1:A:54:LYS:HE2 | 1:A:40:ILE:HG22 | 10 | 0.8 |
| (2,493) | 1:A:54:LYS:HE2 | 1:A:40:ILE:HG21 | 10 | 0.8 |
| (2,493) | 1:A:54:LYS:HE2 | 1:A:40:ILE:HG23 | 10 | 0.8 |
| (2,443) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:43:PHE:HB2 | 14 | 0.8 |
| (2,1154) | 1:A:82:LYS:HB3 | 1:A:82:LYS:H | 2 | 0.8 |
| (2,1154) | 1:A:82:LYS:HB3 | 1:A:82:LYS:H | 16 | 0.8 |
| (2,1154) | 1:A:82:LYS:HB3 | 1:A:82:LYS:H | 19 | 0.8 |
| (2,1094) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LYS:HB2 | 2 | 0.8 |
| (2,1094) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LYS:HB2 | 19 | 0.8 |
| (2,104) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:43:PHE:HB3 | 4 | 0.8 |
| (2,104) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:44:SER:HB2 | 4 | 0.8 |
| (2,104) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:43:PHE:HB3 | 10 | 0.8 |
| (2,104) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:44:SER:HB2 | 10 | 0.8 |
| (2,104) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:43:PHE:HB3 | 12 | 0.8 |
| (2,104) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:44:SER:HB2 | 12 | 0.8 |
| (2,104) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:43:PHE:HB3 | 14 | 0.8 |
| (2,104) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:44:SER:HB2 | 14 | 0.8 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 16 | 0.8 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 16 | 0.8 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 16 | 0.8 |
| (2,55) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:24:ALA:HA | 1 | 0.79 |
| (2,55) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:HA | 1 | 0.79 |
| (2,55) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:24:ALA:HA | 16 | 0.79 |
| (2,55) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:HA | 16 | 0.79 |
| (2,441) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:43:PHE:H | 2 | 0.79 |
| (2,1252) | 1:A:67:ASN:HD21 | 1:A:66:LYS:HB2 | 8 | 0.79 |
| (2,1154) | 1:A:82:LYS:HB3 | 1:A:82:LYS:H | 3 | 0.79 |
| (2,1140) | 1:A:80:ASN:H | 1:A:79:LYS:HG3 | 13 | 0.79 |
| (2,1126) | 1:A:78:PHE:H | 1:A:20:LEU:HD13 | 9 | 0.79 |
| (2,1126) | 1:A:78:PHE:H | 1:A:20:LEU:HD11 | 9 | 0.79 |
| (2,1126) | 1:A:78:PHE:H | 1:A:20:LEU:HD12 | 9 | 0.79 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,104) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:43:PHE:HB3 | 16 | 0.79 |
| (2,104) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:44:SER:HB2 | 16 | 0.79 |
| (2,104) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:43:PHE:HB3 | 20 | 0.79 |
| (2,104) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:44:SER:HB2 | 20 | 0.79 |
| (2,825) | 1:A:54:LYS:HB2 | 1:A:26:TYR:HB2 | 17 | 0.78 |
| (2,823) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:83:GLU:HA | 1 | 0.78 |
| (2,55) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:24:ALA:HA | 2 | 0.78 |
| (2,55) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:HA | 2 | 0.78 |
| (2,494) | 1:A:60:LEU:HB3 | 1:A:55:LEU:HB2 | 12 | 0.78 |
| (2,407) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:54:LYS:HD2 | 1 | 0.78 |
| (2,407) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:54:LYS:HD2 | 1 | 0.78 |
| (2,407) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:54:LYS:HD2 | 1 | 0.78 |
| (2,281) | 1:A:60:LEU:HD13 | 1:A:8:ALA:H | 6 | 0.78 |
| (2,281) | 1:A:60:LEU:HD11 | 1:A:8:ALA:H | 6 | 0.78 |
| (2,281) | 1:A:60:LEU:HD12 | 1:A:8:ALA:H | 6 | 0.78 |
| (2,1154) | 1:A:82:LYS:HB3 | 1:A:82:LYS:H | 5 | 0.78 |
| (2,1154) | 1:A:82:LYS:HB3 | 1:A:82:LYS:H | 8 | 0.78 |
| (2,1085) | 1:A:66:LYS:HB2 | 1:A:66:LYS:H | 3 | 0.78 |
| (2,104) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:43:PHE:HB3 | 5 | 0.78 |
| (2,104) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:44:SER:HB2 | 5 | 0.78 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 2 | 0.78 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 2 | 0.78 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 2 | 0.78 |
| (2,894) | 1:A:13:SER:H | 1:A:12:ASP:HB2 | 18 | 0.77 |
| (2,890) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:36:ILE:HG13 | 18 | 0.77 |
| (2,55) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:24:ALA:HA | 9 | 0.77 |
| (2,55) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:HA | 9 | 0.77 |
| (2,494) | 1:A:60:LEU:HB3 | 1:A:55:LEU:HB2 | 4 | 0.77 |
| (2,304) | 1:A:22:VAL:HG11 | 1:A:22:VAL:H | 4 | 0.77 |
| (2,304) | 1:A:22:VAL:HG13 | 1:A:22:VAL:H | 4 | 0.77 |
| (2,304) | 1:A:22:VAL:HG12 | 1:A:22:VAL:H | 4 | 0.77 |
| (2,1154) | 1:A:82:LYS:HB3 | 1:A:82:LYS:H | 9 | 0.77 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:43:PHE:HD2 | 16 | 0.77 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:43:PHE:HD1 | 16 | 0.77 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:47:TYR:HD2 | 16 | 0.77 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:47:TYR:HD1 | 16 | 0.77 |
| (2,1094) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LYS:HB2 | 8 | 0.77 |
| (2,1050) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:59:GLU:H | 7 | 0.77 |
| (2,1049) | 1:A:59:GLU:H | 1:A:56:ASP:HB2 | 6 | 0.77 |
| (2,104) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:43:PHE:HB3 | 2 | 0.77 |
| (2,104) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:44:SER:HB2 | 2 | 0.77 |
| (2,104) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:43:PHE:HB3 | 15 | 0.77 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,104) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:44:SER:HB2 | 15 | 0.77 |
| (2,932) | 1:A:19:LYS:HB2 | 1:A:20:LEU:H | 15 | 0.76 |
| (2,898) | 1:A:14:ALA:H | 1:A:13:SER:HB2 | 20 | 0.76 |
| (2,861) | 1:A:5:PHE:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 2 | 0.76 |
| (2,861) | 1:A:5:PHE:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 2 | 0.76 |
| (2,861) | 1:A:5:PHE:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 2 | 0.76 |
| (2,55) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:24:ALA:HA | 12 | 0.76 |
| (2,55) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:HA | 12 | 0.76 |
| (2,1261) | 1:A:80:ASN:HD22 | 1:A:82:LYS:HG2 | 6 | 0.76 |
| (2,1199) | 1:A:97:GLN:H | 1:A:96:LYS:HB3 | 5 | 0.76 |
| (2,1190) | 1:A:96:LYS:H | 1:A:96:LYS:HB3 | 13 | 0.76 |
| (2,1050) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:59:GLU:H | 16 | 0.76 |
| (2,983) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:2:VAL:HG13 | 7 | 0.75 |
| (2,983) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:2:VAL:HG12 | 7 | 0.75 |
| (2,983) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:2:VAL:HG11 | 7 | 0.75 |
| (2,898) | 1:A:14:ALA:H | 1:A:13:SER:HB2 | 9 | 0.75 |
| (2,890) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:36:ILE:HG13 | 16 | 0.75 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG21 | 1:A:92:PRO:HG2 | 2 | 0.75 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG23 | 1:A:92:PRO:HG2 | 2 | 0.75 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG22 | 1:A:92:PRO:HG2 | 2 | 0.75 |
| (2,477) | 1:A:52:PHE:HB2 | 1:A:47:TYR:HD2 | 20 | 0.75 |
| (2,477) | 1:A:52:PHE:HB2 | 1:A:47:TYR:HD1 | 20 | 0.75 |
| (2,443) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:43:PHE:HB2 | 5 | 0.75 |
| (2,443) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:43:PHE:HB2 | 16 | 0.75 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG13 | 1:A:52:PHE:HB3 | 4 | 0.75 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG12 | 1:A:52:PHE:HB3 | 4 | 0.75 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG11 | 1:A:52:PHE:HB3 | 4 | 0.75 |
| (2,1260) | 1:A:80:ASN:HD21 | 1:A:79:LYS:HB2 | 3 | 0.75 |
| (2,1252) | 1:A:67:ASN:HD21 | 1:A:66:LYS:HB2 | 19 | 0.75 |
| (2,890) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:36:ILE:HG13 | 3 | 0.74 |
| (2,826) | 1:A:87:VAL:HG21 | 1:A:95:ILE:HA | 4 | 0.74 |
| (2,826) | 1:A:87:VAL:HG23 | 1:A:95:ILE:HA | 4 | 0.74 |
| (2,826) | 1:A:87:VAL:HG22 | 1:A:95:ILE:HA | 4 | 0.74 |
| (2,55) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:24:ALA:HA | 19 | 0.74 |
| (2,55) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:HA | 19 | 0.74 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB3 | 1:A:57:VAL:HB | 5 | 0.74 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB1 | 1:A:57:VAL:HB | 5 | 0.74 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB2 | 1:A:57:VAL:HB | 5 | 0.74 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB3 | 1:A:65:GLN:HG3 | 5 | 0.74 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB1 | 1:A:65:GLN:HG3 | 5 | 0.74 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB2 | 1:A:65:GLN:HG3 | 5 | 0.74 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB3 | 1:A:57:VAL:HB | 12 | 0.74 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB1 | 1:A:57:VAL:HB | 12 | 0.74 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB2 | 1:A:57:VAL:HB | 12 | 0.74 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB3 | 1:A:65:GLN:HG3 | 12 | 0.74 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB1 | 1:A:65:GLN:HG3 | 12 | 0.74 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB2 | 1:A:65:GLN:HG3 | 12 | 0.74 |
| (2,1246) | 1:A:67:ASN:HD22 | 1:A:66:LYS:HB2 | 8 | 0.74 |
| (2,1050) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:59:GLU:H | 11 | 0.74 |
| (2,1050) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:59:GLU:H | 15 | 0.74 |
| (2,104) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:43:PHE:HB3 | 7 | 0.74 |
| (2,104) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:44:SER:HB2 | 7 | 0.74 |
| (2,992) | 1:A:43:PHE:HB3 | 1:A:44:SER:H | 15 | 0.73 |
| (2,992) | 1:A:43:PHE:HB3 | 1:A:44:SER:H | 20 | 0.73 |
| (2,898) | 1:A:14:ALA:H | 1:A:13:SER:HB2 | 11 | 0.73 |
| (2,890) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:36:ILE:HG13 | 7 | 0.73 |
| (2,890) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:36:ILE:HG13 | 11 | 0.73 |
| (2,823) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:83:GLU:HA | 8 | 0.73 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB1 | 1:A:97:GLN:HB2 | 11 | 0.73 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB3 | 1:A:97:GLN:HB2 | 11 | 0.73 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB2 | 1:A:97:GLN:HB2 | 11 | 0.73 |
| (2,641) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:75:LEU:HD11 | 19 | 0.73 |
| (2,641) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:75:LEU:HD13 | 19 | 0.73 |
| (2,641) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:75:LEU:HD12 | 19 | 0.73 |
| (2,55) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:24:ALA:HA | 14 | 0.73 |
| (2,55) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:HA | 14 | 0.73 |
| (2,443) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:43:PHE:HB2 | 1 | 0.73 |
| (2,197) | 1:A:9:SER:HA | 1:A:12:ASP:HB2 | 2 | 0.73 |
| (2,159) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:3:THR:H | 7 | 0.73 |
| (2,159) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:3:THR:H | 7 | 0.73 |
| (2,159) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:3:THR:H | 7 | 0.73 |
| (2,1261) | 1:A:80:ASN:HD22 | 1:A:82:LYS:HG2 | 18 | 0.73 |
| (2,1260) | 1:A:80:ASN:HD21 | 1:A:79:LYS:HB2 | 15 | 0.73 |
| (2,1154) | 1:A:82:LYS:HB3 | 1:A:82:LYS:H | 20 | 0.73 |
| (2,1050) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:59:GLU:H | 20 | 0.73 |
| (2,104) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:43:PHE:HB3 | 9 | 0.73 |
| (2,104) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:44:SER:HB2 | 9 | 0.73 |
| (2,992) | 1:A:43:PHE:HB3 | 1:A:44:SER:H | 17 | 0.72 |
| (2,937) | 1:A:21:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD13 | 9 | 0.72 |
| (2,937) | 1:A:21:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD11 | 9 | 0.72 |
| (2,937) | 1:A:21:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD12 | 9 | 0.72 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG21 | 1:A:92:PRO:HG2 | 5 | 0.72 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG23 | 1:A:92:PRO:HG2 | 5 | 0.72 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG22 | 1:A:92:PRO:HG2 | 5 | 0.72 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,583) | 1:A:66:LYS:HE2 | 1:A:8:ALA:HB1 | 5 | 0.72 |
| (2,583) | 1:A:66:LYS:HE2 | 1:A:8:ALA:HB2 | 5 | 0.72 |
| (2,583) | 1:A:66:LYS:HE2 | 1:A:8:ALA:HB3 | 5 | 0.72 |
| (2,55) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:24:ALA:HA | 13 | 0.72 |
| (2,55) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:HA | 13 | 0.72 |
| (2,517) | 1:A:27:ALA:HB1 | 1:A:57:VAL:HG11 | 15 | 0.72 |
| (2,517) | 1:A:27:ALA:HB1 | 1:A:57:VAL:HG12 | 15 | 0.72 |
| (2,517) | 1:A:27:ALA:HB1 | 1:A:57:VAL:HG13 | 15 | 0.72 |
| (2,517) | 1:A:27:ALA:HB3 | 1:A:57:VAL:HG11 | 15 | 0.72 |
| (2,517) | 1:A:27:ALA:HB3 | 1:A:57:VAL:HG12 | 15 | 0.72 |
| (2,517) | 1:A:27:ALA:HB3 | 1:A:57:VAL:HG13 | 15 | 0.72 |
| (2,517) | 1:A:27:ALA:HB2 | 1:A:57:VAL:HG11 | 15 | 0.72 |
| (2,517) | 1:A:27:ALA:HB2 | 1:A:57:VAL:HG12 | 15 | 0.72 |
| (2,517) | 1:A:27:ALA:HB2 | 1:A:57:VAL:HG13 | 15 | 0.72 |
| (2,503) | 1:A:5:PHE:HB2 | 1:A:55:LEU:HD11 | 2 | 0.72 |
| (2,503) | 1:A:5:PHE:HB2 | 1:A:55:LEU:HD12 | 2 | 0.72 |
| (2,503) | 1:A:5:PHE:HB2 | 1:A:55:LEU:HD13 | 2 | 0.72 |
| (2,438) | 1:A:46:GLN:HB3 | 1:A:43:PHE:HA | 6 | 0.72 |
| (2,1050) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:59:GLU:H | 3 | 0.72 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 18 | 0.72 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 18 | 0.72 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 18 | 0.72 |
| (2,969) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:33:CYS:H | 18 | 0.71 |
| (2,894) | 1:A:13:SER:H | 1:A:12:ASP:HB2 | 6 | 0.71 |
| (2,890) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:36:ILE:HG13 | 6 | 0.71 |
| (2,719) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:86:LYS:HE3 | 12 | 0.71 |
| (2,719) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:86:LYS:HE3 | 12 | 0.71 |
| (2,719) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:86:LYS:HE3 | 12 | 0.71 |
| (2,641) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:75:LEU:HD11 | 7 | 0.71 |
| (2,641) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:75:LEU:HD13 | 7 | 0.71 |
| (2,641) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:75:LEU:HD12 | 7 | 0.71 |
| (2,494) | 1:A:60:LEU:HB3 | 1:A:55:LEU:HB2 | 5 | 0.71 |
| (2,494) | 1:A:60:LEU:HB3 | 1:A:55:LEU:HB2 | 17 | 0.71 |
| (2,438) | 1:A:46:GLN:HB3 | 1:A:43:PHE:HA | 17 | 0.71 |
| (2,411) | 1:A:40:ILE:HG22 | 1:A:54:LYS:HD2 | 1 | 0.71 |
| (2,411) | 1:A:40:ILE:HG21 | 1:A:54:LYS:HD2 | 1 | 0.71 |
| (2,411) | 1:A:40:ILE:HG23 | 1:A:54:LYS:HD2 | 1 | 0.71 |
| (2,270) | 1:A:19:LYS:HA | 1:A:19:LYS:HE3 | 4 | 0.71 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG12 | 11 | 0.71 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG11 | 11 | 0.71 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG13 | 11 | 0.71 |
| (2,890) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:36:ILE:HG13 | 15 | 0.7 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG21 | 1:A:92:PRO:HG2 | 19 | 0.7 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG23 | 1:A:92:PRO:HG2 | 19 | 0.7 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG22 | 1:A:92:PRO:HG2 | 19 | 0.7 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB1 | 1:A:97:GLN:HB2 | 4 | 0.7 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB3 | 1:A:97:GLN:HB2 | 4 | 0.7 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB2 | 1:A:97:GLN:HB2 | 4 | 0.7 |
| (2,719) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:86:LYS:HE3 | 11 | 0.7 |
| (2,719) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:86:LYS:HE3 | 11 | 0.7 |
| (2,719) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:86:LYS:HE3 | 11 | 0.7 |
| (2,710) | 1:A:87:VAL:HG12 | 1:A:88:VAL:H | 4 | 0.7 |
| (2,710) | 1:A:87:VAL:HG11 | 1:A:88:VAL:H | 4 | 0.7 |
| (2,710) | 1:A:87:VAL:HG13 | 1:A:88:VAL:H | 4 | 0.7 |
| (2,641) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:75:LEU:HD11 | 17 | 0.7 |
| (2,641) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:75:LEU:HD13 | 17 | 0.7 |
| (2,641) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:75:LEU:HD12 | 17 | 0.7 |
| (2,55) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:24:ALA:HA | 15 | 0.7 |
| (2,55) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:HA | 15 | 0.7 |
| (2,494) | 1:A:60:LEU:HB3 | 1:A:55:LEU:HB2 | 16 | 0.7 |
| (2,438) | 1:A:46:GLN:HB3 | 1:A:43:PHE:HA | 12 | 0.7 |
| (2,1050) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:59:GLU:H | 2 | 0.7 |
| (2,992) | 1:A:43:PHE:HB3 | 1:A:44:SER:H | 10 | 0.69 |
| (2,890) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:36:ILE:HG13 | 5 | 0.69 |
| (2,823) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:83:GLU:HA | 5 | 0.69 |
| (2,55) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:24:ALA:HA | 8 | 0.69 |
| (2,55) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:HA | 8 | 0.69 |
| (2,55) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:24:ALA:HA | 10 | 0.69 |
| (2,55) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:HA | 10 | 0.69 |
| (2,55) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:24:ALA:HA | 18 | 0.69 |
| (2,55) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:HA | 18 | 0.69 |
| (2,269) | 1:A:19:LYS:HA | 1:A:19:LYS:HB2 | 8 | 0.69 |
| (2,1050) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:59:GLU:H | 12 | 0.69 |
| (2,1050) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:59:GLU:H | 13 | 0.69 |
| (2,104) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:43:PHE:HB3 | 6 | 0.69 |
| (2,104) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:44:SER:HB2 | 6 | 0.69 |
| (2,969) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:33:CYS:H | 19 | 0.68 |
| (2,898) | 1:A:14:ALA:H | 1:A:13:SER:HB2 | 10 | 0.68 |
| (2,825) | 1:A:54:LYS:HB2 | 1:A:26:TYR:HB2 | 16 | 0.68 |
| (2,716) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:89:GLY:H | 4 | 0.68 |
| (2,716) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:89:GLY:H | 4 | 0.68 |
| (2,716) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:89:GLY:H | 4 | 0.68 |
| (2,716) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:89:GLY:H | 20 | 0.68 |
| (2,716) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:89:GLY:H | 20 | 0.68 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,716) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:89:GLY:H | 20 | 0.68 |
| (2,55) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:24:ALA:HA | 3 | 0.68 |
| (2,55) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:HA | 3 | 0.68 |
| (2,197) | 1:A:9:SER:HA | 1:A:12:ASP:HB2 | 11 | 0.68 |
| (2,1260) | 1:A:80:ASN:HD21 | 1:A:79:LYS:HB2 | 9 | 0.68 |
| (2,1050) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:59:GLU:H | 6 | 0.68 |
| (2,992) | 1:A:43:PHE:HB3 | 1:A:44:SER:H | 2 | 0.67 |
| (2,898) | 1:A:14:ALA:H | 1:A:13:SER:HB2 | 7 | 0.67 |
| (2,890) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:36:ILE:HG13 | 2 | 0.67 |
| (2,890) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:36:ILE:HG13 | 9 | 0.67 |
| (2,847) | 1:A:3:THR:H | 1:A:53:TYR:HB2 | 7 | 0.67 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG21 | 1:A:92:PRO:HG2 | 6 | 0.67 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG23 | 1:A:92:PRO:HG2 | 6 | 0.67 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG22 | 1:A:92:PRO:HG2 | 6 | 0.67 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG21 | 1:A:92:PRO:HG2 | 18 | 0.67 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG23 | 1:A:92:PRO:HG2 | 18 | 0.67 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG22 | 1:A:92:PRO:HG2 | 18 | 0.67 |
| (2,719) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:86:LYS:HE3 | 16 | 0.67 |
| (2,719) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:86:LYS:HE3 | 16 | 0.67 |
| (2,719) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:86:LYS:HE3 | 16 | 0.67 |
| (2,716) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:89:GLY:H | 15 | 0.67 |
| (2,716) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:89:GLY:H | 15 | 0.67 |
| (2,716) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:89:GLY:H | 15 | 0.67 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB3 | 1:A:57:VAL:HB | 1 | 0.67 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB1 | 1:A:57:VAL:HB | 1 | 0.67 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB2 | 1:A:57:VAL:HB | 1 | 0.67 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB3 | 1:A:65:GLN:HG3 | 1 | 0.67 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB1 | 1:A:65:GLN:HG3 | 1 | 0.67 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB2 | 1:A:65:GLN:HG3 | 1 | 0.67 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB3 | 1:A:57:VAL:HB | 4 | 0.67 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB1 | 1:A:57:VAL:HB | 4 | 0.67 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB2 | 1:A:57:VAL:HB | 4 | 0.67 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB3 | 1:A:65:GLN:HG3 | 4 | 0.67 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB1 | 1:A:65:GLN:HG3 | 4 | 0.67 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB2 | 1:A:65:GLN:HG3 | 4 | 0.67 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:60:LEU:HB2 | 3 | 0.67 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:60:LEU:HB2 | 3 | 0.67 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:60:LEU:HB2 | 3 | 0.67 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB3 | 3 | 0.67 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB1 | 3 | 0.67 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB2 | 3 | 0.67 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB3 | 3 | 0.67 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB1 | 3 | 0.67 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB2 | 3 | 0.67 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB3 | 3 | 0.67 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB1 | 3 | 0.67 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB2 | 3 | 0.67 |
| (2,453) | 1:A:50:ALA:HA | 1:A:20:LEU:HB2 | 20 | 0.67 |
| (2,316) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:55:LEU:H | 6 | 0.67 |
| (2,1050) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:59:GLU:H | 5 | 0.67 |
| (2,1050) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:59:GLU:H | 19 | 0.67 |
| (2,992) | 1:A:43:PHE:HB3 | 1:A:44:SER:H | 8 | 0.66 |
| (2,992) | 1:A:43:PHE:HB3 | 1:A:44:SER:H | 19 | 0.66 |
| (2,969) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:33:CYS:H | 9 | 0.66 |
| (2,898) | 1:A:14:ALA:H | 1:A:13:SER:HB2 | 15 | 0.66 |
| (2,890) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:36:ILE:HG13 | 1 | 0.66 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB1 | 1:A:97:GLN:HB2 | 12 | 0.66 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB3 | 1:A:97:GLN:HB2 | 12 | 0.66 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB2 | 1:A:97:GLN:HB2 | 12 | 0.66 |
| (2,716) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:89:GLY:H | 6 | 0.66 |
| (2,716) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:89:GLY:H | 6 | 0.66 |
| (2,716) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:89:GLY:H | 6 | 0.66 |
| (2,716) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:89:GLY:H | 9 | 0.66 |
| (2,716) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:89:GLY:H | 9 | 0.66 |
| (2,716) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:89:GLY:H | 9 | 0.66 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:60:LEU:HB2 | 18 | 0.66 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:60:LEU:HB2 | 18 | 0.66 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:60:LEU:HB2 | 18 | 0.66 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB3 | 18 | 0.66 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB1 | 18 | 0.66 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB2 | 18 | 0.66 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB3 | 18 | 0.66 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB1 | 18 | 0.66 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB2 | 18 | 0.66 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB3 | 18 | 0.66 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB1 | 18 | 0.66 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB2 | 18 | 0.66 |
| (2,438) | 1:A:46:GLN:HB3 | 1:A:43:PHE:HA | 3 | 0.66 |
| (2,438) | 1:A:46:GLN:HB3 | 1:A:43:PHE:HA | 8 | 0.66 |
| (2,438) | 1:A:46:GLN:HB3 | 1:A:43:PHE:HA | 14 | 0.66 |
| (2,269) | 1:A:19:LYS:HA | 1:A:19:LYS:HB2 | 15 | 0.66 |
| (2,1272) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:91:ASN:HB3 | 4 | 0.66 |
| (2,1272) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:91:ASN:HB3 | 17 | 0.66 |
| (2,1246) | 1:A:67:ASN:HD22 | 1:A:66:LYS:HB2 | 19 | 0.66 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1050) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:59:GLU:H | 1 | 0.66 |
| (2,1050) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:59:GLU:H | 14 | 0.66 |
| (2,992) | 1:A:43:PHE:HB3 | 1:A:44:SER:H | 3 | 0.65 |
| (2,989) | 1:A:43:PHE:H | 1:A:41:GLU:HB3 | 7 | 0.65 |
| (2,540) | 1:A:60:LEU:HG | 1:A:63:VAL:HG12 | 13 | 0.65 |
| (2,540) | 1:A:60:LEU:HG | 1:A:63:VAL:HG11 | 13 | 0.65 |
| (2,540) | 1:A:60:LEU:HG | 1:A:63:VAL:HG13 | 13 | 0.65 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB3 | 1:A:57:VAL:HB | 14 | 0.65 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB1 | 1:A:57:VAL:HB | 14 | 0.65 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB2 | 1:A:57:VAL:HB | 14 | 0.65 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB3 | 1:A:65:GLN:HG3 | 14 | 0.65 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB1 | 1:A:65:GLN:HG3 | 14 | 0.65 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB2 | 1:A:65:GLN:HG3 | 14 | 0.65 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:60:LEU:HB2 | 7 | 0.65 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:60:LEU:HB2 | 7 | 0.65 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:60:LEU:HB2 | 7 | 0.65 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB3 | 7 | 0.65 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB1 | 7 | 0.65 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB2 | 7 | 0.65 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB3 | 7 | 0.65 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB1 | 7 | 0.65 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB2 | 7 | 0.65 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB3 | 7 | 0.65 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB1 | 7 | 0.65 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB2 | 7 | 0.65 |
| (2,269) | 1:A:19:LYS:HA | 1:A:19:LYS:HB2 | 4 | 0.65 |
| (2,1272) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:91:ASN:HB3 | 1 | 0.65 |
| (2,1272) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:91:ASN:HB3 | 11 | 0.65 |
| (2,1272) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:91:ASN:HB3 | 12 | 0.65 |
| (2,1272) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:91:ASN:HB3 | 19 | 0.65 |
| (2,1272) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:91:ASN:HB3 | 20 | 0.65 |
| (2,1094) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LYS:HB2 | 3 | 0.65 |
| (2,1050) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:59:GLU:H | 8 | 0.65 |
| (2,1050) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:59:GLU:H | 17 | 0.65 |
| (2,890) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:36:ILE:HG13 | 4 | 0.64 |
| (2,890) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:36:ILE:HG13 | 12 | 0.64 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG21 | 1:A:92:PRO:HG2 | 11 | 0.64 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG23 | 1:A:92:PRO:HG2 | 11 | 0.64 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG22 | 1:A:92:PRO:HG2 | 11 | 0.64 |
| (2,716) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:89:GLY:H | 3 | 0.64 |
| (2,716) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:89:GLY:H | 3 | 0.64 |
| (2,716) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:89:GLY:H | 3 | 0.64 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,716) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:89:GLY:H | 7 | 0.64 |
| (2,716) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:89:GLY:H | 7 | 0.64 |
| (2,716) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:89:GLY:H | 7 | 0.64 |
| (2,716) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:89:GLY:H | 18 | 0.64 |
| (2,716) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:89:GLY:H | 18 | 0.64 |
| (2,716) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:89:GLY:H | 18 | 0.64 |
| (2,683) | 1:A:46:GLN:HA | 1:A:47:TYR:H | 20 | 0.64 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:61:GLY:HA3 | 18 | 0.64 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:61:GLY:HA3 | 18 | 0.64 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:61:GLY:HA3 | 18 | 0.64 |
| (2,517) | 1:A:27:ALA:HB1 | 1:A:57:VAL:HG11 | 9 | 0.64 |
| (2,517) | 1:A:27:ALA:HB1 | 1:A:57:VAL:HG12 | 9 | 0.64 |
| (2,517) | 1:A:27:ALA:HB1 | 1:A:57:VAL:HG13 | 9 | 0.64 |
| (2,517) | 1:A:27:ALA:HB3 | 1:A:57:VAL:HG11 | 9 | 0.64 |
| (2,517) | 1:A:27:ALA:HB3 | 1:A:57:VAL:HG12 | 9 | 0.64 |
| (2,517) | 1:A:27:ALA:HB3 | 1:A:57:VAL:HG13 | 9 | 0.64 |
| (2,517) | 1:A:27:ALA:HB2 | 1:A:57:VAL:HG11 | 9 | 0.64 |
| (2,517) | 1:A:27:ALA:HB2 | 1:A:57:VAL:HG12 | 9 | 0.64 |
| (2,517) | 1:A:27:ALA:HB2 | 1:A:57:VAL:HG13 | 9 | 0.64 |
| (2,477) | 1:A:52:PHE:HB2 | 1:A:47:TYR:HD2 | 17 | 0.64 |
| (2,477) | 1:A:52:PHE:HB2 | 1:A:47:TYR:HD1 | 17 | 0.64 |
| (2,438) | 1:A:46:GLN:HB3 | 1:A:43:PHE:HA | 19 | 0.64 |
| (2,1272) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:91:ASN:HB3 | 7 | 0.64 |
| (2,1272) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:91:ASN:HB3 | 10 | 0.64 |
| (2,1272) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:91:ASN:HB3 | 13 | 0.64 |
| (2,1272) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:91:ASN:HB3 | 14 | 0.64 |
| (2,1272) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:91:ASN:HB3 | 16 | 0.64 |
| (2,1085) | 1:A:66:LYS:HB2 | 1:A:66:LYS:H | 19 | 0.64 |
| (2,990) | 1:A:42:LYS:HB2 | 1:A:43:PHE:H | 2 | 0.63 |
| (2,969) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:33:CYS:H | 12 | 0.63 |
| (2,898) | 1:A:14:ALA:H | 1:A:13:SER:HB2 | 17 | 0.63 |
| (2,890) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:36:ILE:HG13 | 14 | 0.63 |
| (2,890) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:36:ILE:HG13 | 17 | 0.63 |
| (2,847) | 1:A:3:THR:H | 1:A:53:TYR:HB2 | 8 | 0.63 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG21 | 1:A:92:PRO:HG2 | 3 | 0.63 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG23 | 1:A:92:PRO:HG2 | 3 | 0.63 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG22 | 1:A:92:PRO:HG2 | 3 | 0.63 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG21 | 1:A:92:PRO:HG2 | 15 | 0.63 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG23 | 1:A:92:PRO:HG2 | 15 | 0.63 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG22 | 1:A:92:PRO:HG2 | 15 | 0.63 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG21 | 1:A:92:PRO:HG2 | 20 | 0.63 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG23 | 1:A:92:PRO:HG2 | 20 | 0.63 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG22 | 1:A:92:PRO:HG2 | 20 | 0.63 |
| (2,716) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:89:GLY:H | 5 | 0.63 |
| (2,716) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:89:GLY:H | 5 | 0.63 |
| (2,716) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:89:GLY:H | 5 | 0.63 |
| (2,683) | 1:A:46:GLN:HA | 1:A:47:TYR:H | 4 | 0.63 |
| (2,630) | 1:A:76:LEU:HA | 1:A:76:LEU:HD23 | 5 | 0.63 |
| (2,630) | 1:A:76:LEU:HA | 1:A:76:LEU:HD21 | 5 | 0.63 |
| (2,630) | 1:A:76:LEU:HA | 1:A:76:LEU:HD22 | 5 | 0.63 |
| (2,55) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:24:ALA:HA | 20 | 0.63 |
| (2,55) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:HA | 20 | 0.63 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD11 | 1:A:23:VAL:HG21 | 2 | 0.63 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD11 | 1:A:23:VAL:HG23 | 2 | 0.63 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD11 | 1:A:23:VAL:HG22 | 2 | 0.63 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD12 | 1:A:23:VAL:HG21 | 2 | 0.63 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD12 | 1:A:23:VAL:HG23 | 2 | 0.63 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD12 | 1:A:23:VAL:HG22 | 2 | 0.63 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD13 | 1:A:23:VAL:HG21 | 2 | 0.63 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD13 | 1:A:23:VAL:HG23 | 2 | 0.63 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD13 | 1:A:23:VAL:HG22 | 2 | 0.63 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:60:LEU:HB2 | 12 | 0.63 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:60:LEU:HB2 | 12 | 0.63 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:60:LEU:HB2 | 12 | 0.63 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB3 | 12 | 0.63 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB1 | 12 | 0.63 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB2 | 12 | 0.63 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB3 | 12 | 0.63 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB1 | 12 | 0.63 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB2 | 12 | 0.63 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB3 | 12 | 0.63 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB1 | 12 | 0.63 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB2 | 12 | 0.63 |
| (2,494) | 1:A:60:LEU:HB3 | 1:A:55:LEU:HB2 | 2 | 0.63 |
| (2,494) | 1:A:60:LEU:HB3 | 1:A:55:LEU:HB2 | 8 | 0.63 |
| (2,1272) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:91:ASN:HB3 | 2 | 0.63 |
| (2,1055) | 1:A:60:LEU:H | 1:A:59:GLU:HB3 | 2 | 0.63 |
| (2,1029) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:53:TYR:HB2 | 6 | 0.63 |
| (2,992) | 1:A:43:PHE:HB3 | 1:A:44:SER:H | 7 | 0.62 |
| (2,969) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:33:CYS:H | 17 | 0.62 |
| (2,890) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:36:ILE:HG13 | 8 | 0.62 |
| (2,890) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:36:ILE:HG13 | 20 | 0.62 |
| (2,847) | 1:A:3:THR:H | 1:A:53:TYR:HB2 | 4 | 0.62 |
| (2,716) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:89:GLY:H | 2 | 0.62 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,716) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:89:GLY:H | 2 | 0.62 |
| (2,716) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:89:GLY:H | 2 | 0.62 |
| (2,679) | 1:A:82:LYS:HB3 | 1:A:83:GLU:H | 18 | 0.62 |
| (2,677) | 1:A:86:LYS:HG2 | 1:A:86:LYS:HA | 3 | 0.62 |
| (2,677) | 1:A:86:LYS:HG2 | 1:A:86:LYS:HA | 18 | 0.62 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:61:GLY:HA3 | 16 | 0.62 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:61:GLY:HA3 | 16 | 0.62 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:61:GLY:HA3 | 16 | 0.62 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:60:LEU:HB2 | 19 | 0.62 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:60:LEU:HB2 | 19 | 0.62 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:60:LEU:HB2 | 19 | 0.62 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB3 | 19 | 0.62 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB1 | 19 | 0.62 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB2 | 19 | 0.62 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB3 | 19 | 0.62 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB1 | 19 | 0.62 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB2 | 19 | 0.62 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB3 | 19 | 0.62 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB1 | 19 | 0.62 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB2 | 19 | 0.62 |
| (2,494) | 1:A:60:LEU:HB3 | 1:A:55:LEU:HB2 | 9 | 0.62 |
| (2,494) | 1:A:60:LEU:HB3 | 1:A:55:LEU:HB2 | 10 | 0.62 |
| (2,364) | 1:A:46:GLN:HA | 1:A:46:GLN:HB2 | 2 | 0.62 |
| (2,364) | 1:A:46:GLN:HA | 1:A:46:GLN:HB2 | 4 | 0.62 |
| (2,364) | 1:A:46:GLN:HA | 1:A:46:GLN:HB2 | 7 | 0.62 |
| (2,364) | 1:A:46:GLN:HA | 1:A:46:GLN:HB2 | 10 | 0.62 |
| (2,364) | 1:A:46:GLN:HA | 1:A:46:GLN:HB2 | 15 | 0.62 |
| (2,364) | 1:A:46:GLN:HA | 1:A:46:GLN:HB2 | 20 | 0.62 |
| (2,1272) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:91:ASN:HB3 | 3 | 0.62 |
| (2,1272) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:91:ASN:HB3 | 5 | 0.62 |
| (2,1272) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:91:ASN:HB3 | 8 | 0.62 |
| (2,1272) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:91:ASN:HB3 | 18 | 0.62 |
| (2,1263) | 1:A:49:GLN:HE21 | 1:A:20:LEU:HB2 | 1 | 0.62 |
| (2,1199) | 1:A:97:GLN:H | 1:A:96:LYS:HB3 | 15 | 0.62 |
| (2,1050) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:59:GLU:H | 4 | 0.62 |
| (2,825) | 1:A:54:LYS:HB2 | 1:A:26:TYR:HB2 | 14 | 0.61 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG21 | 1:A:92:PRO:HG2 | 17 | 0.61 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG23 | 1:A:92:PRO:HG2 | 17 | 0.61 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG22 | 1:A:92:PRO:HG2 | 17 | 0.61 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB1 | 1:A:97:GLN:HB2 | 19 | 0.61 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB3 | 1:A:97:GLN:HB2 | 19 | 0.61 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB2 | 1:A:97:GLN:HB2 | 19 | 0.61 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,55) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:24:ALA:HA | 17 | 0.61 |
| (2,55) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:HA | 17 | 0.61 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:60:LEU:HB2 | 1 | 0.61 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:60:LEU:HB2 | 1 | 0.61 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:60:LEU:HB2 | 1 | 0.61 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB3 | 1 | 0.61 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB1 | 1 | 0.61 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB2 | 1 | 0.61 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB3 | 1 | 0.61 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB1 | 1 | 0.61 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB2 | 1 | 0.61 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB3 | 1 | 0.61 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB1 | 1 | 0.61 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB2 | 1 | 0.61 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:60:LEU:HB2 | 9 | 0.61 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:60:LEU:HB2 | 9 | 0.61 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:60:LEU:HB2 | 9 | 0.61 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB3 | 9 | 0.61 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB1 | 9 | 0.61 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB2 | 9 | 0.61 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB3 | 9 | 0.61 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB1 | 9 | 0.61 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB2 | 9 | 0.61 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB3 | 9 | 0.61 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB1 | 9 | 0.61 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB2 | 9 | 0.61 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:60:LEU:HB2 | 17 | 0.61 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:60:LEU:HB2 | 17 | 0.61 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:60:LEU:HB2 | 17 | 0.61 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB3 | 17 | 0.61 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB1 | 17 | 0.61 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB2 | 17 | 0.61 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB3 | 17 | 0.61 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB1 | 17 | 0.61 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB2 | 17 | 0.61 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB3 | 17 | 0.61 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB1 | 17 | 0.61 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB2 | 17 | 0.61 |
| (2,493) | 1:A:54:LYS:HE2 | 1:A:40:ILE:HG22 | 16 | 0.61 |
| (2,493) | 1:A:54:LYS:HE2 | 1:A:40:ILE:HG21 | 16 | 0.61 |
| (2,493) | 1:A:54:LYS:HE2 | 1:A:40:ILE:HG23 | 16 | 0.61 |
| (2,364) | 1:A:46:GLN:HA | 1:A:46:GLN:HB2 | 9 | 0.61 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1272) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:91:ASN:HB3 | 9 | 0.61 |
| (2,1272) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:91:ASN:HB3 | 15 | 0.61 |
| (2,1199) | 1:A:97:GLN:H | 1:A:96:LYS:HB3 | 20 | 0.61 |
| (2,1085) | 1:A:66:LYS:HB2 | 1:A:66:LYS:H | 2 | 0.61 |
| (2,992) | 1:A:43:PHE:HB3 | 1:A:44:SER:H | 12 | 0.6 |
| (2,890) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:36:ILE:HG13 | 19 | 0.6 |
| (2,683) | 1:A:46:GLN:HA | 1:A:47:TYR:H | 2 | 0.6 |
| (2,55) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:24:ALA:HA | 7 | 0.6 |
| (2,55) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:HA | 7 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:60:LEU:HB2 | 4 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:60:LEU:HB2 | 4 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:60:LEU:HB2 | 4 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB3 | 4 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB1 | 4 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB2 | 4 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB3 | 4 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB1 | 4 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB2 | 4 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB3 | 4 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB1 | 4 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB2 | 4 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:60:LEU:HB2 | 6 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:60:LEU:HB2 | 6 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:60:LEU:HB2 | 6 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB3 | 6 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB1 | 6 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB2 | 6 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB3 | 6 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB1 | 6 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB2 | 6 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB3 | 6 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB1 | 6 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB2 | 6 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:60:LEU:HB2 | 15 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:60:LEU:HB2 | 15 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:60:LEU:HB2 | 15 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB3 | 15 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB1 | 15 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB2 | 15 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB3 | 15 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB1 | 15 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB2 | 15 | 0.6 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB3 | 15 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB1 | 15 | 0.6 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB2 | 15 | 0.6 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD11 | 14 | 0.6 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD12 | 14 | 0.6 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD13 | 14 | 0.6 |
| (2,46) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:2:VAL:HG23 | 7 | 0.6 |
| (2,46) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:2:VAL:HG21 | 7 | 0.6 |
| (2,46) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:2:VAL:HG22 | 7 | 0.6 |
| (2,46) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:77:LEU:HD21 | 7 | 0.6 |
| (2,46) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:77:LEU:HD23 | 7 | 0.6 |
| (2,46) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:77:LEU:HD22 | 7 | 0.6 |
| (2,45) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:103:ALA:HB3 | 1 | 0.6 |
| (2,45) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:103:ALA:HB1 | 1 | 0.6 |
| (2,45) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:103:ALA:HB2 | 1 | 0.6 |
| (2,45) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:50:ALA:HB1 | 1 | 0.6 |
| (2,45) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:50:ALA:HB2 | 1 | 0.6 |
| (2,45) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:50:ALA:HB3 | 1 | 0.6 |
| (2,1272) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:91:ASN:HB3 | 6 | 0.6 |
| (2,1199) | 1:A:97:GLN:H | 1:A:96:LYS:HB3 | 7 | 0.6 |
| (2,1155) | 1:A:82:LYS:H | 1:A:82:LYS:HG2 | 14 | 0.6 |
| (2,1055) | 1:A:60:LEU:H | 1:A:59:GLU:HB3 | 3 | 0.6 |
| (2,1029) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:53:TYR:HB2 | 3 | 0.6 |
| (2,969) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:33:CYS:H | 3 | 0.59 |
| (2,969) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:33:CYS:H | 5 | 0.59 |
| (2,716) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:89:GLY:H | 8 | 0.59 |
| (2,716) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:89:GLY:H | 8 | 0.59 |
| (2,716) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:89:GLY:H | 8 | 0.59 |
| (2,679) | 1:A:82:LYS:HB3 | 1:A:83:GLU:H | 16 | 0.59 |
| (2,679) | 1:A:82:LYS:HB3 | 1:A:83:GLU:H | 19 | 0.59 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB3 | 1:A:57:VAL:HB | 10 | 0.59 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB1 | 1:A:57:VAL:HB | 10 | 0.59 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB2 | 1:A:57:VAL:HB | 10 | 0.59 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB3 | 1:A:65:GLN:HG3 | 10 | 0.59 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB1 | 1:A:65:GLN:HG3 | 10 | 0.59 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB2 | 1:A:65:GLN:HG3 | 10 | 0.59 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:60:LEU:HB2 | 5 | 0.59 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:60:LEU:HB2 | 5 | 0.59 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:60:LEU:HB2 | 5 | 0.59 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB3 | 5 | 0.59 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB1 | 5 | 0.59 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB2 | 5 | 0.59 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB3 | 5 | 0.59 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB1 | 5 | 0.59 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB2 | 5 | 0.59 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB3 | 5 | 0.59 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB1 | 5 | 0.59 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB2 | 5 | 0.59 |
| (2,477) | 1:A:52:PHE:HB2 | 1:A:47:TYR:HD2 | 9 | 0.59 |
| (2,477) | 1:A:52:PHE:HB2 | 1:A:47:TYR:HD1 | 9 | 0.59 |
| (2,438) | 1:A:46:GLN:HB3 | 1:A:43:PHE:HA | 5 | 0.59 |
| (2,384) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:54:LYS:HD2 | 14 | 0.59 |
| (2,384) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:54:LYS:HD2 | 14 | 0.59 |
| (2,384) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:54:LYS:HD2 | 14 | 0.59 |
| (2,37) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:42:LYS:HG2 | 9 | 0.59 |
| (2,37) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:42:LYS:HG3 | 9 | 0.59 |
| (2,340) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:57:VAL:HG11 | 15 | 0.59 |
| (2,340) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:57:VAL:HG12 | 15 | 0.59 |
| (2,340) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:57:VAL:HG13 | 15 | 0.59 |
| (2,197) | 1:A:9:SER:HA | 1:A:12:ASP:HB2 | 18 | 0.59 |
| (2,1199) | 1:A:97:GLN:H | 1:A:96:LYS:HB3 | 17 | 0.59 |
| (2,1085) | 1:A:66:LYS:HB2 | 1:A:66:LYS:H | 8 | 0.59 |
| (2,992) | 1:A:43:PHE:HB3 | 1:A:44:SER:H | 6 | 0.58 |
| (2,990) | 1:A:42:LYS:HB2 | 1:A:43:PHE:H | 11 | 0.58 |
| (2,990) | 1:A:42:LYS:HB2 | 1:A:43:PHE:H | 20 | 0.58 |
| (2,969) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:33:CYS:H | 10 | 0.58 |
| (2,890) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:36:ILE:HG13 | 13 | 0.58 |
| (2,861) | 1:A:5:PHE:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 16 | 0.58 |
| (2,861) | 1:A:5:PHE:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 16 | 0.58 |
| (2,861) | 1:A:5:PHE:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 16 | 0.58 |
| (2,719) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:86:LYS:HE3 | 1 | 0.58 |
| (2,719) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:86:LYS:HE3 | 1 | 0.58 |
| (2,719) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:86:LYS:HE3 | 1 | 0.58 |
| (2,679) | 1:A:82:LYS:HB3 | 1:A:83:GLU:H | 2 | 0.58 |
| (2,679) | 1:A:82:LYS:HB3 | 1:A:83:GLU:H | 17 | 0.58 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD11 | 1:A:23:VAL:HG21 | 18 | 0.58 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD11 | 1:A:23:VAL:HG23 | 18 | 0.58 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD11 | 1:A:23:VAL:HG22 | 18 | 0.58 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD12 | 1:A:23:VAL:HG21 | 18 | 0.58 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD12 | 1:A:23:VAL:HG23 | 18 | 0.58 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD12 | 1:A:23:VAL:HG22 | 18 | 0.58 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD13 | 1:A:23:VAL:HG21 | 18 | 0.58 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD13 | 1:A:23:VAL:HG23 | 18 | 0.58 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD13 | 1:A:23:VAL:HG22 | 18 | 0.58 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:60:LEU:HB2 | 2 | 0.58 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:60:LEU:HB2 | 2 | 0.58 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:60:LEU:HB2 | 2 | 0.58 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB3 | 2 | 0.58 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB1 | 2 | 0.58 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB2 | 2 | 0.58 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB3 | 2 | 0.58 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB1 | 2 | 0.58 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB2 | 2 | 0.58 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB3 | 2 | 0.58 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB1 | 2 | 0.58 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB2 | 2 | 0.58 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:60:LEU:HB2 | 10 | 0.58 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:60:LEU:HB2 | 10 | 0.58 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:60:LEU:HB2 | 10 | 0.58 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB3 | 10 | 0.58 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB1 | 10 | 0.58 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB2 | 10 | 0.58 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB3 | 10 | 0.58 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB1 | 10 | 0.58 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB2 | 10 | 0.58 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB3 | 10 | 0.58 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB1 | 10 | 0.58 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB2 | 10 | 0.58 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:60:LEU:HB2 | 14 | 0.58 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:60:LEU:HB2 | 14 | 0.58 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:60:LEU:HB2 | 14 | 0.58 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB3 | 14 | 0.58 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB1 | 14 | 0.58 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB2 | 14 | 0.58 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB3 | 14 | 0.58 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB1 | 14 | 0.58 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB2 | 14 | 0.58 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB3 | 14 | 0.58 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB1 | 14 | 0.58 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB2 | 14 | 0.58 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD11 | 10 | 0.58 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD12 | 10 | 0.58 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD13 | 10 | 0.58 |
| (2,494) | 1:A:60:LEU:HB3 | 1:A:55:LEU:HB2 | 14 | 0.58 |
| (2,1263) | 1:A:49:GLN:HE21 | 1:A:20:LEU:HB2 | 9 | 0.58 |
| (2,1055) | 1:A:60:LEU:H | 1:A:59:GLU:HB3 | 20 | 0.58 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,992) | 1:A:43:PHE:HB3 | 1:A:44:SER:H | 4 | 0.57 |
| (2,992) | 1:A:43:PHE:HB3 | 1:A:44:SER:H | 14 | 0.57 |
| (2,912) | 1:A:17:GLN:H | 1:A:17:GLN:HB3 | 15 | 0.57 |
| (2,890) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:36:ILE:HG13 | 10 | 0.57 |
| (2,861) | 1:A:5:PHE:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 10 | 0.57 |
| (2,861) | 1:A:5:PHE:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 10 | 0.57 |
| (2,861) | 1:A:5:PHE:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 10 | 0.57 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD11 | 2 | 0.57 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD12 | 2 | 0.57 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD13 | 2 | 0.57 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD11 | 16 | 0.57 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD12 | 16 | 0.57 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD13 | 16 | 0.57 |
| (2,384) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:54:LYS:HD2 | 1 | 0.57 |
| (2,384) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:54:LYS:HD2 | 1 | 0.57 |
| (2,384) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:54:LYS:HD2 | 1 | 0.57 |
| (2,197) | 1:A:9:SER:HA | 1:A:12:ASP:HB2 | 1 | 0.57 |
| (2,1171) | 1:A:86:LYS:HB2 | 1:A:86:LYS:H | 3 | 0.57 |
| (2,1055) | 1:A:60:LEU:H | 1:A:59:GLU:HB3 | 7 | 0.57 |
| (2,990) | 1:A:42:LYS:HB2 | 1:A:43:PHE:H | 1 | 0.56 |
| (2,861) | 1:A:5:PHE:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 14 | 0.56 |
| (2,861) | 1:A:5:PHE:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 14 | 0.56 |
| (2,861) | 1:A:5:PHE:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 14 | 0.56 |
| (2,847) | 1:A:3:THR:H | 1:A:53:TYR:HB2 | 17 | 0.56 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG21 | 1:A:92:PRO:HG2 | 4 | 0.56 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG23 | 1:A:92:PRO:HG2 | 4 | 0.56 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG22 | 1:A:92:PRO:HG2 | 4 | 0.56 |
| (2,695) | 1:A:87:VAL:HG12 | 1:A:89:GLY:H | 4 | 0.56 |
| (2,695) | 1:A:87:VAL:HG11 | 1:A:89:GLY:H | 4 | 0.56 |
| (2,695) | 1:A:87:VAL:HG13 | 1:A:89:GLY:H | 4 | 0.56 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB3 | 1:A:57:VAL:HB | 3 | 0.56 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB1 | 1:A:57:VAL:HB | 3 | 0.56 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB2 | 1:A:57:VAL:HB | 3 | 0.56 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB3 | 1:A:65:GLN:HG3 | 3 | 0.56 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB1 | 1:A:65:GLN:HG3 | 3 | 0.56 |
| (2,51) | 1:A:64:ALA:HB2 | 1:A:65:GLN:HG3 | 3 | 0.56 |
| (2,503) | 1:A:5:PHE:HB2 | 1:A:55:LEU:HD11 | 10 | 0.56 |
| (2,503) | 1:A:5:PHE:HB2 | 1:A:55:LEU:HD12 | 10 | 0.56 |
| (2,503) | 1:A:5:PHE:HB2 | 1:A:55:LEU:HD13 | 10 | 0.56 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:60:LEU:HB2 | 13 | 0.56 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:60:LEU:HB2 | 13 | 0.56 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:60:LEU:HB2 | 13 | 0.56 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB3 | 13 | 0.56 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB1 | 13 | 0.56 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB2 | 13 | 0.56 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB3 | 13 | 0.56 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB1 | 13 | 0.56 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB2 | 13 | 0.56 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB3 | 13 | 0.56 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB1 | 13 | 0.56 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB2 | 13 | 0.56 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:60:LEU:HB2 | 16 | 0.56 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:60:LEU:HB2 | 16 | 0.56 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:60:LEU:HB2 | 16 | 0.56 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB3 | 16 | 0.56 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB1 | 16 | 0.56 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB2 | 16 | 0.56 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB3 | 16 | 0.56 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB1 | 16 | 0.56 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB2 | 16 | 0.56 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB3 | 16 | 0.56 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB1 | 16 | 0.56 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB2 | 16 | 0.56 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:60:LEU:HB2 | 20 | 0.56 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:60:LEU:HB2 | 20 | 0.56 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:60:LEU:HB2 | 20 | 0.56 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB3 | 20 | 0.56 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB1 | 20 | 0.56 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB2 | 20 | 0.56 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB3 | 20 | 0.56 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB1 | 20 | 0.56 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB2 | 20 | 0.56 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB3 | 20 | 0.56 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB1 | 20 | 0.56 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB2 | 20 | 0.56 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG12 | 11 | 0.56 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG11 | 11 | 0.56 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG13 | 11 | 0.56 |
| (2,401) | 1:A:40:ILE:HA | 1:A:43:PHE:HB3 | 16 | 0.56 |
| (2,1260) | 1:A:80:ASN:HD21 | 1:A:79:LYS:HB2 | 19 | 0.56 |
| (2,1029) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:53:TYR:HB2 | 8 | 0.56 |
| (2,1029) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:53:TYR:HB2 | 12 | 0.56 |
| (2,992) | 1:A:43:PHE:HB3 | 1:A:44:SER:H | 5 | 0.55 |
| (2,912) | 1:A:17:GLN:H | 1:A:17:GLN:HB3 | 2 | 0.55 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,912) | 1:A:17:GLN:H | 1:A:17:GLN:HB3 | 4 | 0.55 |
| (2,912) | 1:A:17:GLN:H | 1:A:17:GLN:HB3 | 11 | 0.55 |
| (2,912) | 1:A:17:GLN:H | 1:A:17:GLN:HB3 | 16 | 0.55 |
| (2,912) | 1:A:17:GLN:H | 1:A:17:GLN:HB3 | 20 | 0.55 |
| (2,825) | 1:A:54:LYS:HB2 | 1:A:26:TYR:HB2 | 10 | 0.55 |
| (2,679) | 1:A:82:LYS:HB3 | 1:A:83:GLU:H | 3 | 0.55 |
| (2,641) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:75:LEU:HD11 | 4 | 0.55 |
| (2,641) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:75:LEU:HD13 | 4 | 0.55 |
| (2,641) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:75:LEU:HD12 | 4 | 0.55 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:60:LEU:HB2 | 8 | 0.55 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:60:LEU:HB2 | 8 | 0.55 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:60:LEU:HB2 | 8 | 0.55 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB3 | 8 | 0.55 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB1 | 8 | 0.55 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB2 | 8 | 0.55 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB3 | 8 | 0.55 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB1 | 8 | 0.55 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB2 | 8 | 0.55 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB3 | 8 | 0.55 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB1 | 8 | 0.55 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB2 | 8 | 0.55 |
| (2,493) | 1:A:54:LYS:HE2 | 1:A:40:ILE:HG22 | 15 | 0.55 |
| (2,493) | 1:A:54:LYS:HE2 | 1:A:40:ILE:HG21 | 15 | 0.55 |
| (2,493) | 1:A:54:LYS:HE2 | 1:A:40:ILE:HG23 | 15 | 0.55 |
| (2,453) | 1:A:50:ALA:HA | 1:A:20:LEU:HB2 | 15 | 0.55 |
| (2,1199) | 1:A:97:GLN:H | 1:A:96:LYS:HB3 | 10 | 0.55 |
| (2,1171) | 1:A:86:LYS:HB2 | 1:A:86:LYS:H | 18 | 0.55 |
| (1,13) | 1:A:38:PRO:N | 1:A:34:LYS:O | 16 | 0.55 |
| (2,992) | 1:A:43:PHE:HB3 | 1:A:44:SER:H | 1 | 0.54 |
| (2,992) | 1:A:43:PHE:HB3 | 1:A:44:SER:H | 9 | 0.54 |
| (2,990) | 1:A:42:LYS:HB2 | 1:A:43:PHE:H | 3 | 0.54 |
| (2,990) | 1:A:42:LYS:HB2 | 1:A:43:PHE:H | 9 | 0.54 |
| (2,990) | 1:A:42:LYS:HB2 | 1:A:43:PHE:H | 14 | 0.54 |
| (2,952) | 1:A:76:LEU:H | 1:A:76:LEU:HG | 5 | 0.54 |
| (2,928) | 1:A:19:LYS:H | 1:A:18:ASP:HB2 | 12 | 0.54 |
| (2,912) | 1:A:17:GLN:H | 1:A:17:GLN:HB3 | 1 | 0.54 |
| (2,912) | 1:A:17:GLN:H | 1:A:17:GLN:HB3 | 3 | 0.54 |
| (2,912) | 1:A:17:GLN:H | 1:A:17:GLN:HB3 | 8 | 0.54 |
| (2,912) | 1:A:17:GLN:H | 1:A:17:GLN:HB3 | 10 | 0.54 |
| (2,912) | 1:A:17:GLN:H | 1:A:17:GLN:HB3 | 12 | 0.54 |
| (2,912) | 1:A:17:GLN:H | 1:A:17:GLN:HB3 | 14 | 0.54 |
| (2,912) | 1:A:17:GLN:H | 1:A:17:GLN:HB3 | 17 | 0.54 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,912) | 1:A:17:GLN:H | 1:A:17:GLN:HB3 | 18 | 0.54 |
| (2,847) | 1:A:3:THR:H | 1:A:53:TYR:HB2 | 13 | 0.54 |
| (2,679) | 1:A:82:LYS:HB3 | 1:A:83:GLU:H | 14 | 0.54 |
| (2,586) | 1:A:68:GLU:HA | 1:A:68:GLU:HB2 | 2 | 0.54 |
| (2,586) | 1:A:68:GLU:HA | 1:A:68:GLU:HB2 | 3 | 0.54 |
| (2,586) | 1:A:68:GLU:HA | 1:A:68:GLU:HB2 | 4 | 0.54 |
| (2,586) | 1:A:68:GLU:HA | 1:A:68:GLU:HB2 | 5 | 0.54 |
| (2,586) | 1:A:68:GLU:HA | 1:A:68:GLU:HB2 | 6 | 0.54 |
| (2,586) | 1:A:68:GLU:HA | 1:A:68:GLU:HB2 | 8 | 0.54 |
| (2,586) | 1:A:68:GLU:HA | 1:A:68:GLU:HB2 | 10 | 0.54 |
| (2,586) | 1:A:68:GLU:HA | 1:A:68:GLU:HB2 | 11 | 0.54 |
| (2,586) | 1:A:68:GLU:HA | 1:A:68:GLU:HB2 | 12 | 0.54 |
| (2,586) | 1:A:68:GLU:HA | 1:A:68:GLU:HB2 | 13 | 0.54 |
| (2,586) | 1:A:68:GLU:HA | 1:A:68:GLU:HB2 | 14 | 0.54 |
| (2,586) | 1:A:68:GLU:HA | 1:A:68:GLU:HB2 | 15 | 0.54 |
| (2,586) | 1:A:68:GLU:HA | 1:A:68:GLU:HB2 | 16 | 0.54 |
| (2,586) | 1:A:68:GLU:HA | 1:A:68:GLU:HB2 | 17 | 0.54 |
| (2,586) | 1:A:68:GLU:HA | 1:A:68:GLU:HB2 | 18 | 0.54 |
| (2,586) | 1:A:68:GLU:HA | 1:A:68:GLU:HB2 | 19 | 0.54 |
| (2,586) | 1:A:68:GLU:HA | 1:A:68:GLU:HB2 | 20 | 0.54 |
| (2,503) | 1:A:5:PHE:HB2 | 1:A:55:LEU:HD11 | 16 | 0.54 |
| (2,503) | 1:A:5:PHE:HB2 | 1:A:55:LEU:HD12 | 16 | 0.54 |
| (2,503) | 1:A:5:PHE:HB2 | 1:A:55:LEU:HD13 | 16 | 0.54 |
| (2,440) | 1:A:46:GLN:HG2 | 1:A:43:PHE:HD2 | 18 | 0.54 |
| (2,440) | 1:A:46:GLN:HG2 | 1:A:43:PHE:HD1 | 18 | 0.54 |
| (2,438) | 1:A:46:GLN:HB3 | 1:A:43:PHE:HA | 1 | 0.54 |
| (2,401) | 1:A:40:ILE:HA | 1:A:43:PHE:HB3 | 19 | 0.54 |
| (2,197) | 1:A:9:SER:HA | 1:A:12:ASP:HB2 | 7 | 0.54 |
| (2,161) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:52:PHE:HB3 | 17 | 0.54 |
| (2,161) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:52:PHE:HB3 | 17 | 0.54 |
| (2,161) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:52:PHE:HB3 | 17 | 0.54 |
| (2,1174) | 1:A:87:VAL:H | 1:A:86:LYS:HG2 | 3 | 0.54 |
| (2,992) | 1:A:43:PHE:HB3 | 1:A:44:SER:H | 16 | 0.53 |
| (2,912) | 1:A:17:GLN:H | 1:A:17:GLN:HB3 | 5 | 0.53 |
| (2,912) | 1:A:17:GLN:H | 1:A:17:GLN:HB3 | 6 | 0.53 |
| (2,912) | 1:A:17:GLN:H | 1:A:17:GLN:HB3 | 7 | 0.53 |
| (2,912) | 1:A:17:GLN:H | 1:A:17:GLN:HB3 | 9 | 0.53 |
| (2,912) | 1:A:17:GLN:H | 1:A:17:GLN:HB3 | 13 | 0.53 |
| (2,912) | 1:A:17:GLN:H | 1:A:17:GLN:HB3 | 19 | 0.53 |
| (2,751) | 1:A:97:GLN:HA | 1:A:97:GLN:HB3 | 16 | 0.53 |
| (2,751) | 1:A:97:GLN:HA | 1:A:97:GLN:HB3 | 17 | 0.53 |
| (2,677) | 1:A:86:LYS:HG2 | 1:A:86:LYS:HA | 5 | 0.53 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,586) | 1:A:68:GLU:HA | 1:A:68:GLU:HB2 | 7 | 0.53 |
| (2,586) | 1:A:68:GLU:HA | 1:A:68:GLU:HB2 | 9 | 0.53 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD11 | 1:A:23:VAL:HG21 | 16 | 0.53 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD11 | 1:A:23:VAL:HG23 | 16 | 0.53 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD11 | 1:A:23:VAL:HG22 | 16 | 0.53 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD12 | 1:A:23:VAL:HG21 | 16 | 0.53 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD12 | 1:A:23:VAL:HG23 | 16 | 0.53 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD12 | 1:A:23:VAL:HG22 | 16 | 0.53 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD13 | 1:A:23:VAL:HG21 | 16 | 0.53 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD13 | 1:A:23:VAL:HG23 | 16 | 0.53 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD13 | 1:A:23:VAL:HG22 | 16 | 0.53 |
| (2,503) | 1:A:5:PHE:HB2 | 1:A:55:LEU:HD11 | 14 | 0.53 |
| (2,503) | 1:A:5:PHE:HB2 | 1:A:55:LEU:HD12 | 14 | 0.53 |
| (2,503) | 1:A:5:PHE:HB2 | 1:A:55:LEU:HD13 | 14 | 0.53 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD11 | 3 | 0.53 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD12 | 3 | 0.53 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD13 | 3 | 0.53 |
| (2,494) | 1:A:60:LEU:HB3 | 1:A:55:LEU:HB2 | 11 | 0.53 |
| (2,421) | 1:A:42:LYS:HA | 1:A:42:LYS:HB3 | 6 | 0.53 |
| (2,421) | 1:A:42:LYS:HA | 1:A:42:LYS:HB3 | 10 | 0.53 |
| (2,421) | 1:A:42:LYS:HA | 1:A:42:LYS:HB3 | 13 | 0.53 |
| (2,421) | 1:A:42:LYS:HA | 1:A:42:LYS:HB3 | 15 | 0.53 |
| (2,421) | 1:A:42:LYS:HA | 1:A:42:LYS:HB3 | 18 | 0.53 |
| (2,401) | 1:A:40:ILE:HA | 1:A:43:PHE:HB3 | 6 | 0.53 |
| (2,401) | 1:A:40:ILE:HA | 1:A:43:PHE:HB3 | 12 | 0.53 |
| (2,1155) | 1:A:82:LYS:H | 1:A:82:LYS:HG2 | 16 | 0.53 |
| (2,1055) | 1:A:60:LEU:H | 1:A:59:GLU:HB3 | 6 | 0.53 |
| (2,1055) | 1:A:60:LEU:H | 1:A:59:GLU:HB3 | 15 | 0.53 |
| (2,1029) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:53:TYR:HB2 | 19 | 0.53 |
| (2,992) | 1:A:43:PHE:HB3 | 1:A:44:SER:H | 18 | 0.52 |
| (2,990) | 1:A:42:LYS:HB2 | 1:A:43:PHE:H | 17 | 0.52 |
| (2,969) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:33:CYS:H | 4 | 0.52 |
| (2,928) | 1:A:19:LYS:H | 1:A:18:ASP:HB2 | 6 | 0.52 |
| (2,751) | 1:A:97:GLN:HA | 1:A:97:GLN:HB3 | 1 | 0.52 |
| (2,751) | 1:A:97:GLN:HA | 1:A:97:GLN:HB3 | 2 | 0.52 |
| (2,751) | 1:A:97:GLN:HA | 1:A:97:GLN:HB3 | 3 | 0.52 |
| (2,751) | 1:A:97:GLN:HA | 1:A:97:GLN:HB3 | 5 | 0.52 |
| (2,751) | 1:A:97:GLN:HA | 1:A:97:GLN:HB3 | 6 | 0.52 |
| (2,751) | 1:A:97:GLN:HA | 1:A:97:GLN:HB3 | 7 | 0.52 |
| (2,751) | 1:A:97:GLN:HA | 1:A:97:GLN:HB3 | 8 | 0.52 |
| (2,751) | 1:A:97:GLN:HA | 1:A:97:GLN:HB3 | 9 | 0.52 |
| (2,751) | 1:A:97:GLN:HA | 1:A:97:GLN:HB3 | 12 | 0.52 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,751) | 1:A:97:GLN:HA | 1:A:97:GLN:HB3 | 13 | 0.52 |
| (2,751) | 1:A:97:GLN:HA | 1:A:97:GLN:HB3 | 14 | 0.52 |
| (2,751) | 1:A:97:GLN:HA | 1:A:97:GLN:HB3 | 15 | 0.52 |
| (2,751) | 1:A:97:GLN:HA | 1:A:97:GLN:HB3 | 18 | 0.52 |
| (2,751) | 1:A:97:GLN:HA | 1:A:97:GLN:HB3 | 19 | 0.52 |
| (2,751) | 1:A:97:GLN:HA | 1:A:97:GLN:HB3 | 20 | 0.52 |
| (2,440) | 1:A:46:GLN:HG2 | 1:A:43:PHE:HD2 | 11 | 0.52 |
| (2,440) | 1:A:46:GLN:HG2 | 1:A:43:PHE:HD1 | 11 | 0.52 |
| (2,421) | 1:A:42:LYS:HA | 1:A:42:LYS:HB3 | 4 | 0.52 |
| (2,421) | 1:A:42:LYS:HA | 1:A:42:LYS:HB3 | 5 | 0.52 |
| (2,421) | 1:A:42:LYS:HA | 1:A:42:LYS:HB3 | 8 | 0.52 |
| (2,421) | 1:A:42:LYS:HA | 1:A:42:LYS:HB3 | 9 | 0.52 |
| (2,421) | 1:A:42:LYS:HA | 1:A:42:LYS:HB3 | 12 | 0.52 |
| (2,421) | 1:A:42:LYS:HA | 1:A:42:LYS:HB3 | 19 | 0.52 |
| (2,421) | 1:A:42:LYS:HA | 1:A:42:LYS:HB3 | 20 | 0.52 |
| (2,1260) | 1:A:80:ASN:HD21 | 1:A:79:LYS:HB2 | 16 | 0.52 |
| (2,1029) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:53:TYR:HB2 | 17 | 0.52 |
| (2,861) | 1:A:5:PHE:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 18 | 0.51 |
| (2,861) | 1:A:5:PHE:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 18 | 0.51 |
| (2,861) | 1:A:5:PHE:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 18 | 0.51 |
| (2,751) | 1:A:97:GLN:HA | 1:A:97:GLN:HB3 | 4 | 0.51 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB1 | 1:A:97:GLN:HB2 | 2 | 0.51 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB3 | 1:A:97:GLN:HB2 | 2 | 0.51 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB2 | 1:A:97:GLN:HB2 | 2 | 0.51 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB1 | 1:A:97:GLN:HB2 | 6 | 0.51 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB3 | 1:A:97:GLN:HB2 | 6 | 0.51 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB2 | 1:A:97:GLN:HB2 | 6 | 0.51 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB1 | 1:A:97:GLN:HB2 | 14 | 0.51 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB3 | 1:A:97:GLN:HB2 | 14 | 0.51 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB2 | 1:A:97:GLN:HB2 | 14 | 0.51 |
| (2,517) | 1:A:27:ALA:HB1 | 1:A:57:VAL:HG11 | 7 | 0.51 |
| (2,517) | 1:A:27:ALA:HB1 | 1:A:57:VAL:HG12 | 7 | 0.51 |
| (2,517) | 1:A:27:ALA:HB1 | 1:A:57:VAL:HG13 | 7 | 0.51 |
| (2,517) | 1:A:27:ALA:HB3 | 1:A:57:VAL:HG11 | 7 | 0.51 |
| (2,517) | 1:A:27:ALA:HB3 | 1:A:57:VAL:HG12 | 7 | 0.51 |
| (2,517) | 1:A:27:ALA:HB3 | 1:A:57:VAL:HG13 | 7 | 0.51 |
| (2,517) | 1:A:27:ALA:HB2 | 1:A:57:VAL:HG11 | 7 | 0.51 |
| (2,517) | 1:A:27:ALA:HB2 | 1:A:57:VAL:HG12 | 7 | 0.51 |
| (2,517) | 1:A:27:ALA:HB2 | 1:A:57:VAL:HG13 | 7 | 0.51 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD11 | 18 | 0.51 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD12 | 18 | 0.51 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD13 | 18 | 0.51 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,494) | 1:A:60:LEU:HB3 | 1:A:55:LEU:HB2 | 3 | 0.51 |
| (2,421) | 1:A:42:LYS:HA | 1:A:42:LYS:HB3 | 2 | 0.51 |
| (2,421) | 1:A:42:LYS:HA | 1:A:42:LYS:HB3 | 3 | 0.51 |
| (2,421) | 1:A:42:LYS:HA | 1:A:42:LYS:HB3 | 7 | 0.51 |
| (2,421) | 1:A:42:LYS:HA | 1:A:42:LYS:HB3 | 14 | 0.51 |
| (2,421) | 1:A:42:LYS:HA | 1:A:42:LYS:HB3 | 16 | 0.51 |
| (2,421) | 1:A:42:LYS:HA | 1:A:42:LYS:HB3 | 17 | 0.51 |
| (2,324) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:54:LYS:HD2 | 12 | 0.51 |
| (2,324) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:54:LYS:HD2 | 12 | 0.51 |
| (2,324) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:54:LYS:HD2 | 12 | 0.51 |
| (2,1155) | 1:A:82:LYS:H | 1:A:82:LYS:HG2 | 3 | 0.51 |
| (2,969) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:33:CYS:H | 2 | 0.5 |
| (2,969) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:33:CYS:H | 6 | 0.5 |
| (2,751) | 1:A:97:GLN:HA | 1:A:97:GLN:HB3 | 11 | 0.5 |
| (2,679) | 1:A:82:LYS:HB3 | 1:A:83:GLU:H | 8 | 0.5 |
| (2,546) | 1:A:62:ASP:HA | 1:A:62:ASP:HB3 | 1 | 0.5 |
| (2,546) | 1:A:62:ASP:HA | 1:A:62:ASP:HB3 | 5 | 0.5 |
| (2,546) | 1:A:62:ASP:HA | 1:A:62:ASP:HB3 | 6 | 0.5 |
| (2,546) | 1:A:62:ASP:HA | 1:A:62:ASP:HB3 | 8 | 0.5 |
| (2,546) | 1:A:62:ASP:HA | 1:A:62:ASP:HB3 | 14 | 0.5 |
| (2,546) | 1:A:62:ASP:HA | 1:A:62:ASP:HB3 | 15 | 0.5 |
| (2,546) | 1:A:62:ASP:HA | 1:A:62:ASP:HB3 | 17 | 0.5 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:60:LEU:HB2 | 11 | 0.5 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:60:LEU:HB2 | 11 | 0.5 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:60:LEU:HB2 | 11 | 0.5 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB3 | 11 | 0.5 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB1 | 11 | 0.5 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:HB2 | 11 | 0.5 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB3 | 11 | 0.5 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB1 | 11 | 0.5 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:HB2 | 11 | 0.5 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB3 | 11 | 0.5 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB1 | 11 | 0.5 |
| (2,50) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:HB2 | 11 | 0.5 |
| (2,421) | 1:A:42:LYS:HA | 1:A:42:LYS:HB3 | 1 | 0.5 |
| (2,421) | 1:A:42:LYS:HA | 1:A:42:LYS:HB3 | 11 | 0.5 |
| (2,401) | 1:A:40:ILE:HA | 1:A:43:PHE:HB3 | 3 | 0.5 |
| (2,376) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:36:ILE:HG13 | 16 | 0.5 |
| (2,1174) | 1:A:87:VAL:H | 1:A:86:LYS:HG2 | 18 | 0.5 |
| (2,1095) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LYS:HG3 | 9 | 0.5 |
| (1,13) | 1:A:38:PRO:N | 1:A:34:LYS:O | 2 | 0.5 |
| (2,992) | 1:A:43:PHE:HB3 | 1:A:44:SER:H | 11 | 0.49 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,990) | 1:A:42:LYS:HB2 | 1:A:43:PHE:H | 7 | 0.49 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB1 | 1:A:97:GLN:HB2 | 15 | 0.49 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB3 | 1:A:97:GLN:HB2 | 15 | 0.49 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB2 | 1:A:97:GLN:HB2 | 15 | 0.49 |
| (2,679) | 1:A:82:LYS:HB3 | 1:A:83:GLU:H | 9 | 0.49 |
| (2,677) | 1:A:86:LYS:HG2 | 1:A:86:LYS:HA | 9 | 0.49 |
| (2,493) | 1:A:54:LYS:HE2 | 1:A:40:ILE:HG22 | 14 | 0.49 |
| (2,493) | 1:A:54:LYS:HE2 | 1:A:40:ILE:HG21 | 14 | 0.49 |
| (2,493) | 1:A:54:LYS:HE2 | 1:A:40:ILE:HG23 | 14 | 0.49 |
| (2,401) | 1:A:40:ILE:HA | 1:A:43:PHE:HB3 | 17 | 0.49 |
| (2,384) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:54:LYS:HD2 | 15 | 0.49 |
| (2,384) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:54:LYS:HD2 | 15 | 0.49 |
| (2,384) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:54:LYS:HD2 | 15 | 0.49 |
| (1,13) | 1:A:38:PRO:N | 1:A:34:LYS:O | 5 | 0.49 |
| (1,13) | 1:A:38:PRO:N | 1:A:34:LYS:O | 11 | 0.49 |
| (2,992) | 1:A:43:PHE:HB3 | 1:A:44:SER:H | 13 | 0.48 |
| (2,990) | 1:A:42:LYS:HB2 | 1:A:43:PHE:H | 4 | 0.48 |
| (2,990) | 1:A:42:LYS:HB2 | 1:A:43:PHE:H | 10 | 0.48 |
| (2,969) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:33:CYS:H | 1 | 0.48 |
| (2,847) | 1:A:3:THR:H | 1:A:53:TYR:HB2 | 2 | 0.48 |
| (2,847) | 1:A:3:THR:H | 1:A:53:TYR:HB2 | 5 | 0.48 |
| (2,847) | 1:A:3:THR:H | 1:A:53:TYR:HB2 | 6 | 0.48 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB1 | 1:A:97:GLN:HB2 | 20 | 0.48 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB3 | 1:A:97:GLN:HB2 | 20 | 0.48 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB2 | 1:A:97:GLN:HB2 | 20 | 0.48 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:H | 13 | 0.48 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:H | 13 | 0.48 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:H | 13 | 0.48 |
| (2,496) | 1:A:54:LYS:HE2 | 1:A:2:VAL:HB | 19 | 0.48 |
| (2,316) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:55:LEU:H | 1 | 0.48 |
| (2,316) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:55:LEU:H | 11 | 0.48 |
| (2,1029) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:53:TYR:HB2 | 5 | 0.48 |
| (2,1029) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:53:TYR:HB2 | 13 | 0.48 |
| (1,13) | 1:A:38:PRO:N | 1:A:34:LYS:O | 3 | 0.48 |
| (1,13) | 1:A:38:PRO:N | 1:A:34:LYS:O | 8 | 0.48 |
| (1,13) | 1:A:38:PRO:N | 1:A:34:LYS:O | 18 | 0.48 |
| (2,873) | 1:A:7:THR:H | 1:A:5:PHE:HB2 | 15 | 0.47 |
| (2,822) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:83:GLU:H | 5 | 0.47 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB1 | 1:A:97:GLN:HB2 | 1 | 0.47 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB3 | 1:A:97:GLN:HB2 | 1 | 0.47 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB2 | 1:A:97:GLN:HB2 | 1 | 0.47 |
| (2,679) | 1:A:82:LYS:HB3 | 1:A:83:GLU:H | 20 | 0.47 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:H | 11 | 0.47 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:H | 11 | 0.47 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:H | 11 | 0.47 |
| (2,411) | 1:A:40:ILE:HG22 | 1:A:54:LYS:HD2 | 12 | 0.47 |
| (2,411) | 1:A:40:ILE:HG21 | 1:A:54:LYS:HD2 | 12 | 0.47 |
| (2,411) | 1:A:40:ILE:HG23 | 1:A:54:LYS:HD2 | 12 | 0.47 |
| (2,316) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:55:LEU:H | 5 | 0.47 |
| (2,1252) | 1:A:67:ASN:HD21 | 1:A:66:LYS:HB2 | 3 | 0.47 |
| (2,1171) | 1:A:86:LYS:HB2 | 1:A:86:LYS:H | 9 | 0.47 |
| (2,1055) | 1:A:60:LEU:H | 1:A:59:GLU:HB3 | 16 | 0.47 |
| (2,958) | 1:A:26:TYR:H | 1:A:57:VAL:HG23 | 7 | 0.46 |
| (2,958) | 1:A:26:TYR:H | 1:A:57:VAL:HG21 | 7 | 0.46 |
| (2,958) | 1:A:26:TYR:H | 1:A:57:VAL:HG22 | 7 | 0.46 |
| (2,858) | 1:A:5:PHE:HB3 | 1:A:5:PHE:H | 6 | 0.46 |
| (2,677) | 1:A:86:LYS:HG2 | 1:A:86:LYS:HA | 6 | 0.46 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:61:GLY:HA3 | 10 | 0.46 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:61:GLY:HA3 | 10 | 0.46 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:61:GLY:HA3 | 10 | 0.46 |
| (2,496) | 1:A:54:LYS:HE2 | 1:A:2:VAL:HB | 6 | 0.46 |
| (2,45) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:103:ALA:HB3 | 6 | 0.46 |
| (2,45) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:103:ALA:HB1 | 6 | 0.46 |
| (2,45) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:103:ALA:HB2 | 6 | 0.46 |
| (2,45) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:50:ALA:HB1 | 6 | 0.46 |
| (2,45) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:50:ALA:HB2 | 6 | 0.46 |
| (2,45) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:50:ALA:HB3 | 6 | 0.46 |
| (2,440) | 1:A:46:GLN:HG2 | 1:A:43:PHE:HD2 | 7 | 0.46 |
| (2,440) | 1:A:46:GLN:HG2 | 1:A:43:PHE:HD1 | 7 | 0.46 |
| (2,422) | 1:A:67:ASN:HB3 | 1:A:76:LEU:HD11 | 5 | 0.46 |
| (2,422) | 1:A:67:ASN:HB3 | 1:A:76:LEU:HD13 | 5 | 0.46 |
| (2,422) | 1:A:67:ASN:HB3 | 1:A:76:LEU:HD12 | 5 | 0.46 |
| (2,316) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:55:LEU:H | 12 | 0.46 |
| (2,1171) | 1:A:86:LYS:HB2 | 1:A:86:LYS:H | 5 | 0.46 |
| (2,1171) | 1:A:86:LYS:HB2 | 1:A:86:LYS:H | 6 | 0.46 |
| (2,1171) | 1:A:86:LYS:HB2 | 1:A:86:LYS:H | 8 | 0.46 |
| (2,1171) | 1:A:86:LYS:HB2 | 1:A:86:LYS:H | 14 | 0.46 |
| (2,1029) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:53:TYR:HB2 | 7 | 0.46 |
| (1,13) | 1:A:38:PRO:N | 1:A:34:LYS:O | 9 | 0.46 |
| (1,13) | 1:A:38:PRO:N | 1:A:34:LYS:O | 14 | 0.46 |
| (2,938) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:21:VAL:H | 13 | 0.45 |
| (2,677) | 1:A:86:LYS:HG2 | 1:A:86:LYS:HA | 14 | 0.45 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG11 | 4 | 0.45 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG13 | 4 | 0.45 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG12 | 4 | 0.45 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG11 | 4 | 0.45 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG13 | 4 | 0.45 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG12 | 4 | 0.45 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG11 | 4 | 0.45 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG13 | 4 | 0.45 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG12 | 4 | 0.45 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:61:GLY:HA3 | 1 | 0.45 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:61:GLY:HA3 | 1 | 0.45 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:61:GLY:HA3 | 1 | 0.45 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:61:GLY:HA3 | 14 | 0.45 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:61:GLY:HA3 | 14 | 0.45 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:61:GLY:HA3 | 14 | 0.45 |
| (2,503) | 1:A:5:PHE:HB2 | 1:A:55:LEU:HD11 | 18 | 0.45 |
| (2,503) | 1:A:5:PHE:HB2 | 1:A:55:LEU:HD12 | 18 | 0.45 |
| (2,503) | 1:A:5:PHE:HB2 | 1:A:55:LEU:HD13 | 18 | 0.45 |
| (2,376) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:36:ILE:HG13 | 11 | 0.45 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD21 | 7 | 0.45 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD22 | 7 | 0.45 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD23 | 7 | 0.45 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD21 | 7 | 0.45 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD23 | 7 | 0.45 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD22 | 7 | 0.45 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG23 | 7 | 0.45 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG21 | 7 | 0.45 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG22 | 7 | 0.45 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD13 | 7 | 0.45 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD11 | 7 | 0.45 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD12 | 7 | 0.45 |
| (1,13) | 1:A:38:PRO:N | 1:A:34:LYS:O | 4 | 0.45 |
| (1,13) | 1:A:38:PRO:N | 1:A:34:LYS:O | 6 | 0.45 |
| (2,990) | 1:A:42:LYS:HB2 | 1:A:43:PHE:H | 18 | 0.44 |
| (2,969) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:33:CYS:H | 14 | 0.44 |
| (2,969) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:33:CYS:H | 16 | 0.44 |
| (2,928) | 1:A:19:LYS:H | 1:A:18:ASP:HB2 | 13 | 0.44 |
| (2,839) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:31:GLY:HA2 | 20 | 0.44 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB1 | 1:A:97:GLN:HB2 | 3 | 0.44 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB3 | 1:A:97:GLN:HB2 | 3 | 0.44 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB2 | 1:A:97:GLN:HB2 | 3 | 0.44 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB1 | 1:A:97:GLN:HB2 | 13 | 0.44 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB3 | 1:A:97:GLN:HB2 | 13 | 0.44 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB2 | 1:A:97:GLN:HB2 | 13 | 0.44 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,540) | 1:A:60:LEU:HG | 1:A:63:VAL:HG12 | 6 | 0.44 |
| (2,540) | 1:A:60:LEU:HG | 1:A:63:VAL:HG11 | 6 | 0.44 |
| (2,540) | 1:A:60:LEU:HG | 1:A:63:VAL:HG13 | 6 | 0.44 |
| (2,513) | 1:A:57:VAL:HA | 1:A:57:VAL:HG23 | 7 | 0.44 |
| (2,513) | 1:A:57:VAL:HA | 1:A:57:VAL:HG21 | 7 | 0.44 |
| (2,513) | 1:A:57:VAL:HA | 1:A:57:VAL:HG22 | 7 | 0.44 |
| (2,513) | 1:A:57:VAL:HA | 1:A:57:VAL:HG23 | 9 | 0.44 |
| (2,513) | 1:A:57:VAL:HA | 1:A:57:VAL:HG21 | 9 | 0.44 |
| (2,513) | 1:A:57:VAL:HA | 1:A:57:VAL:HG22 | 9 | 0.44 |
| (2,513) | 1:A:57:VAL:HA | 1:A:57:VAL:HG23 | 15 | 0.44 |
| (2,513) | 1:A:57:VAL:HA | 1:A:57:VAL:HG21 | 15 | 0.44 |
| (2,513) | 1:A:57:VAL:HA | 1:A:57:VAL:HG22 | 15 | 0.44 |
| (2,316) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:55:LEU:H | 8 | 0.44 |
| (2,1243) | 1:A:4:GLN:HE21 | 1:A:6:LYS:HB3 | 19 | 0.44 |
| (2,1171) | 1:A:86:LYS:HB2 | 1:A:86:LYS:H | 15 | 0.44 |
| (2,1155) | 1:A:82:LYS:H | 1:A:82:LYS:HG2 | 2 | 0.44 |
| (2,1056) | 1:A:60:LEU:H | 1:A:60:LEU:HD13 | 6 | 0.44 |
| (2,1056) | 1:A:60:LEU:H | 1:A:60:LEU:HD11 | 6 | 0.44 |
| (2,1056) | 1:A:60:LEU:H | 1:A:60:LEU:HD12 | 6 | 0.44 |
| (2,1055) | 1:A:60:LEU:H | 1:A:59:GLU:HB3 | 8 | 0.44 |
| (2,1029) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:53:TYR:HB2 | 11 | 0.44 |
| (1,13) | 1:A:38:PRO:N | 1:A:34:LYS:O | 1 | 0.44 |
| (1,13) | 1:A:38:PRO:N | 1:A:34:LYS:O | 15 | 0.44 |
| (1,13) | 1:A:38:PRO:N | 1:A:34:LYS:O | 20 | 0.44 |
| (2,858) | 1:A:5:PHE:HB3 | 1:A:5:PHE:H | 7 | 0.43 |
| (2,847) | 1:A:3:THR:H | 1:A:53:TYR:HB2 | 9 | 0.43 |
| (2,847) | 1:A:3:THR:H | 1:A:53:TYR:HB2 | 12 | 0.43 |
| (2,683) | 1:A:46:GLN:HA | 1:A:47:TYR:H | 7 | 0.43 |
| (2,677) | 1:A:86:LYS:HG2 | 1:A:86:LYS:HA | 2 | 0.43 |
| (2,677) | 1:A:86:LYS:HG2 | 1:A:86:LYS:HA | 15 | 0.43 |
| (2,472) | 1:A:52:PHE:HA | 1:A:47:TYR:HD2 | 6 | 0.43 |
| (2,472) | 1:A:52:PHE:HA | 1:A:47:TYR:HD1 | 6 | 0.43 |
| (2,401) | 1:A:40:ILE:HA | 1:A:43:PHE:HB3 | 11 | 0.43 |
| (2,316) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:55:LEU:H | 20 | 0.43 |
| (2,1243) | 1:A:4:GLN:HE21 | 1:A:6:LYS:HB3 | 18 | 0.43 |
| (2,1199) | 1:A:97:GLN:H | 1:A:96:LYS:HB3 | 19 | 0.43 |
| (1,13) | 1:A:38:PRO:N | 1:A:34:LYS:O | 13 | 0.43 |
| (1,13) | 1:A:38:PRO:N | 1:A:34:LYS:O | 17 | 0.43 |
| (2,969) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:33:CYS:H | 11 | 0.42 |
| (2,938) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:21:VAL:H | 18 | 0.42 |
| (2,928) | 1:A:19:LYS:H | 1:A:18:ASP:HB2 | 5 | 0.42 |
| (2,708) | 1:A:87:VAL:HG12 | 1:A:87:VAL:HA | 4 | 0.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,708) | 1:A:87:VAL:HG11 | 1:A:87:VAL:HA | 4 | 0.42 |
| (2,708) | 1:A:87:VAL:HG13 | 1:A:87:VAL:HA | 4 | 0.42 |
| (2,496) | 1:A:54:LYS:HE2 | 1:A:2:VAL:HB | 7 | 0.42 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG12 | 15 | 0.42 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG11 | 15 | 0.42 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG13 | 15 | 0.42 |
| (2,45) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:103:ALA:HB3 | 13 | 0.42 |
| (2,45) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:103:ALA:HB1 | 13 | 0.42 |
| (2,45) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:103:ALA:HB2 | 13 | 0.42 |
| (2,45) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:50:ALA:HB1 | 13 | 0.42 |
| (2,45) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:50:ALA:HB2 | 13 | 0.42 |
| (2,45) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:50:ALA:HB3 | 13 | 0.42 |
| (2,376) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:36:ILE:HG13 | 4 | 0.42 |
| (2,376) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:36:ILE:HG13 | 18 | 0.42 |
| (2,316) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:55:LEU:H | 10 | 0.42 |
| (2,316) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:55:LEU:H | 16 | 0.42 |
| (2,120) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:59:GLU:HG3 | 18 | 0.42 |
| (2,120) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:59:GLU:HG2 | 18 | 0.42 |
| (2,1199) | 1:A:97:GLN:H | 1:A:96:LYS:HB3 | 14 | 0.42 |
| (2,1155) | 1:A:82:LYS:H | 1:A:82:LYS:HG2 | 19 | 0.42 |
| (2,1048) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:57:VAL:HG11 | 9 | 0.42 |
| (2,1048) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:57:VAL:HG12 | 9 | 0.42 |
| (2,1048) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:57:VAL:HG13 | 9 | 0.42 |
| (2,1029) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:53:TYR:HB2 | 9 | 0.42 |
| (2,1029) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:53:TYR:HB2 | 16 | 0.42 |
| (2,990) | 1:A:42:LYS:HB2 | 1:A:43:PHE:H | 5 | 0.41 |
| (2,990) | 1:A:42:LYS:HB2 | 1:A:43:PHE:H | 13 | 0.41 |
| (2,990) | 1:A:42:LYS:HB2 | 1:A:43:PHE:H | 15 | 0.41 |
| (2,933) | 1:A:19:LYS:HG2 | 1:A:20:LEU:H | 4 | 0.41 |
| (2,858) | 1:A:5:PHE:HB3 | 1:A:5:PHE:H | 2 | 0.41 |
| (2,858) | 1:A:5:PHE:HB3 | 1:A:5:PHE:H | 3 | 0.41 |
| (2,858) | 1:A:5:PHE:HB3 | 1:A:5:PHE:H | 14 | 0.41 |
| (2,833) | 1:A:31:GLY:HA3 | 1:A:34:LYS:HB3 | 3 | 0.41 |
| (2,822) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:83:GLU:H | 11 | 0.41 |
| (2,677) | 1:A:86:LYS:HG2 | 1:A:86:LYS:HA | 8 | 0.41 |
| (2,584) | 1:A:66:LYS:HG3 | 1:A:66:LYS:HA | 9 | 0.41 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD11 | 1:A:23:VAL:HG21 | 14 | 0.41 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD11 | 1:A:23:VAL:HG23 | 14 | 0.41 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD11 | 1:A:23:VAL:HG22 | 14 | 0.41 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD12 | 1:A:23:VAL:HG21 | 14 | 0.41 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD12 | 1:A:23:VAL:HG23 | 14 | 0.41 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD12 | 1:A:23:VAL:HG22 | 14 | 0.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD13 | 1:A:23:VAL:HG21 | 14 | 0.41 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD13 | 1:A:23:VAL:HG23 | 14 | 0.41 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD13 | 1:A:23:VAL:HG22 | 14 | 0.41 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD11 | 15 | 0.41 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD12 | 15 | 0.41 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD13 | 15 | 0.41 |
| (2,316) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:55:LEU:H | 7 | 0.41 |
| (2,316) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:55:LEU:H | 17 | 0.41 |
| (2,1174) | 1:A:87:VAL:H | 1:A:86:LYS:HG2 | 2 | 0.41 |
| (2,1171) | 1:A:86:LYS:HB2 | 1:A:86:LYS:H | 16 | 0.41 |
| (2,1006) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:47:TYR:H | 10 | 0.41 |
| (2,990) | 1:A:42:LYS:HB2 | 1:A:43:PHE:H | 16 | 0.4 |
| (2,969) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:33:CYS:H | 8 | 0.4 |
| (2,933) | 1:A:19:LYS:HG2 | 1:A:20:LEU:H | 15 | 0.4 |
| (2,858) | 1:A:5:PHE:HB3 | 1:A:5:PHE:H | 8 | 0.4 |
| (2,858) | 1:A:5:PHE:HB3 | 1:A:5:PHE:H | 9 | 0.4 |
| (2,858) | 1:A:5:PHE:HB3 | 1:A:5:PHE:H | 12 | 0.4 |
| (2,858) | 1:A:5:PHE:HB3 | 1:A:5:PHE:H | 13 | 0.4 |
| (2,858) | 1:A:5:PHE:HB3 | 1:A:5:PHE:H | 16 | 0.4 |
| (2,858) | 1:A:5:PHE:HB3 | 1:A:5:PHE:H | 17 | 0.4 |
| (2,858) | 1:A:5:PHE:HB3 | 1:A:5:PHE:H | 18 | 0.4 |
| (2,847) | 1:A:3:THR:H | 1:A:53:TYR:HB2 | 10 | 0.4 |
| (2,839) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:31:GLY:HA2 | 7 | 0.4 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB1 | 1:A:77:LEU:H | 2 | 0.4 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB3 | 1:A:77:LEU:H | 2 | 0.4 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB2 | 1:A:77:LEU:H | 2 | 0.4 |
| (2,751) | 1:A:97:GLN:HA | 1:A:97:GLN:HB3 | 10 | 0.4 |
| (2,583) | 1:A:66:LYS:HE2 | 1:A:8:ALA:HB1 | 8 | 0.4 |
| (2,583) | 1:A:66:LYS:HE2 | 1:A:8:ALA:HB2 | 8 | 0.4 |
| (2,583) | 1:A:66:LYS:HE2 | 1:A:8:ALA:HB3 | 8 | 0.4 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD11 | 1:A:23:VAL:HG21 | 10 | 0.4 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD11 | 1:A:23:VAL:HG23 | 10 | 0.4 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD11 | 1:A:23:VAL:HG22 | 10 | 0.4 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD12 | 1:A:23:VAL:HG21 | 10 | 0.4 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD12 | 1:A:23:VAL:HG23 | 10 | 0.4 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD12 | 1:A:23:VAL:HG22 | 10 | 0.4 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD13 | 1:A:23:VAL:HG21 | 10 | 0.4 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD13 | 1:A:23:VAL:HG23 | 10 | 0.4 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD13 | 1:A:23:VAL:HG22 | 10 | 0.4 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD11 | 6 | 0.4 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD12 | 6 | 0.4 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD13 | 6 | 0.4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,364) | 1:A:46:GLN:HA | 1:A:46:GLN:HB2 | 1 | 0.4 |
| (2,316) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:55:LEU:H | 4 | 0.4 |
| (2,316) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:55:LEU:H | 9 | 0.4 |
| (2,1243) | 1:A:4:GLN:HE21 | 1:A:6:LYS:HB3 | 17 | 0.4 |
| (2,1171) | 1:A:86:LYS:HB2 | 1:A:86:LYS:H | 7 | 0.4 |
| (2,1055) | 1:A:60:LEU:H | 1:A:59:GLU:HB3 | 5 | 0.4 |
| (2,1006) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:47:TYR:H | 9 | 0.4 |
| (1,13) | 1:A:38:PRO:N | 1:A:34:LYS:O | 7 | 0.4 |
| (2,990) | 1:A:42:LYS:HB2 | 1:A:43:PHE:H | 8 | 0.39 |
| (2,858) | 1:A:5:PHE:HB3 | 1:A:5:PHE:H | 1 | 0.39 |
| (2,858) | 1:A:5:PHE:HB3 | 1:A:5:PHE:H | 4 | 0.39 |
| (2,858) | 1:A:5:PHE:HB3 | 1:A:5:PHE:H | 11 | 0.39 |
| (2,858) | 1:A:5:PHE:HB3 | 1:A:5:PHE:H | 19 | 0.39 |
| (2,847) | 1:A:3:THR:H | 1:A:53:TYR:HB2 | 16 | 0.39 |
| (2,839) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:31:GLY:HA2 | 13 | 0.39 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB1 | 1:A:77:LEU:H | 6 | 0.39 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB3 | 1:A:77:LEU:H | 6 | 0.39 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB2 | 1:A:77:LEU:H | 6 | 0.39 |
| (2,583) | 1:A:66:LYS:HE2 | 1:A:8:ALA:HB1 | 13 | 0.39 |
| (2,583) | 1:A:66:LYS:HE2 | 1:A:8:ALA:HB2 | 13 | 0.39 |
| (2,583) | 1:A:66:LYS:HE2 | 1:A:8:ALA:HB3 | 13 | 0.39 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG12 | 8 | 0.39 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG11 | 8 | 0.39 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG13 | 8 | 0.39 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG12 | 12 | 0.39 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG11 | 12 | 0.39 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG13 | 12 | 0.39 |
| (2,453) | 1:A:50:ALA:HA | 1:A:20:LEU:HB2 | 14 | 0.39 |
| (2,439) | 1:A:46:GLN:HG2 | 1:A:46:GLN:HA | 16 | 0.39 |
| (2,316) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:55:LEU:H | 15 | 0.39 |
| (2,1294) | 1:A:52:PHE:HE2 | 1:A:44:SER:HB3 | 1 | 0.39 |
| (2,1294) | 1:A:52:PHE:HE1 | 1:A:44:SER:HB3 | 1 | 0.39 |
| (2,1243) | 1:A:4:GLN:HE21 | 1:A:6:LYS:HB3 | 6 | 0.39 |
| (2,1243) | 1:A:4:GLN:HE21 | 1:A:6:LYS:HB3 | 8 | 0.39 |
| (2,1243) | 1:A:4:GLN:HE21 | 1:A:6:LYS:HB3 | 16 | 0.39 |
| (2,1171) | 1:A:86:LYS:HB2 | 1:A:86:LYS:H | 1 | 0.39 |
| (2,928) | 1:A:19:LYS:H | 1:A:18:ASP:HB2 | 14 | 0.38 |
| (2,858) | 1:A:5:PHE:HB3 | 1:A:5:PHE:H | 5 | 0.38 |
| (2,858) | 1:A:5:PHE:HB3 | 1:A:5:PHE:H | 10 | 0.38 |
| (2,858) | 1:A:5:PHE:HB3 | 1:A:5:PHE:H | 20 | 0.38 |
| (2,775) | 1:A:99:ILE:HG21 | 1:A:96:LYS:HD2 | 9 | 0.38 |
| (2,775) | 1:A:99:ILE:HG22 | 1:A:96:LYS:HD2 | 9 | 0.38 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,775) | 1:A:99:ILE:HG23 | 1:A:96:LYS:HD2 | 9 | 0.38 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:47:TYR:HE2 | 6 | 0.38 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:47:TYR:HE1 | 6 | 0.38 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:47:TYR:HE2 | 6 | 0.38 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:47:TYR:HE1 | 6 | 0.38 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:47:TYR:HE2 | 6 | 0.38 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:47:TYR:HE1 | 6 | 0.38 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB1 | 1:A:77:LEU:H | 10 | 0.38 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB3 | 1:A:77:LEU:H | 10 | 0.38 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB2 | 1:A:77:LEU:H | 10 | 0.38 |
| (2,683) | 1:A:46:GLN:HA | 1:A:47:TYR:H | 10 | 0.38 |
| (2,401) | 1:A:40:ILE:HA | 1:A:43:PHE:HB3 | 8 | 0.38 |
| (2,376) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:36:ILE:HG13 | 15 | 0.38 |
| (2,376) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:36:ILE:HG13 | 20 | 0.38 |
| (2,182) | 1:A:6:LYS:HD3 | 1:A:6:LYS:HE2 | 3 | 0.38 |
| (2,182) | 1:A:6:LYS:HD3 | 1:A:6:LYS:HE2 | 8 | 0.38 |
| (2,182) | 1:A:6:LYS:HD3 | 1:A:6:LYS:HE2 | 12 | 0.38 |
| (2,1243) | 1:A:4:GLN:HE21 | 1:A:6:LYS:HB3 | 11 | 0.38 |
| (2,1171) | 1:A:86:LYS:HB2 | 1:A:86:LYS:H | 2 | 0.38 |
| (2,98) | 1:A:19:LYS:HG2 | 1:A:19:LYS:H | 2 | 0.37 |
| (2,98) | 1:A:19:LYS:H | 1:A:19:LYS:HG3 | 2 | 0.37 |
| (2,873) | 1:A:7:THR:H | 1:A:5:PHE:HB2 | 16 | 0.37 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB1 | 1:A:77:LEU:H | 4 | 0.37 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB3 | 1:A:77:LEU:H | 4 | 0.37 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB2 | 1:A:77:LEU:H | 4 | 0.37 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB1 | 1:A:77:LEU:H | 9 | 0.37 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB3 | 1:A:77:LEU:H | 9 | 0.37 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB2 | 1:A:77:LEU:H | 9 | 0.37 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB1 | 1:A:77:LEU:H | 16 | 0.37 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB3 | 1:A:77:LEU:H | 16 | 0.37 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB2 | 1:A:77:LEU:H | 16 | 0.37 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB1 | 1:A:97:GLN:HB2 | 17 | 0.37 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB3 | 1:A:97:GLN:HB2 | 17 | 0.37 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB2 | 1:A:97:GLN:HB2 | 17 | 0.37 |
| (2,677) | 1:A:86:LYS:HG2 | 1:A:86:LYS:HA | 7 | 0.37 |
| (2,583) | 1:A:66:LYS:HE2 | 1:A:8:ALA:HB1 | 1 | 0.37 |
| (2,583) | 1:A:66:LYS:HE2 | 1:A:8:ALA:HB2 | 1 | 0.37 |
| (2,583) | 1:A:66:LYS:HE2 | 1:A:8:ALA:HB3 | 1 | 0.37 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD11 | 1:A:23:VAL:HG21 | 3 | 0.37 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD11 | 1:A:23:VAL:HG23 | 3 | 0.37 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD11 | 1:A:23:VAL:HG22 | 3 | 0.37 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD12 | 1:A:23:VAL:HG21 | 3 | 0.37 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD12 | 1:A:23:VAL:HG23 | 3 | 0.37 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD12 | 1:A:23:VAL:HG22 | 3 | 0.37 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD13 | 1:A:23:VAL:HG21 | 3 | 0.37 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD13 | 1:A:23:VAL:HG23 | 3 | 0.37 |
| (2,507) | 1:A:55:LEU:HD13 | 1:A:23:VAL:HG22 | 3 | 0.37 |
| (2,472) | 1:A:52:PHE:HA | 1:A:47:TYR:HD2 | 3 | 0.37 |
| (2,472) | 1:A:52:PHE:HA | 1:A:47:TYR:HD1 | 3 | 0.37 |
| (2,401) | 1:A:40:ILE:HA | 1:A:43:PHE:HB3 | 5 | 0.37 |
| (2,401) | 1:A:40:ILE:HA | 1:A:43:PHE:HB3 | 18 | 0.37 |
| (2,316) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:55:LEU:H | 14 | 0.37 |
| (2,1267) | 1:A:49:GLN:HE22 | 1:A:20:LEU:HB2 | 15 | 0.37 |
| (2,1263) | 1:A:49:GLN:HE21 | 1:A:20:LEU:HB2 | 2 | 0.37 |
| (2,1261) | 1:A:80:ASN:HD22 | 1:A:82:LYS:HG2 | 3 | 0.37 |
| (2,1243) | 1:A:4:GLN:HE21 | 1:A:6:LYS:HB3 | 4 | 0.37 |
| (2,1243) | 1:A:4:GLN:HE21 | 1:A:6:LYS:HB3 | 9 | 0.37 |
| (2,1243) | 1:A:4:GLN:HE21 | 1:A:6:LYS:HB3 | 10 | 0.37 |
| (2,1199) | 1:A:97:GLN:H | 1:A:96:LYS:HB3 | 8 | 0.37 |
| (2,1199) | 1:A:97:GLN:H | 1:A:96:LYS:HB3 | 11 | 0.37 |
| (2,1023) | 1:A:53:TYR:H | 1:A:53:TYR:HB3 | 17 | 0.37 |
| (2,969) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:33:CYS:H | 15 | 0.36 |
| (2,873) | 1:A:7:THR:H | 1:A:5:PHE:HB2 | 6 | 0.36 |
| (2,858) | 1:A:5:PHE:HB3 | 1:A:5:PHE:H | 15 | 0.36 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB1 | 1:A:77:LEU:H | 11 | 0.36 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB3 | 1:A:77:LEU:H | 11 | 0.36 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB2 | 1:A:77:LEU:H | 11 | 0.36 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB1 | 1:A:77:LEU:H | 12 | 0.36 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB3 | 1:A:77:LEU:H | 12 | 0.36 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB2 | 1:A:77:LEU:H | 12 | 0.36 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB1 | 1:A:97:GLN:HB2 | 8 | 0.36 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB3 | 1:A:97:GLN:HB2 | 8 | 0.36 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB2 | 1:A:97:GLN:HB2 | 8 | 0.36 |
| (2,472) | 1:A:52:PHE:HA | 1:A:47:TYR:HD2 | 19 | 0.36 |
| (2,472) | 1:A:52:PHE:HA | 1:A:47:TYR:HD1 | 19 | 0.36 |
| (2,446) | 1:A:47:TYR:HA | 1:A:47:TYR:HD2 | 7 | 0.36 |
| (2,446) | 1:A:47:TYR:HA | 1:A:47:TYR:HD1 | 7 | 0.36 |
| (2,31) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:39:MET:HB2 | 1 | 0.36 |
| (2,31) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:42:LYS:HB2 | 1 | 0.36 |
| (2,185) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:10:GLU:H | 15 | 0.36 |
| (2,1263) | 1:A:49:GLN:HE21 | 1:A:20:LEU:HB2 | 7 | 0.36 |
| (2,1259) | 1:A:80:ASN:HD22 | 1:A:79:LYS:HB3 | 1 | 0.36 |
| (2,1243) | 1:A:4:GLN:HE21 | 1:A:6:LYS:HB3 | 1 | 0.36 |
| (2,1199) | 1:A:97:GLN:H | 1:A:96:LYS:HB3 | 3 | 0.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1174) | 1:A:87:VAL:H | 1:A:86:LYS:HG2 | 6 | 0.36 |
| (2,1055) | 1:A:60:LEU:H | 1:A:59:GLU:HB3 | 14 | 0.36 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD21 | 8 | 0.36 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD22 | 8 | 0.36 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD23 | 8 | 0.36 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD21 | 8 | 0.36 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD23 | 8 | 0.36 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD22 | 8 | 0.36 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG23 | 8 | 0.36 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG21 | 8 | 0.36 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG22 | 8 | 0.36 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD13 | 8 | 0.36 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD11 | 8 | 0.36 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD12 | 8 | 0.36 |
| (2,990) | 1:A:42:LYS:HB2 | 1:A:43:PHE:H | 19 | 0.35 |
| (2,847) | 1:A:3:THR:H | 1:A:53:TYR:HB2 | 3 | 0.35 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB3 | 1:A:47:TYR:HB2 | 13 | 0.35 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB1 | 1:A:47:TYR:HB2 | 13 | 0.35 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB2 | 1:A:47:TYR:HB2 | 13 | 0.35 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB3 | 1:A:47:TYR:HB3 | 13 | 0.35 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB1 | 1:A:47:TYR:HB3 | 13 | 0.35 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB2 | 1:A:47:TYR:HB3 | 13 | 0.35 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB1 | 1:A:77:LEU:H | 1 | 0.35 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB3 | 1:A:77:LEU:H | 1 | 0.35 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB2 | 1:A:77:LEU:H | 1 | 0.35 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB1 | 1:A:77:LEU:H | 15 | 0.35 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB3 | 1:A:77:LEU:H | 15 | 0.35 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB2 | 1:A:77:LEU:H | 15 | 0.35 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB1 | 1:A:97:GLN:HB2 | 9 | 0.35 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB3 | 1:A:97:GLN:HB2 | 9 | 0.35 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB2 | 1:A:97:GLN:HB2 | 9 | 0.35 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB1 | 1:A:97:GLN:HB2 | 16 | 0.35 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB3 | 1:A:97:GLN:HB2 | 16 | 0.35 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB2 | 1:A:97:GLN:HB2 | 16 | 0.35 |
| (2,683) | 1:A:46:GLN:HA | 1:A:47:TYR:H | 15 | 0.35 |
| (2,677) | 1:A:86:LYS:HG2 | 1:A:86:LYS:HA | 1 | 0.35 |
| (2,67) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG11 | 20 | 0.35 |
| (2,67) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG12 | 20 | 0.35 |
| (2,67) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG13 | 20 | 0.35 |
| (2,67) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:77:LEU:HG | 20 | 0.35 |
| (2,67) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:77:LEU:HG | 20 | 0.35 |
| (2,67) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:77:LEU:HG | 20 | 0.35 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG11 | 13 | 0.35 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG12 | 13 | 0.35 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG13 | 13 | 0.35 |
| (2,446) | 1:A:47:TYR:HA | 1:A:47:TYR:HD2 | 4 | 0.35 |
| (2,446) | 1:A:47:TYR:HA | 1:A:47:TYR:HD1 | 4 | 0.35 |
| (2,401) | 1:A:40:ILE:HA | 1:A:43:PHE:HB3 | 7 | 0.35 |
| (2,399) | 1:A:65:GLN:HG3 | 1:A:61:GLY:HA3 | 6 | 0.35 |
| (2,399) | 1:A:65:GLN:HG3 | 1:A:61:GLY:HA3 | 18 | 0.35 |
| (2,316) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:55:LEU:H | 13 | 0.35 |
| (2,31) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:39:MET:HB2 | 14 | 0.35 |
| (2,31) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:42:LYS:HB2 | 14 | 0.35 |
| (2,289) | 1:A:88:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG21 | 8 | 0.35 |
| (2,289) | 1:A:88:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG23 | 8 | 0.35 |
| (2,289) | 1:A:88:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG22 | 8 | 0.35 |
| (2,270) | 1:A:19:LYS:HA | 1:A:19:LYS:HE3 | 9 | 0.35 |
| (2,185) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:10:GLU:H | 13 | 0.35 |
| (2,1259) | 1:A:80:ASN:HD22 | 1:A:79:LYS:HB3 | 6 | 0.35 |
| (2,1243) | 1:A:4:GLN:HE21 | 1:A:6:LYS:HB3 | 2 | 0.35 |
| (2,1243) | 1:A:4:GLN:HE21 | 1:A:6:LYS:HB3 | 5 | 0.35 |
| (2,1243) | 1:A:4:GLN:HE21 | 1:A:6:LYS:HB3 | 12 | 0.35 |
| (2,1048) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:57:VAL:HG11 | 7 | 0.35 |
| (2,1048) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:57:VAL:HG12 | 7 | 0.35 |
| (2,1048) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:57:VAL:HG13 | 7 | 0.35 |
| (2,1023) | 1:A:53:TYR:H | 1:A:53:TYR:HB3 | 18 | 0.35 |
| (2,847) | 1:A:3:THR:H | 1:A:53:TYR:HB2 | 14 | 0.34 |
| (2,847) | 1:A:3:THR:H | 1:A:53:TYR:HB2 | 19 | 0.34 |
| (2,794) | 1:A:26:TYR:HA | 1:A:26:TYR:HD2 | 18 | 0.34 |
| (2,794) | 1:A:26:TYR:HA | 1:A:26:TYR:HD1 | 18 | 0.34 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:47:TYR:HE2 | 19 | 0.34 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:47:TYR:HE1 | 19 | 0.34 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:47:TYR:HE2 | 19 | 0.34 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:47:TYR:HE1 | 19 | 0.34 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:47:TYR:HE2 | 19 | 0.34 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:47:TYR:HE1 | 19 | 0.34 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB3 | 1:A:47:TYR:HB2 | 16 | 0.34 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB1 | 1:A:47:TYR:HB2 | 16 | 0.34 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB2 | 1:A:47:TYR:HB2 | 16 | 0.34 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB3 | 1:A:47:TYR:HB3 | 16 | 0.34 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB1 | 1:A:47:TYR:HB3 | 16 | 0.34 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB2 | 1:A:47:TYR:HB3 | 16 | 0.34 |
| (2,749) | 1:A:96:LYS:HA | 1:A:43:PHE:HD2 | 1 | 0.34 |
| (2,749) | 1:A:96:LYS:HA | 1:A:43:PHE:HD1 | 1 | 0.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB1 | 1:A:97:GLN:HB2 | 5 | 0.34 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB3 | 1:A:97:GLN:HB2 | 5 | 0.34 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB2 | 1:A:97:GLN:HB2 | 5 | 0.34 |
| (2,683) | 1:A:46:GLN:HA | 1:A:47:TYR:H | 9 | 0.34 |
| (2,677) | 1:A:86:LYS:HG2 | 1:A:86:LYS:HA | 16 | 0.34 |
| (2,577) | 1:A:66:LYS:HA | 1:A:66:LYS:HB3 | 8 | 0.34 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD11 | 7 | 0.34 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD12 | 7 | 0.34 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD13 | 7 | 0.34 |
| (2,493) | 1:A:54:LYS:HE2 | 1:A:40:ILE:HG22 | 7 | 0.34 |
| (2,493) | 1:A:54:LYS:HE2 | 1:A:40:ILE:HG21 | 7 | 0.34 |
| (2,493) | 1:A:54:LYS:HE2 | 1:A:40:ILE:HG23 | 7 | 0.34 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG12 | 13 | 0.34 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG11 | 13 | 0.34 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG13 | 13 | 0.34 |
| (2,440) | 1:A:46:GLN:HG2 | 1:A:43:PHE:HD2 | 9 | 0.34 |
| (2,440) | 1:A:46:GLN:HG2 | 1:A:43:PHE:HD1 | 9 | 0.34 |
| (2,399) | 1:A:65:GLN:HG3 | 1:A:61:GLY:HA3 | 7 | 0.34 |
| (2,376) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:36:ILE:HG13 | 2 | 0.34 |
| (2,364) | 1:A:46:GLN:HA | 1:A:46:GLN:HB2 | 5 | 0.34 |
| (2,364) | 1:A:46:GLN:HA | 1:A:46:GLN:HB2 | 14 | 0.34 |
| (2,340) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:57:VAL:HG11 | 7 | 0.34 |
| (2,340) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:57:VAL:HG12 | 7 | 0.34 |
| (2,340) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:57:VAL:HG13 | 7 | 0.34 |
| (2,317) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:74:THR:H | 13 | 0.34 |
| (2,316) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:55:LEU:H | 2 | 0.34 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG13 | 1:A:52:PHE:HB3 | 7 | 0.34 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG12 | 1:A:52:PHE:HB3 | 7 | 0.34 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG11 | 1:A:52:PHE:HB3 | 7 | 0.34 |
| (2,1264) | 1:A:49:GLN:HE21 | 1:A:49:GLN:HB3 | 15 | 0.34 |
| (2,1260) | 1:A:80:ASN:HD21 | 1:A:79:LYS:HB2 | 14 | 0.34 |
| (2,1243) | 1:A:4:GLN:HE21 | 1:A:6:LYS:HB3 | 15 | 0.34 |
| (2,1171) | 1:A:86:LYS:HB2 | 1:A:86:LYS:H | 19 | 0.34 |
| (2,1171) | 1:A:86:LYS:HB2 | 1:A:86:LYS:H | 20 | 0.34 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:43:PHE:HD2 | 7 | 0.34 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:43:PHE:HD1 | 7 | 0.34 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:47:TYR:HD2 | 7 | 0.34 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:47:TYR:HD1 | 7 | 0.34 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:43:PHE:HD2 | 13 | 0.34 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:43:PHE:HD1 | 13 | 0.34 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:47:TYR:HD2 | 13 | 0.34 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:47:TYR:HD1 | 13 | 0.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1023) | 1:A:53:TYR:H | 1:A:53:TYR:HB3 | 2 | 0.34 |
| (2,1023) | 1:A:53:TYR:H | 1:A:53:TYR:HB3 | 7 | 0.34 |
| (2,1023) | 1:A:53:TYR:H | 1:A:53:TYR:HB3 | 14 | 0.34 |
| (2,1023) | 1:A:53:TYR:H | 1:A:53:TYR:HB3 | 15 | 0.34 |
| (2,839) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:31:GLY:HA2 | 6 | 0.33 |
| (2,839) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:31:GLY:HA2 | 11 | 0.33 |
| (2,839) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:31:GLY:HA2 | 15 | 0.33 |
| (2,833) | 1:A:31:GLY:HA3 | 1:A:34:LYS:HB3 | 18 | 0.33 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:47:TYR:HE2 | 3 | 0.33 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:47:TYR:HE1 | 3 | 0.33 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:47:TYR:HE2 | 3 | 0.33 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:47:TYR:HE1 | 3 | 0.33 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:47:TYR:HE2 | 3 | 0.33 |
| (2,771) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:47:TYR:HE1 | 3 | 0.33 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB1 | 1:A:77:LEU:H | 20 | 0.33 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB3 | 1:A:77:LEU:H | 20 | 0.33 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB2 | 1:A:77:LEU:H | 20 | 0.33 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG11 | 18 | 0.33 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG12 | 18 | 0.33 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG13 | 18 | 0.33 |
| (2,577) | 1:A:66:LYS:HA | 1:A:66:LYS:HB3 | 2 | 0.33 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:61:GLY:HA3 | 8 | 0.33 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:61:GLY:HA3 | 8 | 0.33 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:61:GLY:HA3 | 8 | 0.33 |
| (2,493) | 1:A:54:LYS:HE2 | 1:A:40:ILE:HG22 | 6 | 0.33 |
| (2,493) | 1:A:54:LYS:HE2 | 1:A:40:ILE:HG21 | 6 | 0.33 |
| (2,493) | 1:A:54:LYS:HE2 | 1:A:40:ILE:HG23 | 6 | 0.33 |
| (2,446) | 1:A:47:TYR:HA | 1:A:47:TYR:HD2 | 2 | 0.33 |
| (2,446) | 1:A:47:TYR:HA | 1:A:47:TYR:HD1 | 2 | 0.33 |
| (2,399) | 1:A:65:GLN:HG3 | 1:A:61:GLY:HA3 | 2 | 0.33 |
| (2,31) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:39:MET:HB2 | 9 | 0.33 |
| (2,31) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:42:LYS:HB2 | 9 | 0.33 |
| (2,31) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:39:MET:HB2 | 11 | 0.33 |
| (2,31) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:42:LYS:HB2 | 11 | 0.33 |
| (2,31) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:39:MET:HB2 | 17 | 0.33 |
| (2,31) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:42:LYS:HB2 | 17 | 0.33 |
| (2,289) | 1:A:88:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG21 | 2 | 0.33 |
| (2,289) | 1:A:88:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG23 | 2 | 0.33 |
| (2,289) | 1:A:88:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG22 | 2 | 0.33 |
| (2,185) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:10:GLU:H | 12 | 0.33 |
| (2,1055) | 1:A:60:LEU:H | 1:A:59:GLU:HB3 | 10 | 0.33 |
| (2,1048) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:57:VAL:HG11 | 15 | 0.33 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1048) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:57:VAL:HG12 | 15 | 0.33 |
| (2,1048) | 1:A:58:ASP:H | 1:A:57:VAL:HG13 | 15 | 0.33 |
| (2,1023) | 1:A:53:TYR:H | 1:A:53:TYR:HB3 | 1 | 0.33 |
| (2,1023) | 1:A:53:TYR:H | 1:A:53:TYR:HB3 | 3 | 0.33 |
| (2,1023) | 1:A:53:TYR:H | 1:A:53:TYR:HB3 | 9 | 0.33 |
| (2,1023) | 1:A:53:TYR:H | 1:A:53:TYR:HB3 | 10 | 0.33 |
| (2,1023) | 1:A:53:TYR:H | 1:A:53:TYR:HB3 | 16 | 0.33 |
| (2,1023) | 1:A:53:TYR:H | 1:A:53:TYR:HB3 | 20 | 0.33 |
| (2,994) | 1:A:44:SER:H | 1:A:44:SER:HB3 | 17 | 0.32 |
| (2,990) | 1:A:42:LYS:HB2 | 1:A:43:PHE:H | 12 | 0.32 |
| (2,958) | 1:A:26:TYR:H | 1:A:57:VAL:HG23 | 9 | 0.32 |
| (2,958) | 1:A:26:TYR:H | 1:A:57:VAL:HG21 | 9 | 0.32 |
| (2,958) | 1:A:26:TYR:H | 1:A:57:VAL:HG22 | 9 | 0.32 |
| (2,958) | 1:A:26:TYR:H | 1:A:57:VAL:HG23 | 15 | 0.32 |
| (2,958) | 1:A:26:TYR:H | 1:A:57:VAL:HG21 | 15 | 0.32 |
| (2,958) | 1:A:26:TYR:H | 1:A:57:VAL:HG22 | 15 | 0.32 |
| (2,928) | 1:A:19:LYS:H | 1:A:18:ASP:HB2 | 1 | 0.32 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:57:VAL:H | 18 | 0.32 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:57:VAL:H | 18 | 0.32 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:57:VAL:H | 18 | 0.32 |
| (2,847) | 1:A:3:THR:H | 1:A:53:TYR:HB2 | 20 | 0.32 |
| (2,839) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:31:GLY:HA2 | 2 | 0.32 |
| (2,775) | 1:A:99:ILE:HG21 | 1:A:96:LYS:HD2 | 11 | 0.32 |
| (2,775) | 1:A:99:ILE:HG22 | 1:A:96:LYS:HD2 | 11 | 0.32 |
| (2,775) | 1:A:99:ILE:HG23 | 1:A:96:LYS:HD2 | 11 | 0.32 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB1 | 1:A:77:LEU:H | 14 | 0.32 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB3 | 1:A:77:LEU:H | 14 | 0.32 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB2 | 1:A:77:LEU:H | 14 | 0.32 |
| (2,749) | 1:A:96:LYS:HA | 1:A:43:PHE:HD2 | 15 | 0.32 |
| (2,749) | 1:A:96:LYS:HA | 1:A:43:PHE:HD1 | 15 | 0.32 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB1 | 11 | 0.32 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB2 | 11 | 0.32 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB3 | 11 | 0.32 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD11 | 1 | 0.32 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD13 | 1 | 0.32 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD12 | 1 | 0.32 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD11 | 3 | 0.32 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD13 | 3 | 0.32 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD12 | 3 | 0.32 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD11 | 10 | 0.32 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD13 | 10 | 0.32 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD12 | 10 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD11 | 12 | 0.32 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD13 | 12 | 0.32 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD12 | 12 | 0.32 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD11 | 14 | 0.32 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD13 | 14 | 0.32 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD12 | 14 | 0.32 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD11 | 15 | 0.32 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD13 | 15 | 0.32 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD12 | 15 | 0.32 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD11 | 16 | 0.32 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD13 | 16 | 0.32 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD12 | 16 | 0.32 |
| (2,606) | 1:A:70:SER:HA | 1:A:70:SER:HB3 | 16 | 0.32 |
| (2,606) | 1:A:70:SER:HA | 1:A:70:SER:HB3 | 20 | 0.32 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:61:GLY:HA3 | 2 | 0.32 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:61:GLY:HA3 | 2 | 0.32 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:61:GLY:HA3 | 2 | 0.32 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD11 | 5 | 0.32 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD12 | 5 | 0.32 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD13 | 5 | 0.32 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD11 | 9 | 0.32 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD12 | 9 | 0.32 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD13 | 9 | 0.32 |
| (2,364) | 1:A:46:GLN:HA | 1:A:46:GLN:HB2 | 12 | 0.32 |
| (2,31) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:39:MET:HB2 | 7 | 0.32 |
| (2,31) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:42:LYS:HB2 | 7 | 0.32 |
| (2,293) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:15:ILE:H | 20 | 0.32 |
| (2,293) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:15:ILE:H | 20 | 0.32 |
| (2,293) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:15:ILE:H | 20 | 0.32 |
| (2,1259) | 1:A:80:ASN:HD22 | 1:A:79:LYS:HB3 | 5 | 0.32 |
| (2,1243) | 1:A:4:GLN:HE21 | 1:A:6:LYS:HB3 | 20 | 0.32 |
| (2,1171) | 1:A:86:LYS:HB2 | 1:A:86:LYS:H | 13 | 0.32 |
| (2,1029) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:53:TYR:HB2 | 1 | 0.32 |
| (2,836) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:31:GLY:HA2 | 16 | 0.31 |
| (2,794) | 1:A:26:TYR:HA | 1:A:26:TYR:HD2 | 3 | 0.31 |
| (2,794) | 1:A:26:TYR:HA | 1:A:26:TYR:HD1 | 3 | 0.31 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB3 | 1:A:47:TYR:HB2 | 9 | 0.31 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB1 | 1:A:47:TYR:HB2 | 9 | 0.31 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB2 | 1:A:47:TYR:HB2 | 9 | 0.31 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB3 | 1:A:47:TYR:HB3 | 9 | 0.31 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB1 | 1:A:47:TYR:HB3 | 9 | 0.31 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB2 | 1:A:47:TYR:HB3 | 9 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,754) | 1:A:98:ALA:HA | 1:A:102:ASN:H | 1 | 0.31 |
| (2,754) | 1:A:98:ALA:HA | 1:A:102:ASN:H | 16 | 0.31 |
| (2,683) | 1:A:46:GLN:HA | 1:A:47:TYR:H | 1 | 0.31 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD11 | 2 | 0.31 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD13 | 2 | 0.31 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD12 | 2 | 0.31 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD11 | 5 | 0.31 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD13 | 5 | 0.31 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD12 | 5 | 0.31 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD11 | 6 | 0.31 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD13 | 6 | 0.31 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD12 | 6 | 0.31 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD11 | 8 | 0.31 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD13 | 8 | 0.31 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD12 | 8 | 0.31 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD11 | 9 | 0.31 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD13 | 9 | 0.31 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD12 | 9 | 0.31 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD11 | 11 | 0.31 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD13 | 11 | 0.31 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD12 | 11 | 0.31 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD11 | 13 | 0.31 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD13 | 13 | 0.31 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD12 | 13 | 0.31 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD11 | 18 | 0.31 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD13 | 18 | 0.31 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD12 | 18 | 0.31 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD11 | 20 | 0.31 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD13 | 20 | 0.31 |
| (2,626) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:75:LEU:HD12 | 20 | 0.31 |
| (2,607) | 1:A:70:SER:HA | 1:A:70:SER:HB2 | 19 | 0.31 |
| (2,606) | 1:A:70:SER:HA | 1:A:70:SER:HB3 | 11 | 0.31 |
| (2,529) | 1:A:58:ASP:HB2 | 1:A:59:GLU:H | 16 | 0.31 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG12 | 1 | 0.31 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG11 | 1 | 0.31 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG13 | 1 | 0.31 |
| (2,441) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:43:PHE:H | 16 | 0.31 |
| (2,364) | 1:A:46:GLN:HA | 1:A:46:GLN:HB2 | 17 | 0.31 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB3 | 5 | 0.31 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB1 | 5 | 0.31 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB2 | 5 | 0.31 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB3 | 17 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB1 | 17 | 0.31 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB2 | 17 | 0.31 |
| (2,316) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:55:LEU:H | 3 | 0.31 |
| (2,316) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:55:LEU:H | 18 | 0.31 |
| (2,31) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:39:MET:HB2 | 2 | 0.31 |
| (2,31) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:42:LYS:HB2 | 2 | 0.31 |
| (2,31) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:39:MET:HB2 | 3 | 0.31 |
| (2,31) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:42:LYS:HB2 | 3 | 0.31 |
| (2,31) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:39:MET:HB2 | 5 | 0.31 |
| (2,31) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:42:LYS:HB2 | 5 | 0.31 |
| (2,31) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:39:MET:HB2 | 10 | 0.31 |
| (2,31) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:42:LYS:HB2 | 10 | 0.31 |
| (2,273) | 1:A:19:LYS:HG2 | 1:A:19:LYS:H | 18 | 0.31 |
| (2,270) | 1:A:19:LYS:HA | 1:A:19:LYS:HE3 | 16 | 0.31 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD13 | 16 | 0.31 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD11 | 16 | 0.31 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD12 | 16 | 0.31 |
| (2,185) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:10:GLU:H | 20 | 0.31 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG11 | 16 | 0.31 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG12 | 16 | 0.31 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG13 | 16 | 0.31 |
| (2,1174) | 1:A:87:VAL:H | 1:A:86:LYS:HG2 | 5 | 0.31 |
| (2,1171) | 1:A:86:LYS:HB2 | 1:A:86:LYS:H | 10 | 0.31 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:43:PHE:HD2 | 10 | 0.31 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:43:PHE:HD1 | 10 | 0.31 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:47:TYR:HD2 | 10 | 0.31 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:47:TYR:HD1 | 10 | 0.31 |
| (2,1029) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:53:TYR:HB2 | 2 | 0.31 |
| (2,1023) | 1:A:53:TYR:H | 1:A:53:TYR:HB3 | 4 | 0.31 |
| (2,1023) | 1:A:53:TYR:H | 1:A:53:TYR:HB3 | 5 | 0.31 |
| (2,1023) | 1:A:53:TYR:H | 1:A:53:TYR:HB3 | 6 | 0.31 |
| (2,1023) | 1:A:53:TYR:H | 1:A:53:TYR:HB3 | 11 | 0.31 |
| (2,1023) | 1:A:53:TYR:H | 1:A:53:TYR:HB3 | 19 | 0.31 |
| (2,1009) | 1:A:49:GLN:H | 1:A:49:GLN:HG3 | 6 | 0.31 |
| (2,990) | 1:A:42:LYS:HB2 | 1:A:43:PHE:H | 6 | 0.3 |
| (2,847) | 1:A:3:THR:H | 1:A:53:TYR:HB2 | 1 | 0.3 |
| (2,839) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:31:GLY:HA2 | 4 | 0.3 |
| (2,839) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:31:GLY:HA2 | 14 | 0.3 |
| (2,836) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:31:GLY:HA2 | 1 | 0.3 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG21 | 1:A:92:PRO:HG2 | 16 | 0.3 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG23 | 1:A:92:PRO:HG2 | 16 | 0.3 |
| (2,807) | 1:A:36:ILE:HG22 | 1:A:92:PRO:HG2 | 16 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,775) | 1:A:99:ILE:HG21 | 1:A:96:LYS:HD2 | 3 | 0.3 |
| (2,775) | 1:A:99:ILE:HG22 | 1:A:96:LYS:HD2 | 3 | 0.3 |
| (2,775) | 1:A:99:ILE:HG23 | 1:A:96:LYS:HD2 | 3 | 0.3 |
| (2,775) | 1:A:99:ILE:HG21 | 1:A:96:LYS:HD2 | 8 | 0.3 |
| (2,775) | 1:A:99:ILE:HG22 | 1:A:96:LYS:HD2 | 8 | 0.3 |
| (2,775) | 1:A:99:ILE:HG23 | 1:A:96:LYS:HD2 | 8 | 0.3 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG21 | 9 | 0.3 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG22 | 9 | 0.3 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG23 | 9 | 0.3 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG21 | 9 | 0.3 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG22 | 9 | 0.3 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG23 | 9 | 0.3 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG21 | 9 | 0.3 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG22 | 9 | 0.3 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG23 | 9 | 0.3 |
| (2,577) | 1:A:66:LYS:HA | 1:A:66:LYS:HB3 | 19 | 0.3 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:61:GLY:HA3 | 12 | 0.3 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:61:GLY:HA3 | 12 | 0.3 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:61:GLY:HA3 | 12 | 0.3 |
| (2,461) | 1:A:51:ASP:HA | 1:A:47:TYR:HD2 | 13 | 0.3 |
| (2,461) | 1:A:51:ASP:HA | 1:A:47:TYR:HD1 | 13 | 0.3 |
| (2,399) | 1:A:65:GLN:HG3 | 1:A:61:GLY:HA3 | 20 | 0.3 |
| (2,384) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:54:LYS:HD2 | 2 | 0.3 |
| (2,384) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:54:LYS:HD2 | 2 | 0.3 |
| (2,384) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:54:LYS:HD2 | 2 | 0.3 |
| (2,376) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:36:ILE:HG13 | 3 | 0.3 |
| (2,376) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:36:ILE:HG13 | 5 | 0.3 |
| (2,376) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:36:ILE:HG13 | 6 | 0.3 |
| (2,376) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:36:ILE:HG13 | 19 | 0.3 |
| (2,351) | 1:A:28:THR:HB | 1:A:28:THR:HA | 7 | 0.3 |
| (2,31) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:39:MET:HB2 | 13 | 0.3 |
| (2,31) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:42:LYS:HB2 | 13 | 0.3 |
| (2,31) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:39:MET:HB2 | 16 | 0.3 |
| (2,31) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:42:LYS:HB2 | 16 | 0.3 |
| (2,31) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:39:MET:HB2 | 20 | 0.3 |
| (2,31) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:42:LYS:HB2 | 20 | 0.3 |
| (2,270) | 1:A:19:LYS:HA | 1:A:19:LYS:HE3 | 20 | 0.3 |
| (2,185) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:10:GLU:H | 1 | 0.3 |
| (2,185) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:10:GLU:H | 4 | 0.3 |
| (2,185) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:10:GLU:H | 6 | 0.3 |
| (2,185) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:10:GLU:H | 11 | 0.3 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB1 | 19 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB3 | 19 | 0.3 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB2 | 19 | 0.3 |
| (2,1260) | 1:A:80:ASN:HD21 | 1:A:79:LYS:HB2 | 8 | 0.3 |
| (2,1174) | 1:A:87:VAL:H | 1:A:86:LYS:HG2 | 7 | 0.3 |
| (2,1055) | 1:A:60:LEU:H | 1:A:59:GLU:HB3 | 13 | 0.3 |
| (2,1023) | 1:A:53:TYR:H | 1:A:53:TYR:HB3 | 8 | 0.3 |
| (1,14) | 1:A:39:MET:H | 1:A:35:MET:O | 1 | 0.3 |
| (1,14) | 1:A:39:MET:H | 1:A:35:MET:O | 20 | 0.3 |
| (2,861) | 1:A:5:PHE:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 3 | 0.29 |
| (2,861) | 1:A:5:PHE:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 3 | 0.29 |
| (2,861) | 1:A:5:PHE:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 3 | 0.29 |
| (2,839) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:31:GLY:HA2 | 3 | 0.29 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB1 | 1:A:77:LEU:H | 3 | 0.29 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB3 | 1:A:77:LEU:H | 3 | 0.29 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB2 | 1:A:77:LEU:H | 3 | 0.29 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB1 | 1:A:77:LEU:H | 5 | 0.29 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB3 | 1:A:77:LEU:H | 5 | 0.29 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB2 | 1:A:77:LEU:H | 5 | 0.29 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB1 | 1:A:77:LEU:H | 8 | 0.29 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB3 | 1:A:77:LEU:H | 8 | 0.29 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB2 | 1:A:77:LEU:H | 8 | 0.29 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB1 | 4 | 0.29 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB2 | 4 | 0.29 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB3 | 4 | 0.29 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB1 | 12 | 0.29 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB2 | 12 | 0.29 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB3 | 12 | 0.29 |
| (2,684) | 1:A:83:GLU:HB3 | 1:A:83:GLU:H | 7 | 0.29 |
| (2,684) | 1:A:83:GLU:HB3 | 1:A:83:GLU:H | 13 | 0.29 |
| (2,679) | 1:A:82:LYS:HB3 | 1:A:83:GLU:H | 1 | 0.29 |
| (2,59) | 1:A:86:LYS:HG2 | 1:A:86:LYS:HA | 7 | 0.29 |
| (2,59) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:75:LEU:HD11 | 7 | 0.29 |
| (2,59) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:75:LEU:HD13 | 7 | 0.29 |
| (2,59) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:75:LEU:HD12 | 7 | 0.29 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD11 | 1 | 0.29 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD12 | 1 | 0.29 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD13 | 1 | 0.29 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD11 | 17 | 0.29 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD12 | 17 | 0.29 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD13 | 17 | 0.29 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD11 | 19 | 0.29 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD12 | 19 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD13 | 19 | 0.29 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG12 | 5 | 0.29 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG11 | 5 | 0.29 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG13 | 5 | 0.29 |
| (2,409) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:40:ILE:H | 13 | 0.29 |
| (2,409) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:40:ILE:H | 13 | 0.29 |
| (2,409) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:40:ILE:H | 13 | 0.29 |
| (2,407) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:54:LYS:HD2 | 19 | 0.29 |
| (2,407) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:54:LYS:HD2 | 19 | 0.29 |
| (2,407) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:54:LYS:HD2 | 19 | 0.29 |
| (2,384) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:54:LYS:HD2 | 5 | 0.29 |
| (2,384) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:54:LYS:HD2 | 5 | 0.29 |
| (2,384) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:54:LYS:HD2 | 5 | 0.29 |
| (2,37) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:42:LYS:HG2 | 7 | 0.29 |
| (2,37) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:42:LYS:HG3 | 7 | 0.29 |
| (2,364) | 1:A:46:GLN:HA | 1:A:46:GLN:HB2 | 3 | 0.29 |
| (2,364) | 1:A:46:GLN:HA | 1:A:46:GLN:HB2 | 6 | 0.29 |
| (2,364) | 1:A:46:GLN:HA | 1:A:46:GLN:HB2 | 8 | 0.29 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB3 | 6 | 0.29 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB1 | 6 | 0.29 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB2 | 6 | 0.29 |
| (2,351) | 1:A:28:THR:HB | 1:A:28:THR:HA | 11 | 0.29 |
| (2,351) | 1:A:28:THR:HB | 1:A:28:THR:HA | 16 | 0.29 |
| (2,340) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:57:VAL:HG11 | 9 | 0.29 |
| (2,340) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:57:VAL:HG12 | 9 | 0.29 |
| (2,340) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:57:VAL:HG13 | 9 | 0.29 |
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:75:LEU:HD11 | 4 | 0.29 |
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:75:LEU:HD13 | 4 | 0.29 |
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:75:LEU:HD12 | 4 | 0.29 |
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:75:LEU:HD11 | 4 | 0.29 |
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:75:LEU:HD13 | 4 | 0.29 |
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:75:LEU:HD12 | 4 | 0.29 |
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:75:LEU:HD11 | 4 | 0.29 |
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:75:LEU:HD13 | 4 | 0.29 |
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:75:LEU:HD12 | 4 | 0.29 |
| (2,31) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:39:MET:HB2 | 4 | 0.29 |
| (2,31) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:42:LYS:HB2 | 4 | 0.29 |
| (2,185) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:10:GLU:H | 5 | 0.29 |
| (2,185) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:10:GLU:H | 7 | 0.29 |
| (2,185) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:10:GLU:H | 18 | 0.29 |
| (2,155) | 1:A:2:VAL:HB | 1:A:44:SER:HB2 | 9 | 0.29 |
| (2,1260) | 1:A:80:ASN:HD21 | 1:A:79:LYS:HB2 | 7 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG11 | 3 | 0.29 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG12 | 3 | 0.29 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG13 | 3 | 0.29 |
| (2,1174) | 1:A:87:VAL:H | 1:A:86:LYS:HG2 | 8 | 0.29 |
| (2,1171) | 1:A:86:LYS:HB2 | 1:A:86:LYS:H | 17 | 0.29 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:43:PHE:HD2 | 1 | 0.29 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:43:PHE:HD1 | 1 | 0.29 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:47:TYR:HD2 | 1 | 0.29 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:47:TYR:HD1 | 1 | 0.29 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:43:PHE:HD2 | 2 | 0.29 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:43:PHE:HD1 | 2 | 0.29 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:47:TYR:HD2 | 2 | 0.29 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:47:TYR:HD1 | 2 | 0.29 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:43:PHE:HD2 | 14 | 0.29 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:43:PHE:HD1 | 14 | 0.29 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:47:TYR:HD2 | 14 | 0.29 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:47:TYR:HD1 | 14 | 0.29 |
| (2,1055) | 1:A:60:LEU:H | 1:A:59:GLU:HB3 | 4 | 0.29 |
| (2,1055) | 1:A:60:LEU:H | 1:A:59:GLU:HB3 | 12 | 0.29 |
| (2,1055) | 1:A:60:LEU:H | 1:A:59:GLU:HB3 | 17 | 0.29 |
| (2,1023) | 1:A:53:TYR:H | 1:A:53:TYR:HB3 | 12 | 0.29 |
| (2,1023) | 1:A:53:TYR:H | 1:A:53:TYR:HB3 | 13 | 0.29 |
| (2,1013) | 1:A:51:ASP:H | 1:A:51:ASP:HB3 | 1 | 0.29 |
| (1,14) | 1:A:39:MET:H | 1:A:35:MET:O | 13 | 0.29 |
| (2,994) | 1:A:44:SER:H | 1:A:44:SER:HB3 | 13 | 0.28 |
| (2,873) | 1:A:7:THR:H | 1:A:5:PHE:HB2 | 11 | 0.28 |
| (2,873) | 1:A:7:THR:H | 1:A:5:PHE:HB2 | 19 | 0.28 |
| (2,847) | 1:A:3:THR:H | 1:A:53:TYR:HB2 | 15 | 0.28 |
| (2,839) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:31:GLY:HA2 | 5 | 0.28 |
| (2,839) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:31:GLY:HA2 | 8 | 0.28 |
| (2,825) | 1:A:54:LYS:HB2 | 1:A:26:TYR:HB2 | 2 | 0.28 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB3 | 1:A:47:TYR:HB2 | 10 | 0.28 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB1 | 1:A:47:TYR:HB2 | 10 | 0.28 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB2 | 1:A:47:TYR:HB2 | 10 | 0.28 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB3 | 1:A:47:TYR:HB3 | 10 | 0.28 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB1 | 1:A:47:TYR:HB3 | 10 | 0.28 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB2 | 1:A:47:TYR:HB3 | 10 | 0.28 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB1 | 1:A:77:LEU:H | 7 | 0.28 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB3 | 1:A:77:LEU:H | 7 | 0.28 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB2 | 1:A:77:LEU:H | 7 | 0.28 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB1 | 1:A:77:LEU:H | 17 | 0.28 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB3 | 1:A:77:LEU:H | 17 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB2 | 1:A:77:LEU:H | 17 | 0.28 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB1 | 1:A:77:LEU:H | 18 | 0.28 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB3 | 1:A:77:LEU:H | 18 | 0.28 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB2 | 1:A:77:LEU:H | 18 | 0.28 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB1 | 1:A:77:LEU:H | 19 | 0.28 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB3 | 1:A:77:LEU:H | 19 | 0.28 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB2 | 1:A:77:LEU:H | 19 | 0.28 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG21 | 11 | 0.28 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG22 | 11 | 0.28 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG23 | 11 | 0.28 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG21 | 11 | 0.28 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG22 | 11 | 0.28 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG23 | 11 | 0.28 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG21 | 11 | 0.28 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG22 | 11 | 0.28 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG23 | 11 | 0.28 |
| (2,740) | 1:A:95:ILE:HB | 1:A:96:LYS:H | 7 | 0.28 |
| (2,740) | 1:A:95:ILE:HB | 1:A:96:LYS:H | 17 | 0.28 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB1 | 1:A:97:GLN:HB2 | 7 | 0.28 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB3 | 1:A:97:GLN:HB2 | 7 | 0.28 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB2 | 1:A:97:GLN:HB2 | 7 | 0.28 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB1 | 2 | 0.28 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB2 | 2 | 0.28 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB3 | 2 | 0.28 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB1 | 17 | 0.28 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB2 | 17 | 0.28 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB3 | 17 | 0.28 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB1 | 19 | 0.28 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB2 | 19 | 0.28 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB3 | 19 | 0.28 |
| (2,583) | 1:A:66:LYS:HE2 | 1:A:8:ALA:HB1 | 4 | 0.28 |
| (2,583) | 1:A:66:LYS:HE2 | 1:A:8:ALA:HB2 | 4 | 0.28 |
| (2,583) | 1:A:66:LYS:HE2 | 1:A:8:ALA:HB3 | 4 | 0.28 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD11 | 4 | 0.28 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD12 | 4 | 0.28 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD13 | 4 | 0.28 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD11 | 11 | 0.28 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD12 | 11 | 0.28 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD13 | 11 | 0.28 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD11 | 13 | 0.28 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD12 | 13 | 0.28 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD13 | 13 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,446) | 1:A:47:TYR:HA | 1:A:47:TYR:HD2 | 8 | 0.28 |
| (2,446) | 1:A:47:TYR:HA | 1:A:47:TYR:HD1 | 8 | 0.28 |
| (2,410) | 1:A:40:ILE:HG22 | 1:A:2:VAL:HG13 | 8 | 0.28 |
| (2,410) | 1:A:40:ILE:HG22 | 1:A:2:VAL:HG12 | 8 | 0.28 |
| (2,410) | 1:A:40:ILE:HG22 | 1:A:2:VAL:HG11 | 8 | 0.28 |
| (2,410) | 1:A:40:ILE:HG21 | 1:A:2:VAL:HG13 | 8 | 0.28 |
| (2,410) | 1:A:40:ILE:HG21 | 1:A:2:VAL:HG12 | 8 | 0.28 |
| (2,410) | 1:A:40:ILE:HG21 | 1:A:2:VAL:HG11 | 8 | 0.28 |
| (2,410) | 1:A:40:ILE:HG23 | 1:A:2:VAL:HG13 | 8 | 0.28 |
| (2,410) | 1:A:40:ILE:HG23 | 1:A:2:VAL:HG12 | 8 | 0.28 |
| (2,410) | 1:A:40:ILE:HG23 | 1:A:2:VAL:HG11 | 8 | 0.28 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:92:PRO:HA | 18 | 0.28 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:92:PRO:HA | 18 | 0.28 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:92:PRO:HA | 18 | 0.28 |
| (2,376) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:36:ILE:HG13 | 17 | 0.28 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB3 | 8 | 0.28 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB1 | 8 | 0.28 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB2 | 8 | 0.28 |
| (2,357) | 1:A:29:TRP:HA | 1:A:29:TRP:HD1 | 11 | 0.28 |
| (2,31) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:39:MET:HB2 | 19 | 0.28 |
| (2,31) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:42:LYS:HB2 | 19 | 0.28 |
| (2,270) | 1:A:19:LYS:HA | 1:A:19:LYS:HE3 | 7 | 0.28 |
| (2,197) | 1:A:9:SER:HA | 1:A:12:ASP:HB2 | 13 | 0.28 |
| (2,197) | 1:A:9:SER:HA | 1:A:12:ASP:HB2 | 16 | 0.28 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD13 | 6 | 0.28 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD11 | 6 | 0.28 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD12 | 6 | 0.28 |
| (2,185) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:10:GLU:H | 2 | 0.28 |
| (2,185) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:10:GLU:H | 8 | 0.28 |
| (2,185) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:10:GLU:H | 16 | 0.28 |
| (2,185) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:10:GLU:H | 19 | 0.28 |
| (2,1013) | 1:A:51:ASP:H | 1:A:51:ASP:HB3 | 2 | 0.28 |
| (2,1013) | 1:A:51:ASP:H | 1:A:51:ASP:HB3 | 18 | 0.28 |
| (2,1002) | 1:A:47:TYR:H | 1:A:44:SER:H | 17 | 0.28 |
| (2,1002) | 1:A:47:TYR:H | 1:A:44:SER:H | 18 | 0.28 |
| (1,22) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:41:GLU:O | 2 | 0.28 |
| (1,22) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:41:GLU:O | 20 | 0.28 |
| (1,14) | 1:A:39:MET:H | 1:A:35:MET:O | 4 | 0.28 |
| (1,14) | 1:A:39:MET:H | 1:A:35:MET:O | 8 | 0.28 |
| (2,928) | 1:A:19:LYS:H | 1:A:18:ASP:HB2 | 3 | 0.27 |
| (2,873) | 1:A:7:THR:H | 1:A:5:PHE:HB2 | 20 | 0.27 |
| (2,839) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:31:GLY:HA2 | 9 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,775) | 1:A:99:ILE:HG21 | 1:A:96:LYS:HD2 | 13 | 0.27 |
| (2,775) | 1:A:99:ILE:HG22 | 1:A:96:LYS:HD2 | 13 | 0.27 |
| (2,775) | 1:A:99:ILE:HG23 | 1:A:96:LYS:HD2 | 13 | 0.27 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB3 | 1:A:47:TYR:HB2 | 14 | 0.27 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB1 | 1:A:47:TYR:HB2 | 14 | 0.27 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB2 | 1:A:47:TYR:HB2 | 14 | 0.27 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB3 | 1:A:47:TYR:HB3 | 14 | 0.27 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB1 | 1:A:47:TYR:HB3 | 14 | 0.27 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB2 | 1:A:47:TYR:HB3 | 14 | 0.27 |
| (2,766) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:96:LYS:HD2 | 12 | 0.27 |
| (2,766) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:96:LYS:HD2 | 19 | 0.27 |
| (2,754) | 1:A:98:ALA:HA | 1:A:102:ASN:H | 10 | 0.27 |
| (2,740) | 1:A:95:ILE:HB | 1:A:96:LYS:H | 2 | 0.27 |
| (2,740) | 1:A:95:ILE:HB | 1:A:96:LYS:H | 3 | 0.27 |
| (2,740) | 1:A:95:ILE:HB | 1:A:96:LYS:H | 8 | 0.27 |
| (2,740) | 1:A:95:ILE:HB | 1:A:96:LYS:H | 12 | 0.27 |
| (2,740) | 1:A:95:ILE:HB | 1:A:96:LYS:H | 19 | 0.27 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB1 | 8 | 0.27 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB2 | 8 | 0.27 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB3 | 8 | 0.27 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB1 | 14 | 0.27 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB2 | 14 | 0.27 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB3 | 14 | 0.27 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB1 | 15 | 0.27 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB2 | 15 | 0.27 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB3 | 15 | 0.27 |
| (2,684) | 1:A:83:GLU:HB3 | 1:A:83:GLU:H | 12 | 0.27 |
| (2,676) | 1:A:86:LYS:HB3 | 1:A:86:LYS:HA | 4 | 0.27 |
| (2,676) | 1:A:86:LYS:HB3 | 1:A:86:LYS:HA | 10 | 0.27 |
| (2,676) | 1:A:86:LYS:HB3 | 1:A:86:LYS:HA | 13 | 0.27 |
| (2,676) | 1:A:86:LYS:HB3 | 1:A:86:LYS:HA | 17 | 0.27 |
| (2,676) | 1:A:86:LYS:HB3 | 1:A:86:LYS:HA | 19 | 0.27 |
| (2,676) | 1:A:86:LYS:HB3 | 1:A:86:LYS:HA | 20 | 0.27 |
| (2,67) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG11 | 4 | 0.27 |
| (2,67) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG12 | 4 | 0.27 |
| (2,67) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG13 | 4 | 0.27 |
| (2,67) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:77:LEU:HG | 4 | 0.27 |
| (2,67) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:77:LEU:HG | 4 | 0.27 |
| (2,67) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:77:LEU:HG | 4 | 0.27 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG11 | 5 | 0.27 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG12 | 5 | 0.27 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG13 | 5 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG11 | 20 | 0.27 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG13 | 20 | 0.27 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG12 | 20 | 0.27 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG11 | 20 | 0.27 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG13 | 20 | 0.27 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG12 | 20 | 0.27 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG11 | 20 | 0.27 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG13 | 20 | 0.27 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG12 | 20 | 0.27 |
| (2,576) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:THR:HA | 3 | 0.27 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:61:GLY:HA3 | 6 | 0.27 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:61:GLY:HA3 | 6 | 0.27 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:61:GLY:HA3 | 6 | 0.27 |
| (2,420) | 1:A:42:LYS:HA | 1:A:44:SER:H | 4 | 0.27 |
| (2,409) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:40:ILE:H | 4 | 0.27 |
| (2,409) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:40:ILE:H | 4 | 0.27 |
| (2,409) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:40:ILE:H | 4 | 0.27 |
| (2,409) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:40:ILE:H | 10 | 0.27 |
| (2,409) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:40:ILE:H | 10 | 0.27 |
| (2,409) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:40:ILE:H | 10 | 0.27 |
| (2,409) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:40:ILE:H | 11 | 0.27 |
| (2,409) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:40:ILE:H | 11 | 0.27 |
| (2,409) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:40:ILE:H | 11 | 0.27 |
| (2,401) | 1:A:40:ILE:HA | 1:A:43:PHE:HB3 | 1 | 0.27 |
| (2,401) | 1:A:40:ILE:HA | 1:A:43:PHE:HB3 | 9 | 0.27 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ALA:HB3 | 10 | 0.27 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ALA:HB1 | 10 | 0.27 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ALA:HB2 | 10 | 0.27 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ALA:HB3 | 10 | 0.27 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ALA:HB1 | 10 | 0.27 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ALA:HB2 | 10 | 0.27 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ALA:HB3 | 10 | 0.27 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ALA:HB1 | 10 | 0.27 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ALA:HB2 | 10 | 0.27 |
| (2,376) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:36:ILE:HG13 | 1 | 0.27 |
| (2,376) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:36:ILE:HG13 | 9 | 0.27 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB3 | 1 | 0.27 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB1 | 1 | 0.27 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB2 | 1 | 0.27 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB3 | 2 | 0.27 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB1 | 2 | 0.27 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB2 | 2 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,31) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:39:MET:HB2 | 6 | 0.27 |
| (2,31) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:42:LYS:HB2 | 6 | 0.27 |
| (2,31) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:39:MET:HB2 | 8 | 0.27 |
| (2,31) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:42:LYS:HB2 | 8 | 0.27 |
| (2,270) | 1:A:19:LYS:HA | 1:A:19:LYS:HE3 | 1 | 0.27 |
| (2,270) | 1:A:19:LYS:HA | 1:A:19:LYS:HE3 | 5 | 0.27 |
| (2,270) | 1:A:19:LYS:HA | 1:A:19:LYS:HE3 | 10 | 0.27 |
| (2,197) | 1:A:9:SER:HA | 1:A:12:ASP:HB2 | 8 | 0.27 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD13 | 3 | 0.27 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD11 | 3 | 0.27 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD12 | 3 | 0.27 |
| (2,185) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:10:GLU:H | 3 | 0.27 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG13 | 1:A:52:PHE:HB3 | 11 | 0.27 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG12 | 1:A:52:PHE:HB3 | 11 | 0.27 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG11 | 1:A:52:PHE:HB3 | 11 | 0.27 |
| (2,155) | 1:A:2:VAL:HB | 1:A:44:SER:HB2 | 10 | 0.27 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG11 | 13 | 0.27 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG12 | 13 | 0.27 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG13 | 13 | 0.27 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG11 | 14 | 0.27 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG12 | 14 | 0.27 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG13 | 14 | 0.27 |
| (2,1199) | 1:A:97:GLN:H | 1:A:96:LYS:HB3 | 18 | 0.27 |
| (2,1174) | 1:A:87:VAL:H | 1:A:86:LYS:HG2 | 9 | 0.27 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:43:PHE:HD2 | 9 | 0.27 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:43:PHE:HD1 | 9 | 0.27 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:47:TYR:HD2 | 9 | 0.27 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:47:TYR:HD1 | 9 | 0.27 |
| (2,1055) | 1:A:60:LEU:H | 1:A:59:GLU:HB3 | 19 | 0.27 |
| (2,1029) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:53:TYR:HB2 | 18 | 0.27 |
| (2,1002) | 1:A:47:TYR:H | 1:A:44:SER:H | 3 | 0.27 |
| (2,1002) | 1:A:47:TYR:H | 1:A:44:SER:H | 19 | 0.27 |
| (1,14) | 1:A:39:MET:H | 1:A:35:MET:O | 14 | 0.27 |
| (1,14) | 1:A:39:MET:H | 1:A:35:MET:O | 17 | 0.27 |
| (2,928) | 1:A:19:LYS:H | 1:A:18:ASP:HB2 | 11 | 0.26 |
| (2,927) | 1:A:19:LYS:H | 1:A:80:ASN:H | 2 | 0.26 |
| (2,839) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:31:GLY:HA2 | 17 | 0.26 |
| (2,827) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:54:LYS:HD2 | 8 | 0.26 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB3 | 1:A:47:TYR:HB2 | 1 | 0.26 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB1 | 1:A:47:TYR:HB2 | 1 | 0.26 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB2 | 1:A:47:TYR:HB2 | 1 | 0.26 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB3 | 1:A:47:TYR:HB3 | 1 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB1 | 1:A:47:TYR:HB3 | 1 | 0.26 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB2 | 1:A:47:TYR:HB3 | 1 | 0.26 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB1 | 1:A:77:LEU:H | 13 | 0.26 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB3 | 1:A:77:LEU:H | 13 | 0.26 |
| (2,761) | 1:A:98:ALA:HB2 | 1:A:77:LEU:H | 13 | 0.26 |
| (2,754) | 1:A:98:ALA:HA | 1:A:102:ASN:H | 11 | 0.26 |
| (2,754) | 1:A:98:ALA:HA | 1:A:102:ASN:H | 15 | 0.26 |
| (2,753) | 1:A:98:ALA:HA | 1:A:99:ILE:H | 3 | 0.26 |
| (2,753) | 1:A:98:ALA:HA | 1:A:99:ILE:H | 19 | 0.26 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG21 | 16 | 0.26 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG22 | 16 | 0.26 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG23 | 16 | 0.26 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG21 | 16 | 0.26 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG22 | 16 | 0.26 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG23 | 16 | 0.26 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG21 | 16 | 0.26 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG22 | 16 | 0.26 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG23 | 16 | 0.26 |
| (2,740) | 1:A:95:ILE:HB | 1:A:96:LYS:H | 6 | 0.26 |
| (2,740) | 1:A:95:ILE:HB | 1:A:96:LYS:H | 10 | 0.26 |
| (2,740) | 1:A:95:ILE:HB | 1:A:96:LYS:H | 20 | 0.26 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB1 | 1 | 0.26 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB2 | 1 | 0.26 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB3 | 1 | 0.26 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB1 | 20 | 0.26 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB2 | 20 | 0.26 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB3 | 20 | 0.26 |
| (2,676) | 1:A:86:LYS:HB3 | 1:A:86:LYS:HA | 1 | 0.26 |
| (2,676) | 1:A:86:LYS:HB3 | 1:A:86:LYS:HA | 2 | 0.26 |
| (2,676) | 1:A:86:LYS:HB3 | 1:A:86:LYS:HA | 5 | 0.26 |
| (2,676) | 1:A:86:LYS:HB3 | 1:A:86:LYS:HA | 7 | 0.26 |
| (2,676) | 1:A:86:LYS:HB3 | 1:A:86:LYS:HA | 11 | 0.26 |
| (2,676) | 1:A:86:LYS:HB3 | 1:A:86:LYS:HA | 12 | 0.26 |
| (2,676) | 1:A:86:LYS:HB3 | 1:A:86:LYS:HA | 16 | 0.26 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD11 | 8 | 0.26 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD12 | 8 | 0.26 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD13 | 8 | 0.26 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD11 | 20 | 0.26 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD12 | 20 | 0.26 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD13 | 20 | 0.26 |
| (2,456) | 1:A:85:ALA:HB1 | 1:A:97:GLN:HE22 | 16 | 0.26 |
| (2,456) | 1:A:85:ALA:HB2 | 1:A:97:GLN:HE22 | 16 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,456) | 1:A:85:ALA:HB3 | 1:A:97:GLN:HE22 | 16 | 0.26 |
| (2,441) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:43:PHE:H | 5 | 0.26 |
| (2,441) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:43:PHE:H | 6 | 0.26 |
| (2,420) | 1:A:42:LYS:HA | 1:A:44:SER:H | 1 | 0.26 |
| (2,401) | 1:A:40:ILE:HA | 1:A:43:PHE:HB3 | 15 | 0.26 |
| (2,384) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:54:LYS:HD2 | 9 | 0.26 |
| (2,384) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:54:LYS:HD2 | 9 | 0.26 |
| (2,384) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:54:LYS:HD2 | 9 | 0.26 |
| (2,384) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:54:LYS:HD2 | 11 | 0.26 |
| (2,384) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:54:LYS:HD2 | 11 | 0.26 |
| (2,384) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:54:LYS:HD2 | 11 | 0.26 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB3 | 9 | 0.26 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB1 | 9 | 0.26 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB2 | 9 | 0.26 |
| (2,351) | 1:A:28:THR:HB | 1:A:28:THR:HA | 20 | 0.26 |
| (2,317) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:74:THR:H | 8 | 0.26 |
| (2,273) | 1:A:19:LYS:HG2 | 1:A:19:LYS:H | 15 | 0.26 |
| (2,248) | 1:A:16:ALA:HA | 1:A:81:GLY:HA2 | 12 | 0.26 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD13 | 15 | 0.26 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD11 | 15 | 0.26 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD12 | 15 | 0.26 |
| (2,185) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:10:GLU:H | 17 | 0.26 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB1 | 4 | 0.26 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB3 | 4 | 0.26 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB2 | 4 | 0.26 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG11 | 8 | 0.26 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG12 | 8 | 0.26 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG13 | 8 | 0.26 |
| (2,1225) | 1:A:102:ASN:H | 1:A:103:ALA:H | 11 | 0.26 |
| (2,1204) | 1:A:42:LYS:H | 1:A:41:GLU:HB3 | 7 | 0.26 |
| (2,1174) | 1:A:87:VAL:H | 1:A:86:LYS:HG2 | 14 | 0.26 |
| (2,1055) | 1:A:60:LEU:H | 1:A:59:GLU:HB3 | 11 | 0.26 |
| (2,1002) | 1:A:47:TYR:H | 1:A:44:SER:H | 12 | 0.26 |
| (1,24) | 1:A:46:GLN:H | 1:A:42:LYS:O | 9 | 0.26 |
| (1,22) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:41:GLU:O | 10 | 0.26 |
| (1,15) | 1:A:39:MET:N | 1:A:35:MET:O | 20 | 0.26 |
| (1,14) | 1:A:39:MET:H | 1:A:35:MET:O | 7 | 0.26 |
| (1,14) | 1:A:39:MET:H | 1:A:35:MET:O | 15 | 0.26 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:57:VAL:H | 8 | 0.25 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:57:VAL:H | 8 | 0.25 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:57:VAL:H | 8 | 0.25 |
| (2,918) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:26:TYR:HD2 | 19 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,918) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:26:TYR:HD1 | 19 | 0.25 |
| (2,839) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:31:GLY:HA2 | 10 | 0.25 |
| (2,827) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:54:LYS:HD2 | 10 | 0.25 |
| (2,827) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:54:LYS:HD2 | 16 | 0.25 |
| (2,754) | 1:A:98:ALA:HA | 1:A:102:ASN:H | 5 | 0.25 |
| (2,754) | 1:A:98:ALA:HA | 1:A:102:ASN:H | 13 | 0.25 |
| (2,753) | 1:A:98:ALA:HA | 1:A:99:ILE:H | 8 | 0.25 |
| (2,753) | 1:A:98:ALA:HA | 1:A:99:ILE:H | 17 | 0.25 |
| (2,749) | 1:A:96:LYS:HA | 1:A:43:PHE:HD2 | 10 | 0.25 |
| (2,749) | 1:A:96:LYS:HA | 1:A:43:PHE:HD1 | 10 | 0.25 |
| (2,749) | 1:A:96:LYS:HA | 1:A:43:PHE:HD2 | 14 | 0.25 |
| (2,749) | 1:A:96:LYS:HA | 1:A:43:PHE:HD1 | 14 | 0.25 |
| (2,749) | 1:A:96:LYS:HA | 1:A:43:PHE:HD2 | 20 | 0.25 |
| (2,749) | 1:A:96:LYS:HA | 1:A:43:PHE:HD1 | 20 | 0.25 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG21 | 2 | 0.25 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG22 | 2 | 0.25 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG23 | 2 | 0.25 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG21 | 2 | 0.25 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG22 | 2 | 0.25 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG23 | 2 | 0.25 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG21 | 2 | 0.25 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG22 | 2 | 0.25 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG23 | 2 | 0.25 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG21 | 6 | 0.25 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG22 | 6 | 0.25 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG23 | 6 | 0.25 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG21 | 6 | 0.25 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG22 | 6 | 0.25 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG23 | 6 | 0.25 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG21 | 6 | 0.25 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG22 | 6 | 0.25 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG23 | 6 | 0.25 |
| (2,740) | 1:A:95:ILE:HB | 1:A:96:LYS:H | 1 | 0.25 |
| (2,740) | 1:A:95:ILE:HB | 1:A:96:LYS:H | 5 | 0.25 |
| (2,740) | 1:A:95:ILE:HB | 1:A:96:LYS:H | 13 | 0.25 |
| (2,740) | 1:A:95:ILE:HB | 1:A:96:LYS:H | 18 | 0.25 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG13 | 12 | 0.25 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG11 | 12 | 0.25 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG12 | 12 | 0.25 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB1 | 3 | 0.25 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB2 | 3 | 0.25 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB3 | 3 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB1 | 16 | 0.25 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB2 | 16 | 0.25 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB3 | 16 | 0.25 |
| (2,683) | 1:A:46:GLN:HA | 1:A:47:TYR:H | 16 | 0.25 |
| (2,679) | 1:A:82:LYS:HB3 | 1:A:83:GLU:H | 4 | 0.25 |
| (2,676) | 1:A:86:LYS:HB3 | 1:A:86:LYS:HA | 6 | 0.25 |
| (2,676) | 1:A:86:LYS:HB3 | 1:A:86:LYS:HA | 8 | 0.25 |
| (2,676) | 1:A:86:LYS:HB3 | 1:A:86:LYS:HA | 9 | 0.25 |
| (2,676) | 1:A:86:LYS:HB3 | 1:A:86:LYS:HA | 14 | 0.25 |
| (2,676) | 1:A:86:LYS:HB3 | 1:A:86:LYS:HA | 15 | 0.25 |
| (2,661) | 1:A:78:PHE:HB3 | 1:A:21:VAL:HB | 20 | 0.25 |
| (2,539) | 1:A:77:LEU:HG | 1:A:76:LEU:HA | 11 | 0.25 |
| (2,493) | 1:A:54:LYS:HE2 | 1:A:40:ILE:HG22 | 9 | 0.25 |
| (2,493) | 1:A:54:LYS:HE2 | 1:A:40:ILE:HG21 | 9 | 0.25 |
| (2,493) | 1:A:54:LYS:HE2 | 1:A:40:ILE:HG23 | 9 | 0.25 |
| (2,450) | 1:A:49:GLN:HA | 1:A:49:GLN:HB2 | 6 | 0.25 |
| (2,441) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:43:PHE:H | 3 | 0.25 |
| (2,441) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:43:PHE:H | 8 | 0.25 |
| (2,420) | 1:A:42:LYS:HA | 1:A:44:SER:H | 14 | 0.25 |
| (2,407) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:54:LYS:HD2 | 16 | 0.25 |
| (2,407) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:54:LYS:HD2 | 16 | 0.25 |
| (2,407) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:54:LYS:HD2 | 16 | 0.25 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ALA:HB3 | 12 | 0.25 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ALA:HB1 | 12 | 0.25 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ALA:HB2 | 12 | 0.25 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ALA:HB3 | 12 | 0.25 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ALA:HB1 | 12 | 0.25 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ALA:HB2 | 12 | 0.25 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ALA:HB3 | 12 | 0.25 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ALA:HB1 | 12 | 0.25 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ALA:HB2 | 12 | 0.25 |
| (2,364) | 1:A:46:GLN:HA | 1:A:46:GLN:HB2 | 19 | 0.25 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB3 | 3 | 0.25 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB1 | 3 | 0.25 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB2 | 3 | 0.25 |
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:75:LEU:HD11 | 7 | 0.25 |
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:75:LEU:HD13 | 7 | 0.25 |
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:75:LEU:HD12 | 7 | 0.25 |
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:75:LEU:HD11 | 7 | 0.25 |
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:75:LEU:HD13 | 7 | 0.25 |
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:75:LEU:HD12 | 7 | 0.25 |
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:75:LEU:HD11 | 7 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:75:LEU:HD13 | 7 | 0.25 |
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:75:LEU:HD12 | 7 | 0.25 |
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:75:LEU:HD11 | 17 | 0.25 |
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:75:LEU:HD13 | 17 | 0.25 |
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:75:LEU:HD12 | 17 | 0.25 |
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:75:LEU:HD11 | 17 | 0.25 |
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:75:LEU:HD13 | 17 | 0.25 |
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:75:LEU:HD12 | 17 | 0.25 |
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:75:LEU:HD11 | 17 | 0.25 |
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:75:LEU:HD13 | 17 | 0.25 |
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:75:LEU:HD12 | 17 | 0.25 |
| (2,248) | 1:A:16:ALA:HA | 1:A:81:GLY:HA2 | 6 | 0.25 |
| (2,197) | 1:A:9:SER:HA | 1:A:12:ASP:HB2 | 3 | 0.25 |
| (2,197) | 1:A:9:SER:HA | 1:A:12:ASP:HB2 | 10 | 0.25 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD13 | 14 | 0.25 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD11 | 14 | 0.25 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD12 | 14 | 0.25 |
| (2,185) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:10:GLU:H | 9 | 0.25 |
| (2,185) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:10:GLU:H | 10 | 0.25 |
| (2,185) | 1:A:7:THR:HA | 1:A:10:GLU:H | 14 | 0.25 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB1 | 8 | 0.25 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB3 | 8 | 0.25 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB2 | 8 | 0.25 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB1 | 15 | 0.25 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB3 | 15 | 0.25 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB2 | 15 | 0.25 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:100:ALA:H | 3 | 0.25 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:100:ALA:H | 3 | 0.25 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:100:ALA:H | 3 | 0.25 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:100:ALA:H | 6 | 0.25 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:100:ALA:H | 6 | 0.25 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:100:ALA:H | 6 | 0.25 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:43:PHE:HD2 | 18 | 0.25 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:43:PHE:HD1 | 18 | 0.25 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:47:TYR:HD2 | 18 | 0.25 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:47:TYR:HD1 | 18 | 0.25 |
| (2,1054) | 1:A:60:LEU:H | 1:A:56:ASP:HB2 | 7 | 0.25 |
| (2,1046) | 1:A:72:MET:H | 1:A:72:MET:HE1 | 4 | 0.25 |
| (2,1046) | 1:A:72:MET:H | 1:A:72:MET:HE2 | 4 | 0.25 |
| (2,1046) | 1:A:72:MET:H | 1:A:72:MET:HE3 | 4 | 0.25 |
| (2,1029) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:53:TYR:HB2 | 10 | 0.25 |
| (2,1013) | 1:A:51:ASP:H | 1:A:51:ASP:HB3 | 14 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1013) | 1:A:51:ASP:H | 1:A:51:ASP:HB3 | 16 | 0.25 |
| (2,1006) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:47:TYR:H | 7 | 0.25 |
| (1,24) | 1:A:46:GLN:H | 1:A:42:LYS:O | 7 | 0.25 |
| (1,15) | 1:A:39:MET:N | 1:A:35:MET:O | 1 | 0.25 |
| (1,14) | 1:A:39:MET:H | 1:A:35:MET:O | 2 | 0.25 |
| (1,14) | 1:A:39:MET:H | 1:A:35:MET:O | 5 | 0.25 |
| (1,14) | 1:A:39:MET:H | 1:A:35:MET:O | 6 | 0.25 |
| (1,14) | 1:A:39:MET:H | 1:A:35:MET:O | 16 | 0.25 |
| (2,873) | 1:A:7:THR:H | 1:A:5:PHE:HB2 | 2 | 0.24 |
| (2,854) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB2 | 8 | 0.24 |
| (2,827) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:54:LYS:HD2 | 2 | 0.24 |
| (2,827) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:54:LYS:HD2 | 11 | 0.24 |
| (2,766) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:96:LYS:HD2 | 2 | 0.24 |
| (2,766) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:96:LYS:HD2 | 16 | 0.24 |
| (2,754) | 1:A:98:ALA:HA | 1:A:102:ASN:H | 14 | 0.24 |
| (2,753) | 1:A:98:ALA:HA | 1:A:99:ILE:H | 4 | 0.24 |
| (2,753) | 1:A:98:ALA:HA | 1:A:99:ILE:H | 20 | 0.24 |
| (2,749) | 1:A:96:LYS:HA | 1:A:43:PHE:HD2 | 11 | 0.24 |
| (2,749) | 1:A:96:LYS:HA | 1:A:43:PHE:HD1 | 11 | 0.24 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG21 | 12 | 0.24 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG22 | 12 | 0.24 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG23 | 12 | 0.24 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG21 | 12 | 0.24 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG22 | 12 | 0.24 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG23 | 12 | 0.24 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG21 | 12 | 0.24 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG22 | 12 | 0.24 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG23 | 12 | 0.24 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG21 | 13 | 0.24 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG22 | 13 | 0.24 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG23 | 13 | 0.24 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG21 | 13 | 0.24 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG22 | 13 | 0.24 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG23 | 13 | 0.24 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG21 | 13 | 0.24 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG22 | 13 | 0.24 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG23 | 13 | 0.24 |
| (2,740) | 1:A:95:ILE:HB | 1:A:96:LYS:H | 9 | 0.24 |
| (2,740) | 1:A:95:ILE:HB | 1:A:96:LYS:H | 14 | 0.24 |
| (2,740) | 1:A:95:ILE:HB | 1:A:96:LYS:H | 15 | 0.24 |
| (2,719) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:86:LYS:HE3 | 20 | 0.24 |
| (2,719) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:86:LYS:HE3 | 20 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,719) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:86:LYS:HE3 | 20 | 0.24 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB1 | 5 | 0.24 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB2 | 5 | 0.24 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB3 | 5 | 0.24 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB1 | 9 | 0.24 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB2 | 9 | 0.24 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB3 | 9 | 0.24 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB1 | 10 | 0.24 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB2 | 10 | 0.24 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB3 | 10 | 0.24 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB1 | 18 | 0.24 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB2 | 18 | 0.24 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB3 | 18 | 0.24 |
| (2,684) | 1:A:83:GLU:HB3 | 1:A:83:GLU:H | 3 | 0.24 |
| (2,676) | 1:A:86:LYS:HB3 | 1:A:86:LYS:HA | 18 | 0.24 |
| (2,539) | 1:A:77:LEU:HG | 1:A:76:LEU:HA | 5 | 0.24 |
| (2,539) | 1:A:77:LEU:HG | 1:A:76:LEU:HA | 18 | 0.24 |
| (2,503) | 1:A:5:PHE:HB2 | 1:A:55:LEU:HD11 | 3 | 0.24 |
| (2,503) | 1:A:5:PHE:HB2 | 1:A:55:LEU:HD12 | 3 | 0.24 |
| (2,503) | 1:A:5:PHE:HB2 | 1:A:55:LEU:HD13 | 3 | 0.24 |
| (2,479) | 1:A:2:VAL:HA | 1:A:53:TYR:HA | 4 | 0.24 |
| (2,472) | 1:A:52:PHE:HA | 1:A:47:TYR:HD2 | 7 | 0.24 |
| (2,472) | 1:A:52:PHE:HA | 1:A:47:TYR:HD1 | 7 | 0.24 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG12 | 18 | 0.24 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG11 | 18 | 0.24 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG13 | 18 | 0.24 |
| (2,46) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:2:VAL:HG23 | 3 | 0.24 |
| (2,46) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:2:VAL:HG21 | 3 | 0.24 |
| (2,46) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:2:VAL:HG22 | 3 | 0.24 |
| (2,46) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:77:LEU:HD21 | 3 | 0.24 |
| (2,46) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:77:LEU:HD23 | 3 | 0.24 |
| (2,46) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:77:LEU:HD22 | 3 | 0.24 |
| (2,442) | 1:A:68:GLU:HG3 | 1:A:68:GLU:H | 9 | 0.24 |
| (2,441) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:43:PHE:H | 1 | 0.24 |
| (2,441) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:43:PHE:H | 12 | 0.24 |
| (2,441) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:43:PHE:H | 14 | 0.24 |
| (2,441) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:43:PHE:H | 17 | 0.24 |
| (2,440) | 1:A:46:GLN:HG2 | 1:A:43:PHE:HD2 | 15 | 0.24 |
| (2,440) | 1:A:46:GLN:HG2 | 1:A:43:PHE:HD1 | 15 | 0.24 |
| (2,420) | 1:A:42:LYS:HA | 1:A:44:SER:H | 7 | 0.24 |
| (2,409) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:40:ILE:H | 2 | 0.24 |
| (2,409) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:40:ILE:H | 2 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,409) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:40:ILE:H | 2 | 0.24 |
| (2,409) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:40:ILE:H | 8 | 0.24 |
| (2,409) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:40:ILE:H | 8 | 0.24 |
| (2,409) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:40:ILE:H | 8 | 0.24 |
| (2,376) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:36:ILE:HG13 | 13 | 0.24 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB3 | 4 | 0.24 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB1 | 4 | 0.24 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB2 | 4 | 0.24 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB3 | 13 | 0.24 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB1 | 13 | 0.24 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB2 | 13 | 0.24 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB3 | 15 | 0.24 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB1 | 15 | 0.24 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB2 | 15 | 0.24 |
| (2,357) | 1:A:29:TRP:HA | 1:A:29:TRP:HD1 | 7 | 0.24 |
| (2,31) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:39:MET:HB2 | 15 | 0.24 |
| (2,31) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:42:LYS:HB2 | 15 | 0.24 |
| (2,31) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:39:MET:HB2 | 18 | 0.24 |
| (2,31) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:42:LYS:HB2 | 18 | 0.24 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:5:PHE:HE2 | 17 | 0.24 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:5:PHE:HE1 | 17 | 0.24 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:5:PHE:HE2 | 17 | 0.24 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:5:PHE:HE1 | 17 | 0.24 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:5:PHE:HE2 | 17 | 0.24 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:5:PHE:HE1 | 17 | 0.24 |
| (2,273) | 1:A:19:LYS:HG2 | 1:A:19:LYS:H | 4 | 0.24 |
| (2,270) | 1:A:19:LYS:HA | 1:A:19:LYS:HE3 | 11 | 0.24 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD13 | 10 | 0.24 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD11 | 10 | 0.24 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD12 | 10 | 0.24 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB1 | 5 | 0.24 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB3 | 5 | 0.24 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB2 | 5 | 0.24 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB1 | 16 | 0.24 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB3 | 16 | 0.24 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB2 | 16 | 0.24 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG11 | 20 | 0.24 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG12 | 20 | 0.24 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG13 | 20 | 0.24 |
| (2,1038) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:56:ASP:HB2 | 15 | 0.24 |
| (2,1009) | 1:A:49:GLN:H | 1:A:49:GLN:HG3 | 5 | 0.24 |
| (2,1002) | 1:A:47:TYR:H | 1:A:44:SER:H | 6 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1002) | 1:A:47:TYR:H | 1:A:44:SER:H | 16 | 0.24 |
| (1,22) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:41:GLU:O | 15 | 0.24 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:57:VAL:H | 1 | 0.23 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:57:VAL:H | 1 | 0.23 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:57:VAL:H | 1 | 0.23 |
| (2,873) | 1:A:7:THR:H | 1:A:5:PHE:HB2 | 12 | 0.23 |
| (2,854) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB2 | 4 | 0.23 |
| (2,854) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB2 | 17 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:30:CYS:HB2 | 7 | 0.23 |
| (2,833) | 1:A:31:GLY:HA3 | 1:A:34:LYS:HB3 | 9 | 0.23 |
| (2,766) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:96:LYS:HD2 | 6 | 0.23 |
| (2,754) | 1:A:98:ALA:HA | 1:A:102:ASN:H | 2 | 0.23 |
| (2,753) | 1:A:98:ALA:HA | 1:A:99:ILE:H | 1 | 0.23 |
| (2,753) | 1:A:98:ALA:HA | 1:A:99:ILE:H | 2 | 0.23 |
| (2,753) | 1:A:98:ALA:HA | 1:A:99:ILE:H | 6 | 0.23 |
| (2,753) | 1:A:98:ALA:HA | 1:A:99:ILE:H | 12 | 0.23 |
| (2,753) | 1:A:98:ALA:HA | 1:A:99:ILE:H | 14 | 0.23 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG21 | 17 | 0.23 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG22 | 17 | 0.23 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG23 | 17 | 0.23 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG21 | 17 | 0.23 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG22 | 17 | 0.23 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG23 | 17 | 0.23 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG21 | 17 | 0.23 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG22 | 17 | 0.23 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG23 | 17 | 0.23 |
| (2,740) | 1:A:95:ILE:HB | 1:A:96:LYS:H | 4 | 0.23 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB1 | 1:A:97:GLN:HB2 | 18 | 0.23 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB3 | 1:A:97:GLN:HB2 | 18 | 0.23 |
| (2,734) | 1:A:94:ALA:HB2 | 1:A:97:GLN:HB2 | 18 | 0.23 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG13 | 10 | 0.23 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG11 | 10 | 0.23 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG12 | 10 | 0.23 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG13 | 11 | 0.23 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG11 | 11 | 0.23 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG12 | 11 | 0.23 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG13 | 14 | 0.23 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG11 | 14 | 0.23 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG12 | 14 | 0.23 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB1 | 6 | 0.23 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB2 | 6 | 0.23 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB3 | 6 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,679) | 1:A:82:LYS:HB3 | 1:A:83:GLU:H | 13 | 0.23 |
| (2,676) | 1:A:86:LYS:HB3 | 1:A:86:LYS:HA | 3 | 0.23 |
| (2,532) | 1:A:60:LEU:HA | 1:A:60:LEU:HB2 | 2 | 0.23 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:61:GLY:HA3 | 17 | 0.23 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:61:GLY:HA3 | 17 | 0.23 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:61:GLY:HA3 | 17 | 0.23 |
| (2,498) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HG | 6 | 0.23 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG12 | 7 | 0.23 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG11 | 7 | 0.23 |
| (2,466) | 1:A:51:ASP:HB2 | 1:A:21:VAL:HG13 | 7 | 0.23 |
| (2,461) | 1:A:51:ASP:HA | 1:A:47:TYR:HD2 | 14 | 0.23 |
| (2,461) | 1:A:51:ASP:HA | 1:A:47:TYR:HD1 | 14 | 0.23 |
| (2,446) | 1:A:47:TYR:HA | 1:A:47:TYR:HD2 | 18 | 0.23 |
| (2,446) | 1:A:47:TYR:HA | 1:A:47:TYR:HD1 | 18 | 0.23 |
| (2,420) | 1:A:42:LYS:HA | 1:A:44:SER:H | 9 | 0.23 |
| (2,409) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:40:ILE:H | 1 | 0.23 |
| (2,409) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:40:ILE:H | 1 | 0.23 |
| (2,409) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:40:ILE:H | 1 | 0.23 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:92:PRO:HA | 8 | 0.23 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:92:PRO:HA | 8 | 0.23 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:92:PRO:HA | 8 | 0.23 |
| (2,405) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:41:GLU:H | 7 | 0.23 |
| (2,399) | 1:A:65:GLN:HG3 | 1:A:61:GLY:HA3 | 16 | 0.23 |
| (2,399) | 1:A:65:GLN:HG3 | 1:A:61:GLY:HA3 | 19 | 0.23 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ALA:HB3 | 14 | 0.23 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ALA:HB1 | 14 | 0.23 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ALA:HB2 | 14 | 0.23 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ALA:HB3 | 14 | 0.23 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ALA:HB1 | 14 | 0.23 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ALA:HB2 | 14 | 0.23 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ALA:HB3 | 14 | 0.23 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ALA:HB1 | 14 | 0.23 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ALA:HB2 | 14 | 0.23 |
| (2,376) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:36:ILE:HG13 | 8 | 0.23 |
| (2,376) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:36:ILE:HG13 | 14 | 0.23 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB3 | 14 | 0.23 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB1 | 14 | 0.23 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB2 | 14 | 0.23 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB3 | 16 | 0.23 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB1 | 16 | 0.23 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB2 | 16 | 0.23 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB3 | 18 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB1 | 18 | 0.23 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB2 | 18 | 0.23 |
| (2,357) | 1:A:29:TRP:HA | 1:A:29:TRP:HD1 | 6 | 0.23 |
| (2,31) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:39:MET:HB2 | 12 | 0.23 |
| (2,31) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:42:LYS:HB2 | 12 | 0.23 |
| (2,270) | 1:A:19:LYS:HA | 1:A:19:LYS:HE3 | 6 | 0.23 |
| (2,248) | 1:A:16:ALA:HA | 1:A:81:GLY:HA2 | 9 | 0.23 |
| (2,197) | 1:A:9:SER:HA | 1:A:12:ASP:HB2 | 4 | 0.23 |
| (2,197) | 1:A:9:SER:HA | 1:A:12:ASP:HB2 | 12 | 0.23 |
| (2,197) | 1:A:9:SER:HA | 1:A:12:ASP:HB2 | 14 | 0.23 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG12 | 5 | 0.23 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG11 | 5 | 0.23 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG13 | 5 | 0.23 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG13 | 1:A:52:PHE:HB3 | 12 | 0.23 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG12 | 1:A:52:PHE:HB3 | 12 | 0.23 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG11 | 1:A:52:PHE:HB3 | 12 | 0.23 |
| (2,1298) | 1:A:26:TYR:HE2 | 1:A:24:ALA:HB1 | 3 | 0.23 |
| (2,1298) | 1:A:26:TYR:HE2 | 1:A:24:ALA:HB2 | 3 | 0.23 |
| (2,1298) | 1:A:26:TYR:HE2 | 1:A:24:ALA:HB3 | 3 | 0.23 |
| (2,1298) | 1:A:26:TYR:HE1 | 1:A:24:ALA:HB1 | 3 | 0.23 |
| (2,1298) | 1:A:26:TYR:HE1 | 1:A:24:ALA:HB2 | 3 | 0.23 |
| (2,1298) | 1:A:26:TYR:HE1 | 1:A:24:ALA:HB3 | 3 | 0.23 |
| (2,1298) | 1:A:26:TYR:HE2 | 1:A:24:ALA:HB1 | 19 | 0.23 |
| (2,1298) | 1:A:26:TYR:HE2 | 1:A:24:ALA:HB2 | 19 | 0.23 |
| (2,1298) | 1:A:26:TYR:HE2 | 1:A:24:ALA:HB3 | 19 | 0.23 |
| (2,1298) | 1:A:26:TYR:HE1 | 1:A:24:ALA:HB1 | 19 | 0.23 |
| (2,1298) | 1:A:26:TYR:HE1 | 1:A:24:ALA:HB2 | 19 | 0.23 |
| (2,1298) | 1:A:26:TYR:HE1 | 1:A:24:ALA:HB3 | 19 | 0.23 |
| (2,1294) | 1:A:52:PHE:HE2 | 1:A:44:SER:HB3 | 18 | 0.23 |
| (2,1294) | 1:A:52:PHE:HE1 | 1:A:44:SER:HB3 | 18 | 0.23 |
| (2,1282) | 1:A:46:GLN:HE22 | 1:A:46:GLN:HG3 | 5 | 0.23 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB1 | 9 | 0.23 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB3 | 9 | 0.23 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB2 | 9 | 0.23 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG11 | 1 | 0.23 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG12 | 1 | 0.23 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG13 | 1 | 0.23 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG11 | 12 | 0.23 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG12 | 12 | 0.23 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG13 | 12 | 0.23 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG11 | 18 | 0.23 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG12 | 18 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG13 | 18 | 0.23 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG11 | 19 | 0.23 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG12 | 19 | 0.23 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG13 | 19 | 0.23 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:100:ALA:H | 19 | 0.23 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:100:ALA:H | 19 | 0.23 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:100:ALA:H | 19 | 0.23 |
| (2,1189) | 1:A:96:LYS:H | 1:A:96:LYS:HG3 | 2 | 0.23 |
| (2,1189) | 1:A:96:LYS:H | 1:A:96:LYS:HG3 | 4 | 0.23 |
| (2,1189) | 1:A:96:LYS:H | 1:A:96:LYS:HG3 | 12 | 0.23 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:43:PHE:HD2 | 5 | 0.23 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:43:PHE:HD1 | 5 | 0.23 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:47:TYR:HD2 | 5 | 0.23 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:47:TYR:HD1 | 5 | 0.23 |
| (2,1086) | 1:A:66:LYS:H | 1:A:66:LYS:HG3 | 9 | 0.23 |
| (2,1013) | 1:A:51:ASP:H | 1:A:51:ASP:HB3 | 15 | 0.23 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD21 | 5 | 0.23 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD22 | 5 | 0.23 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD23 | 5 | 0.23 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD21 | 5 | 0.23 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD23 | 5 | 0.23 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD22 | 5 | 0.23 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG23 | 5 | 0.23 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG21 | 5 | 0.23 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG22 | 5 | 0.23 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD13 | 5 | 0.23 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD11 | 5 | 0.23 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD12 | 5 | 0.23 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD21 | 16 | 0.23 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD22 | 16 | 0.23 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD23 | 16 | 0.23 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD21 | 16 | 0.23 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD23 | 16 | 0.23 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD22 | 16 | 0.23 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG23 | 16 | 0.23 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG21 | 16 | 0.23 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG22 | 16 | 0.23 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD13 | 16 | 0.23 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD11 | 16 | 0.23 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD12 | 16 | 0.23 |
| (1,22) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:41:GLU:O | 4 | 0.23 |
| (1,22) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:41:GLU:O | 19 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,14) | 1:A:39:MET:H | 1:A:35:MET:O | 9 | 0.23 |
| (2,94) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:14:ALA:HA | 18 | 0.22 |
| (2,94) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:13:SER:HA | 18 | 0.22 |
| (2,854) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB2 | 1 | 0.22 |
| (2,854) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB2 | 5 | 0.22 |
| (2,777) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:60:LEU:HD13 | 6 | 0.22 |
| (2,777) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:60:LEU:HD11 | 6 | 0.22 |
| (2,777) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:60:LEU:HD12 | 6 | 0.22 |
| (2,753) | 1:A:98:ALA:HA | 1:A:99:ILE:H | 9 | 0.22 |
| (2,753) | 1:A:98:ALA:HA | 1:A:99:ILE:H | 18 | 0.22 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG21 | 8 | 0.22 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG22 | 8 | 0.22 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG23 | 8 | 0.22 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG21 | 8 | 0.22 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG22 | 8 | 0.22 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG23 | 8 | 0.22 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG21 | 8 | 0.22 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG22 | 8 | 0.22 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG23 | 8 | 0.22 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG21 | 14 | 0.22 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG22 | 14 | 0.22 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG23 | 14 | 0.22 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG21 | 14 | 0.22 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG22 | 14 | 0.22 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG23 | 14 | 0.22 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG21 | 14 | 0.22 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG22 | 14 | 0.22 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG23 | 14 | 0.22 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG21 | 19 | 0.22 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG22 | 19 | 0.22 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG23 | 19 | 0.22 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG21 | 19 | 0.22 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG22 | 19 | 0.22 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG23 | 19 | 0.22 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG21 | 19 | 0.22 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG22 | 19 | 0.22 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG23 | 19 | 0.22 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG13 | 1 | 0.22 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG11 | 1 | 0.22 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG12 | 1 | 0.22 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG13 | 13 | 0.22 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG11 | 13 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG12 | 13 | 0.22 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG13 | 17 | 0.22 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG11 | 17 | 0.22 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG12 | 17 | 0.22 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB1 | 13 | 0.22 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB2 | 13 | 0.22 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB3 | 13 | 0.22 |
| (2,683) | 1:A:46:GLN:HA | 1:A:47:TYR:H | 13 | 0.22 |
| (2,680) | 1:A:82:LYS:HB2 | 1:A:82:LYS:H | 13 | 0.22 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG11 | 11 | 0.22 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG12 | 11 | 0.22 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG13 | 11 | 0.22 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG11 | 12 | 0.22 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG12 | 12 | 0.22 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG13 | 12 | 0.22 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG11 | 17 | 0.22 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG12 | 17 | 0.22 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG13 | 17 | 0.22 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG11 | 17 | 0.22 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG13 | 17 | 0.22 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG12 | 17 | 0.22 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG11 | 17 | 0.22 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG13 | 17 | 0.22 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG12 | 17 | 0.22 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG11 | 17 | 0.22 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG13 | 17 | 0.22 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG12 | 17 | 0.22 |
| (2,576) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:THR:HA | 7 | 0.22 |
| (2,576) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:THR:HA | 14 | 0.22 |
| (2,532) | 1:A:60:LEU:HA | 1:A:60:LEU:HB2 | 3 | 0.22 |
| (2,532) | 1:A:60:LEU:HA | 1:A:60:LEU:HB2 | 7 | 0.22 |
| (2,532) | 1:A:60:LEU:HA | 1:A:60:LEU:HB2 | 9 | 0.22 |
| (2,532) | 1:A:60:LEU:HA | 1:A:60:LEU:HB2 | 10 | 0.22 |
| (2,532) | 1:A:60:LEU:HA | 1:A:60:LEU:HB2 | 12 | 0.22 |
| (2,532) | 1:A:60:LEU:HA | 1:A:60:LEU:HB2 | 16 | 0.22 |
| (2,532) | 1:A:60:LEU:HA | 1:A:60:LEU:HB2 | 17 | 0.22 |
| (2,532) | 1:A:60:LEU:HA | 1:A:60:LEU:HB2 | 18 | 0.22 |
| (2,532) | 1:A:60:LEU:HA | 1:A:60:LEU:HB2 | 19 | 0.22 |
| (2,529) | 1:A:58:ASP:HB2 | 1:A:59:GLU:H | 7 | 0.22 |
| (2,508) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:56:ASP:HA | 2 | 0.22 |
| (2,498) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HG | 7 | 0.22 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD11 | 12 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD12 | 12 | 0.22 |
| (2,497) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HD13 | 12 | 0.22 |
| (2,479) | 1:A:2:VAL:HA | 1:A:53:TYR:HA | 20 | 0.22 |
| (2,472) | 1:A:52:PHE:HA | 1:A:47:TYR:HD2 | 2 | 0.22 |
| (2,472) | 1:A:52:PHE:HA | 1:A:47:TYR:HD1 | 2 | 0.22 |
| (2,472) | 1:A:52:PHE:HA | 1:A:47:TYR:HD2 | 4 | 0.22 |
| (2,472) | 1:A:52:PHE:HA | 1:A:47:TYR:HD1 | 4 | 0.22 |
| (2,46) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:2:VAL:HG23 | 18 | 0.22 |
| (2,46) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:2:VAL:HG21 | 18 | 0.22 |
| (2,46) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:2:VAL:HG22 | 18 | 0.22 |
| (2,46) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:77:LEU:HD21 | 18 | 0.22 |
| (2,46) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:77:LEU:HD23 | 18 | 0.22 |
| (2,46) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:77:LEU:HD22 | 18 | 0.22 |
| (2,420) | 1:A:42:LYS:HA | 1:A:44:SER:H | 10 | 0.22 |
| (2,409) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:40:ILE:H | 20 | 0.22 |
| (2,409) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:40:ILE:H | 20 | 0.22 |
| (2,409) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:40:ILE:H | 20 | 0.22 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB3 | 20 | 0.22 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB1 | 20 | 0.22 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB2 | 20 | 0.22 |
| (2,357) | 1:A:29:TRP:HA | 1:A:29:TRP:HD1 | 16 | 0.22 |
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:75:LEU:HD11 | 19 | 0.22 |
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:75:LEU:HD13 | 19 | 0.22 |
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:75:LEU:HD12 | 19 | 0.22 |
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:75:LEU:HD11 | 19 | 0.22 |
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:75:LEU:HD13 | 19 | 0.22 |
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:75:LEU:HD12 | 19 | 0.22 |
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:75:LEU:HD11 | 19 | 0.22 |
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:75:LEU:HD13 | 19 | 0.22 |
| (2,325) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:75:LEU:HD12 | 19 | 0.22 |
| (2,270) | 1:A:19:LYS:HA | 1:A:19:LYS:HE3 | 17 | 0.22 |
| (2,248) | 1:A:16:ALA:HA | 1:A:81:GLY:HA2 | 3 | 0.22 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD13 | 1 | 0.22 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD11 | 1 | 0.22 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD12 | 1 | 0.22 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD13 | 4 | 0.22 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD11 | 4 | 0.22 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD12 | 4 | 0.22 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD13 | 9 | 0.22 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD11 | 9 | 0.22 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD12 | 9 | 0.22 |
| (2,1298) | 1:A:26:TYR:HE2 | 1:A:24:ALA:HB1 | 18 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1298) | 1:A:26:TYR:HE2 | 1:A:24:ALA:HB2 | 18 | 0.22 |
| (2,1298) | 1:A:26:TYR:HE2 | 1:A:24:ALA:HB3 | 18 | 0.22 |
| (2,1298) | 1:A:26:TYR:HE1 | 1:A:24:ALA:HB1 | 18 | 0.22 |
| (2,1298) | 1:A:26:TYR:HE1 | 1:A:24:ALA:HB2 | 18 | 0.22 |
| (2,1298) | 1:A:26:TYR:HE1 | 1:A:24:ALA:HB3 | 18 | 0.22 |
| (2,1294) | 1:A:52:PHE:HE2 | 1:A:44:SER:HB3 | 3 | 0.22 |
| (2,1294) | 1:A:52:PHE:HE1 | 1:A:44:SER:HB3 | 3 | 0.22 |
| (2,1294) | 1:A:52:PHE:HE2 | 1:A:44:SER:HB3 | 6 | 0.22 |
| (2,1294) | 1:A:52:PHE:HE1 | 1:A:44:SER:HB3 | 6 | 0.22 |
| (2,1282) | 1:A:46:GLN:HE22 | 1:A:46:GLN:HG3 | 1 | 0.22 |
| (2,1282) | 1:A:46:GLN:HE22 | 1:A:46:GLN:HG3 | 2 | 0.22 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB1 | 2 | 0.22 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB3 | 2 | 0.22 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB2 | 2 | 0.22 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB1 | 3 | 0.22 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB3 | 3 | 0.22 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB2 | 3 | 0.22 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB1 | 18 | 0.22 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB3 | 18 | 0.22 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB2 | 18 | 0.22 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG11 | 17 | 0.22 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG12 | 17 | 0.22 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG13 | 17 | 0.22 |
| (2,1212) | 1:A:100:ALA:H | 1:A:96:LYS:HD2 | 11 | 0.22 |
| (2,1202) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:42:LYS:H | 17 | 0.22 |
| (2,1189) | 1:A:96:LYS:H | 1:A:96:LYS:HG3 | 6 | 0.22 |
| (2,1139) | 1:A:80:ASN:H | 1:A:79:LYS:HB3 | 12 | 0.22 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:43:PHE:HD2 | 4 | 0.22 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:43:PHE:HD1 | 4 | 0.22 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:47:TYR:HD2 | 4 | 0.22 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:47:TYR:HD1 | 4 | 0.22 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:43:PHE:HD2 | 20 | 0.22 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:43:PHE:HD1 | 20 | 0.22 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:47:TYR:HD2 | 20 | 0.22 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:47:TYR:HD1 | 20 | 0.22 |
| (2,1013) | 1:A:51:ASP:H | 1:A:51:ASP:HB3 | 4 | 0.22 |
| (2,1013) | 1:A:51:ASP:H | 1:A:51:ASP:HB3 | 9 | 0.22 |
| (2,1011) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:51:ASP:H | 17 | 0.22 |
| (2,1009) | 1:A:49:GLN:H | 1:A:49:GLN:HG3 | 14 | 0.22 |
| (2,1002) | 1:A:47:TYR:H | 1:A:44:SER:H | 14 | 0.22 |
| (1,22) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:41:GLU:O | 9 | 0.22 |
| (1,22) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:41:GLU:O | 14 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,15) | 1:A:39:MET:N | 1:A:35:MET:O | 4 | 0.22 |
| (1,14) | 1:A:39:MET:H | 1:A:35:MET:O | 11 | 0.22 |
| (1,14) | 1:A:39:MET:H | 1:A:35:MET:O | 12 | 0.22 |
| (1,14) | 1:A:39:MET:H | 1:A:35:MET:O | 18 | 0.22 |
| (2,989) | 1:A:43:PHE:H | 1:A:41:GLU:HB3 | 2 | 0.21 |
| (2,94) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:14:ALA:HA | 4 | 0.21 |
| (2,94) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:13:SER:HA | 4 | 0.21 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:57:VAL:H | 13 | 0.21 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:57:VAL:H | 13 | 0.21 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:57:VAL:H | 13 | 0.21 |
| (2,854) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB2 | 12 | 0.21 |
| (2,839) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:31:GLY:HA2 | 12 | 0.21 |
| (2,839) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:31:GLY:HA2 | 18 | 0.21 |
| (2,835) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:30:CYS:HB2 | 20 | 0.21 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB3 | 1:A:47:TYR:HB2 | 15 | 0.21 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB1 | 1:A:47:TYR:HB2 | 15 | 0.21 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB2 | 1:A:47:TYR:HB2 | 15 | 0.21 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB3 | 1:A:47:TYR:HB3 | 15 | 0.21 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB1 | 1:A:47:TYR:HB3 | 15 | 0.21 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB2 | 1:A:47:TYR:HB3 | 15 | 0.21 |
| (2,769) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:103:ALA:HB3 | 19 | 0.21 |
| (2,769) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:103:ALA:HB1 | 19 | 0.21 |
| (2,769) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:103:ALA:HB2 | 19 | 0.21 |
| (2,769) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:103:ALA:HB3 | 19 | 0.21 |
| (2,769) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:103:ALA:HB1 | 19 | 0.21 |
| (2,769) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:103:ALA:HB2 | 19 | 0.21 |
| (2,769) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:103:ALA:HB3 | 19 | 0.21 |
| (2,769) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:103:ALA:HB1 | 19 | 0.21 |
| (2,769) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:103:ALA:HB2 | 19 | 0.21 |
| (2,766) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:96:LYS:HD2 | 17 | 0.21 |
| (2,754) | 1:A:98:ALA:HA | 1:A:102:ASN:H | 9 | 0.21 |
| (2,753) | 1:A:98:ALA:HA | 1:A:99:ILE:H | 7 | 0.21 |
| (2,753) | 1:A:98:ALA:HA | 1:A:99:ILE:H | 10 | 0.21 |
| (2,753) | 1:A:98:ALA:HA | 1:A:99:ILE:H | 13 | 0.21 |
| (2,753) | 1:A:98:ALA:HA | 1:A:99:ILE:H | 15 | 0.21 |
| (2,749) | 1:A:96:LYS:HA | 1:A:43:PHE:HD2 | 17 | 0.21 |
| (2,749) | 1:A:96:LYS:HA | 1:A:43:PHE:HD1 | 17 | 0.21 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG21 | 4 | 0.21 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG22 | 4 | 0.21 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG23 | 4 | 0.21 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG21 | 4 | 0.21 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG22 | 4 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG23 | 4 | 0.21 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG21 | 4 | 0.21 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG22 | 4 | 0.21 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG23 | 4 | 0.21 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG21 | 5 | 0.21 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG22 | 5 | 0.21 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG23 | 5 | 0.21 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG21 | 5 | 0.21 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG22 | 5 | 0.21 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG23 | 5 | 0.21 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG21 | 5 | 0.21 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG22 | 5 | 0.21 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG23 | 5 | 0.21 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG21 | 20 | 0.21 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG22 | 20 | 0.21 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG23 | 20 | 0.21 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG21 | 20 | 0.21 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG22 | 20 | 0.21 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG23 | 20 | 0.21 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG21 | 20 | 0.21 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG22 | 20 | 0.21 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG23 | 20 | 0.21 |
| (2,680) | 1:A:82:LYS:HB2 | 1:A:82:LYS:H | 1 | 0.21 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG11 | 3 | 0.21 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG12 | 3 | 0.21 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG13 | 3 | 0.21 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG11 | 6 | 0.21 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG12 | 6 | 0.21 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG13 | 6 | 0.21 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG11 | 15 | 0.21 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG12 | 15 | 0.21 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG13 | 15 | 0.21 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG11 | 13 | 0.21 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG13 | 13 | 0.21 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG12 | 13 | 0.21 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG11 | 13 | 0.21 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG13 | 13 | 0.21 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG12 | 13 | 0.21 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG11 | 13 | 0.21 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG13 | 13 | 0.21 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG12 | 13 | 0.21 |
| (2,620) | 1:A:74:THR:HG21 | 1:A:76:LEU:HG | 5 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,620) | 1:A:74:THR:HG22 | 1:A:76:LEU:HG | 5 | 0.21 |
| (2,620) | 1:A:74:THR:HG23 | 1:A:76:LEU:HG | 5 | 0.21 |
| (2,539) | 1:A:77:LEU:HG | 1:A:76:LEU:HA | 3 | 0.21 |
| (2,539) | 1:A:77:LEU:HG | 1:A:76:LEU:HA | 6 | 0.21 |
| (2,539) | 1:A:77:LEU:HG | 1:A:76:LEU:HA | 8 | 0.21 |
| (2,539) | 1:A:77:LEU:HG | 1:A:76:LEU:HA | 9 | 0.21 |
| (2,539) | 1:A:77:LEU:HG | 1:A:76:LEU:HA | 12 | 0.21 |
| (2,539) | 1:A:77:LEU:HG | 1:A:76:LEU:HA | 16 | 0.21 |
| (2,532) | 1:A:60:LEU:HA | 1:A:60:LEU:HB2 | 1 | 0.21 |
| (2,532) | 1:A:60:LEU:HA | 1:A:60:LEU:HB2 | 4 | 0.21 |
| (2,532) | 1:A:60:LEU:HA | 1:A:60:LEU:HB2 | 5 | 0.21 |
| (2,532) | 1:A:60:LEU:HA | 1:A:60:LEU:HB2 | 6 | 0.21 |
| (2,532) | 1:A:60:LEU:HA | 1:A:60:LEU:HB2 | 8 | 0.21 |
| (2,532) | 1:A:60:LEU:HA | 1:A:60:LEU:HB2 | 11 | 0.21 |
| (2,532) | 1:A:60:LEU:HA | 1:A:60:LEU:HB2 | 13 | 0.21 |
| (2,532) | 1:A:60:LEU:HA | 1:A:60:LEU:HB2 | 14 | 0.21 |
| (2,532) | 1:A:60:LEU:HA | 1:A:60:LEU:HB2 | 15 | 0.21 |
| (2,532) | 1:A:60:LEU:HA | 1:A:60:LEU:HB2 | 20 | 0.21 |
| (2,529) | 1:A:58:ASP:HB2 | 1:A:59:GLU:H | 20 | 0.21 |
| (2,508) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:56:ASP:HA | 20 | 0.21 |
| (2,498) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HG | 17 | 0.21 |
| (2,461) | 1:A:51:ASP:HA | 1:A:47:TYR:HD2 | 20 | 0.21 |
| (2,461) | 1:A:51:ASP:HA | 1:A:47:TYR:HD1 | 20 | 0.21 |
| (2,456) | 1:A:85:ALA:HB1 | 1:A:97:GLN:HE22 | 9 | 0.21 |
| (2,456) | 1:A:85:ALA:HB2 | 1:A:97:GLN:HE22 | 9 | 0.21 |
| (2,456) | 1:A:85:ALA:HB3 | 1:A:97:GLN:HE22 | 9 | 0.21 |
| (2,446) | 1:A:47:TYR:HA | 1:A:47:TYR:HD2 | 6 | 0.21 |
| (2,446) | 1:A:47:TYR:HA | 1:A:47:TYR:HD1 | 6 | 0.21 |
| (2,446) | 1:A:47:TYR:HA | 1:A:47:TYR:HD2 | 12 | 0.21 |
| (2,446) | 1:A:47:TYR:HA | 1:A:47:TYR:HD1 | 12 | 0.21 |
| (2,440) | 1:A:46:GLN:HG2 | 1:A:43:PHE:HD2 | 4 | 0.21 |
| (2,440) | 1:A:46:GLN:HG2 | 1:A:43:PHE:HD1 | 4 | 0.21 |
| (2,420) | 1:A:42:LYS:HA | 1:A:44:SER:H | 2 | 0.21 |
| (2,420) | 1:A:42:LYS:HA | 1:A:44:SER:H | 11 | 0.21 |
| (2,409) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:40:ILE:H | 14 | 0.21 |
| (2,409) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:40:ILE:H | 14 | 0.21 |
| (2,409) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:40:ILE:H | 14 | 0.21 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:92:PRO:HA | 3 | 0.21 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:92:PRO:HA | 3 | 0.21 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:92:PRO:HA | 3 | 0.21 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:92:PRO:HA | 5 | 0.21 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:92:PRO:HA | 5 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:92:PRO:HA | 5 | 0.21 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:92:PRO:HA | 12 | 0.21 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:92:PRO:HA | 12 | 0.21 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:92:PRO:HA | 12 | 0.21 |
| (2,406) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:2:VAL:HG13 | 5 | 0.21 |
| (2,406) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:2:VAL:HG12 | 5 | 0.21 |
| (2,406) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:2:VAL:HG11 | 5 | 0.21 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ALA:HB3 | 7 | 0.21 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ALA:HB1 | 7 | 0.21 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ALA:HB2 | 7 | 0.21 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ALA:HB3 | 7 | 0.21 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ALA:HB1 | 7 | 0.21 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ALA:HB2 | 7 | 0.21 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ALA:HB3 | 7 | 0.21 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ALA:HB1 | 7 | 0.21 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ALA:HB2 | 7 | 0.21 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB3 | 11 | 0.21 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB1 | 11 | 0.21 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB2 | 11 | 0.21 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:5:PHE:HE2 | 12 | 0.21 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:5:PHE:HE1 | 12 | 0.21 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:5:PHE:HE2 | 12 | 0.21 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:5:PHE:HE1 | 12 | 0.21 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:5:PHE:HE2 | 12 | 0.21 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:5:PHE:HE1 | 12 | 0.21 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD13 | 2 | 0.21 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD11 | 2 | 0.21 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD12 | 2 | 0.21 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD13 | 13 | 0.21 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD11 | 13 | 0.21 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD12 | 13 | 0.21 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG12 | 3 | 0.21 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG11 | 3 | 0.21 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG13 | 3 | 0.21 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG12 | 8 | 0.21 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG11 | 8 | 0.21 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG13 | 8 | 0.21 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB1 | 6 | 0.21 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB3 | 6 | 0.21 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB2 | 6 | 0.21 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB1 | 7 | 0.21 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB3 | 7 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB2 | 7 | 0.21 |
| (2,1224) | 1:A:100:ALA:H | 1:A:102:ASN:H | 3 | 0.21 |
| (2,1224) | 1:A:100:ALA:H | 1:A:102:ASN:H | 4 | 0.21 |
| (2,1224) | 1:A:100:ALA:H | 1:A:102:ASN:H | 5 | 0.21 |
| (2,1224) | 1:A:100:ALA:H | 1:A:102:ASN:H | 19 | 0.21 |
| (2,1224) | 1:A:100:ALA:H | 1:A:102:ASN:H | 20 | 0.21 |
| (2,1202) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:42:LYS:H | 13 | 0.21 |
| (2,1171) | 1:A:86:LYS:HB2 | 1:A:86:LYS:H | 4 | 0.21 |
| (2,1139) | 1:A:80:ASN:H | 1:A:79:LYS:HB3 | 3 | 0.21 |
| (2,1139) | 1:A:80:ASN:H | 1:A:79:LYS:HB3 | 14 | 0.21 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:43:PHE:HD2 | 15 | 0.21 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:43:PHE:HD1 | 15 | 0.21 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:47:TYR:HD2 | 15 | 0.21 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:47:TYR:HD1 | 15 | 0.21 |
| (2,1114) | 1:A:75:LEU:H | 1:A:87:VAL:HB | 4 | 0.21 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG21 | 5 | 0.21 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG23 | 5 | 0.21 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG22 | 5 | 0.21 |
| (2,1017) | 1:A:52:PHE:H | 1:A:47:TYR:HD2 | 3 | 0.21 |
| (2,1017) | 1:A:52:PHE:H | 1:A:47:TYR:HD1 | 3 | 0.21 |
| (2,1011) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:51:ASP:H | 15 | 0.21 |
| (2,1011) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:51:ASP:H | 19 | 0.21 |
| (2,1005) | 1:A:47:TYR:H | 1:A:43:PHE:HA | 11 | 0.21 |
| (2,1002) | 1:A:47:TYR:H | 1:A:44:SER:H | 15 | 0.21 |
| (1,47) | 1:A:79:LYS:H | 1:A:83:GLU:O | 1 | 0.21 |
| (1,15) | 1:A:39:MET:N | 1:A:35:MET:O | 8 | 0.21 |
| (1,15) | 1:A:39:MET:N | 1:A:35:MET:O | 13 | 0.21 |
| (1,15) | 1:A:39:MET:N | 1:A:35:MET:O | 15 | 0.21 |
| (1,15) | 1:A:39:MET:N | 1:A:35:MET:O | 17 | 0.21 |
| (1,14) | 1:A:39:MET:H | 1:A:35:MET:O | 19 | 0.21 |
| (2,94) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:14:ALA:HA | 5 | 0.2 |
| (2,94) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:13:SER:HA | 5 | 0.2 |
| (2,928) | 1:A:19:LYS:H | 1:A:18:ASP:HB2 | 2 | 0.2 |
| (2,928) | 1:A:19:LYS:H | 1:A:18:ASP:HB2 | 7 | 0.2 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:57:VAL:H | 3 | 0.2 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:57:VAL:H | 3 | 0.2 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:57:VAL:H | 3 | 0.2 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:57:VAL:H | 12 | 0.2 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:57:VAL:H | 12 | 0.2 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:57:VAL:H | 12 | 0.2 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:57:VAL:H | 19 | 0.2 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:57:VAL:H | 19 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:57:VAL:H | 19 | 0.2 |
| (2,854) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB2 | 2 | 0.2 |
| (2,854) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB2 | 10 | 0.2 |
| (2,854) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB2 | 16 | 0.2 |
| (2,854) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB2 | 18 | 0.2 |
| (2,854) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB2 | 20 | 0.2 |
| (2,775) | 1:A:99:ILE:HG21 | 1:A:96:LYS:HD2 | 18 | 0.2 |
| (2,775) | 1:A:99:ILE:HG22 | 1:A:96:LYS:HD2 | 18 | 0.2 |
| (2,775) | 1:A:99:ILE:HG23 | 1:A:96:LYS:HD2 | 18 | 0.2 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB3 | 1:A:47:TYR:HB2 | 8 | 0.2 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB1 | 1:A:47:TYR:HB2 | 8 | 0.2 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB2 | 1:A:47:TYR:HB2 | 8 | 0.2 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB3 | 1:A:47:TYR:HB3 | 8 | 0.2 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB1 | 1:A:47:TYR:HB3 | 8 | 0.2 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB2 | 1:A:47:TYR:HB3 | 8 | 0.2 |
| (2,753) | 1:A:98:ALA:HA | 1:A:99:ILE:H | 5 | 0.2 |
| (2,749) | 1:A:96:LYS:HA | 1:A:43:PHE:HD2 | 13 | 0.2 |
| (2,749) | 1:A:96:LYS:HA | 1:A:43:PHE:HD1 | 13 | 0.2 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG21 | 15 | 0.2 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG22 | 15 | 0.2 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG23 | 15 | 0.2 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG21 | 15 | 0.2 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG22 | 15 | 0.2 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG23 | 15 | 0.2 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG21 | 15 | 0.2 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG22 | 15 | 0.2 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG23 | 15 | 0.2 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG21 | 18 | 0.2 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG22 | 18 | 0.2 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG23 | 18 | 0.2 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG21 | 18 | 0.2 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG22 | 18 | 0.2 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG23 | 18 | 0.2 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG21 | 18 | 0.2 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG22 | 18 | 0.2 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG23 | 18 | 0.2 |
| (2,740) | 1:A:95:ILE:HB | 1:A:96:LYS:H | 16 | 0.2 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG13 | 19 | 0.2 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG11 | 19 | 0.2 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG12 | 19 | 0.2 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB1 | 7 | 0.2 |
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB2 | 7 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,702) | 1:A:86:LYS:HA | 1:A:85:ALA:HB3 | 7 | 0.2 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG11 | 7 | 0.2 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG12 | 7 | 0.2 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG13 | 7 | 0.2 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG11 | 10 | 0.2 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG12 | 10 | 0.2 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG13 | 10 | 0.2 |
| (2,582) | 1:A:66:LYS:HB3 | 1:A:66:LYS:H | 6 | 0.2 |
| (2,582) | 1:A:66:LYS:HB3 | 1:A:66:LYS:H | 15 | 0.2 |
| (2,555) | 1:A:63:VAL:HA | 1:A:66:LYS:HG3 | 3 | 0.2 |
| (2,55) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:24:ALA:HA | 4 | 0.2 |
| (2,55) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:HA | 4 | 0.2 |
| (2,539) | 1:A:77:LEU:HG | 1:A:76:LEU:HA | 1 | 0.2 |
| (2,539) | 1:A:77:LEU:HG | 1:A:76:LEU:HA | 2 | 0.2 |
| (2,539) | 1:A:77:LEU:HG | 1:A:76:LEU:HA | 13 | 0.2 |
| (2,498) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HG | 12 | 0.2 |
| (2,46) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:2:VAL:HG23 | 1 | 0.2 |
| (2,46) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:2:VAL:HG21 | 1 | 0.2 |
| (2,46) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:2:VAL:HG22 | 1 | 0.2 |
| (2,46) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:77:LEU:HD21 | 1 | 0.2 |
| (2,46) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:77:LEU:HD23 | 1 | 0.2 |
| (2,46) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:77:LEU:HD22 | 1 | 0.2 |
| (2,450) | 1:A:49:GLN:HA | 1:A:49:GLN:HB2 | 8 | 0.2 |
| (2,446) | 1:A:47:TYR:HA | 1:A:47:TYR:HD2 | 3 | 0.2 |
| (2,446) | 1:A:47:TYR:HA | 1:A:47:TYR:HD1 | 3 | 0.2 |
| (2,446) | 1:A:47:TYR:HA | 1:A:47:TYR:HD2 | 17 | 0.2 |
| (2,446) | 1:A:47:TYR:HA | 1:A:47:TYR:HD1 | 17 | 0.2 |
| (2,441) | 1:A:46:GLN:HG3 | 1:A:43:PHE:H | 19 | 0.2 |
| (2,420) | 1:A:42:LYS:HA | 1:A:44:SER:H | 15 | 0.2 |
| (2,420) | 1:A:42:LYS:HA | 1:A:44:SER:H | 16 | 0.2 |
| (2,420) | 1:A:42:LYS:HA | 1:A:44:SER:H | 20 | 0.2 |
| (2,406) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:2:VAL:HG13 | 20 | 0.2 |
| (2,406) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:2:VAL:HG12 | 20 | 0.2 |
| (2,406) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:2:VAL:HG11 | 20 | 0.2 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:5:PHE:HE2 | 13 | 0.2 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:5:PHE:HE1 | 13 | 0.2 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:5:PHE:HE2 | 13 | 0.2 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:5:PHE:HE1 | 13 | 0.2 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:5:PHE:HE2 | 13 | 0.2 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:5:PHE:HE1 | 13 | 0.2 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:23:VAL:H | 11 | 0.2 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:23:VAL:H | 11 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:23:VAL:H | 11 | 0.2 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:21:VAL:HB | 18 | 0.2 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:21:VAL:HB | 18 | 0.2 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:21:VAL:HB | 18 | 0.2 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD13 | 20 | 0.2 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD11 | 20 | 0.2 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD12 | 20 | 0.2 |
| (2,168) | 1:A:3:THR:HG21 | 1:A:3:THR:H | 20 | 0.2 |
| (2,168) | 1:A:3:THR:HG23 | 1:A:3:THR:H | 20 | 0.2 |
| (2,168) | 1:A:3:THR:HG22 | 1:A:3:THR:H | 20 | 0.2 |
| (2,13) | 1:A:10:GLU:HG2 | 1:A:6:LYS:HG2 | 15 | 0.2 |
| (2,13) | 1:A:10:GLU:HG3 | 1:A:6:LYS:HG2 | 15 | 0.2 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB1 | 11 | 0.2 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB3 | 11 | 0.2 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB2 | 11 | 0.2 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB1 | 14 | 0.2 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB3 | 14 | 0.2 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB2 | 14 | 0.2 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG11 | 4 | 0.2 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG12 | 4 | 0.2 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG13 | 4 | 0.2 |
| (2,1224) | 1:A:100:ALA:H | 1:A:102:ASN:H | 13 | 0.2 |
| (2,1199) | 1:A:97:GLN:H | 1:A:96:LYS:HB3 | 13 | 0.2 |
| (2,1139) | 1:A:80:ASN:H | 1:A:79:LYS:HB3 | 6 | 0.2 |
| (2,1139) | 1:A:80:ASN:H | 1:A:79:LYS:HB3 | 19 | 0.2 |
| (2,1038) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:56:ASP:HB2 | 5 | 0.2 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG21 | 6 | 0.2 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG23 | 6 | 0.2 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG22 | 6 | 0.2 |
| (2,1029) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:53:TYR:HB2 | 20 | 0.2 |
| (2,1017) | 1:A:52:PHE:H | 1:A:47:TYR:HD2 | 6 | 0.2 |
| (2,1017) | 1:A:52:PHE:H | 1:A:47:TYR:HD1 | 6 | 0.2 |
| (2,1013) | 1:A:51:ASP:H | 1:A:51:ASP:HB3 | 5 | 0.2 |
| (2,1011) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:51:ASP:H | 1 | 0.2 |
| (2,1011) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:51:ASP:H | 5 | 0.2 |
| (2,1011) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:51:ASP:H | 6 | 0.2 |
| (2,1011) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:51:ASP:H | 11 | 0.2 |
| (2,1011) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:51:ASP:H | 12 | 0.2 |
| (2,1011) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:51:ASP:H | 13 | 0.2 |
| (2,1011) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:51:ASP:H | 16 | 0.2 |
| (2,1002) | 1:A:47:TYR:H | 1:A:44:SER:H | 8 | 0.2 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD21 | 6 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD22 | 6 | 0.2 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD23 | 6 | 0.2 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD21 | 6 | 0.2 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD23 | 6 | 0.2 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD22 | 6 | 0.2 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG23 | 6 | 0.2 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG21 | 6 | 0.2 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG22 | 6 | 0.2 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD13 | 6 | 0.2 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD11 | 6 | 0.2 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD12 | 6 | 0.2 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD21 | 13 | 0.2 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD22 | 13 | 0.2 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD23 | 13 | 0.2 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD21 | 13 | 0.2 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD23 | 13 | 0.2 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD22 | 13 | 0.2 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG23 | 13 | 0.2 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG21 | 13 | 0.2 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG22 | 13 | 0.2 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD13 | 13 | 0.2 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD11 | 13 | 0.2 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD12 | 13 | 0.2 |
| (1,7) | 1:A:35:MET:H | 1:A:31:GLY:O | 10 | 0.2 |
| (1,34) | 1:A:98:ALA:H | 1:A:94:ALA:O | 10 | 0.2 |
| (1,24) | 1:A:46:GLN:H | 1:A:42:LYS:O | 6 | 0.2 |
| (1,24) | 1:A:46:GLN:H | 1:A:42:LYS:O | 10 | 0.2 |
| (1,24) | 1:A:46:GLN:H | 1:A:42:LYS:O | 15 | 0.2 |
| (1,22) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:41:GLU:O | 8 | 0.2 |
| (1,15) | 1:A:39:MET:N | 1:A:35:MET:O | 6 | 0.2 |
| (1,15) | 1:A:39:MET:N | 1:A:35:MET:O | 7 | 0.2 |
| (1,15) | 1:A:39:MET:N | 1:A:35:MET:O | 14 | 0.2 |
| (1,14) | 1:A:39:MET:H | 1:A:35:MET:O | 3 | 0.2 |
| (1,14) | 1:A:39:MET:H | 1:A:35:MET:O | 10 | 0.2 |
| (2,94) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:14:ALA:HA | 1 | 0.19 |
| (2,94) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:13:SER:HA | 1 | 0.19 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:57:VAL:H | 2 | 0.19 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:57:VAL:H | 2 | 0.19 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:57:VAL:H | 2 | 0.19 |
| (2,873) | 1:A:7:THR:H | 1:A:5:PHE:HB2 | 7 | 0.19 |
| (2,873) | 1:A:7:THR:H | 1:A:5:PHE:HB2 | 14 | 0.19 |
| (2,854) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB2 | 13 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,854) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB2 | 19 | 0.19 |
| (2,835) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:30:CYS:HB2 | 13 | 0.19 |
| (2,766) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:96:LYS:HD2 | 15 | 0.19 |
| (2,754) | 1:A:98:ALA:HA | 1:A:102:ASN:H | 7 | 0.19 |
| (2,754) | 1:A:98:ALA:HA | 1:A:102:ASN:H | 20 | 0.19 |
| (2,753) | 1:A:98:ALA:HA | 1:A:99:ILE:H | 11 | 0.19 |
| (2,753) | 1:A:98:ALA:HA | 1:A:99:ILE:H | 16 | 0.19 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG21 | 3 | 0.19 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG22 | 3 | 0.19 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG23 | 3 | 0.19 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG21 | 3 | 0.19 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG22 | 3 | 0.19 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG23 | 3 | 0.19 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG21 | 3 | 0.19 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG22 | 3 | 0.19 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG23 | 3 | 0.19 |
| (2,740) | 1:A:95:ILE:HB | 1:A:96:LYS:H | 11 | 0.19 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG13 | 16 | 0.19 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG11 | 16 | 0.19 |
| (2,712) | 1:A:87:VAL:HA | 1:A:88:VAL:HG12 | 16 | 0.19 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:20:LEU:HD21 | 13 | 0.19 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:20:LEU:HD22 | 13 | 0.19 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:20:LEU:HD23 | 13 | 0.19 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:20:LEU:HD21 | 13 | 0.19 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:20:LEU:HD22 | 13 | 0.19 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:20:LEU:HD23 | 13 | 0.19 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:20:LEU:HD21 | 13 | 0.19 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:20:LEU:HD22 | 13 | 0.19 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:20:LEU:HD23 | 13 | 0.19 |
| (2,680) | 1:A:82:LYS:HB2 | 1:A:82:LYS:H | 4 | 0.19 |
| (2,667) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG22 | 13 | 0.19 |
| (2,667) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG21 | 13 | 0.19 |
| (2,667) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG23 | 13 | 0.19 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG11 | 2 | 0.19 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG13 | 2 | 0.19 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG12 | 2 | 0.19 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG11 | 2 | 0.19 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG13 | 2 | 0.19 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG12 | 2 | 0.19 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG11 | 2 | 0.19 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG13 | 2 | 0.19 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG12 | 2 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG11 | 7 | 0.19 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG13 | 7 | 0.19 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG12 | 7 | 0.19 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG11 | 7 | 0.19 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG13 | 7 | 0.19 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG12 | 7 | 0.19 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG11 | 7 | 0.19 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG13 | 7 | 0.19 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG12 | 7 | 0.19 |
| (2,582) | 1:A:66:LYS:HB3 | 1:A:66:LYS:H | 5 | 0.19 |
| (2,582) | 1:A:66:LYS:HB3 | 1:A:66:LYS:H | 7 | 0.19 |
| (2,582) | 1:A:66:LYS:HB3 | 1:A:66:LYS:H | 9 | 0.19 |
| (2,582) | 1:A:66:LYS:HB3 | 1:A:66:LYS:H | 11 | 0.19 |
| (2,582) | 1:A:66:LYS:HB3 | 1:A:66:LYS:H | 12 | 0.19 |
| (2,582) | 1:A:66:LYS:HB3 | 1:A:66:LYS:H | 14 | 0.19 |
| (2,582) | 1:A:66:LYS:HB3 | 1:A:66:LYS:H | 16 | 0.19 |
| (2,582) | 1:A:66:LYS:HB3 | 1:A:66:LYS:H | 17 | 0.19 |
| (2,582) | 1:A:66:LYS:HB3 | 1:A:66:LYS:H | 20 | 0.19 |
| (2,539) | 1:A:77:LEU:HG | 1:A:76:LEU:HA | 7 | 0.19 |
| (2,539) | 1:A:77:LEU:HG | 1:A:76:LEU:HA | 15 | 0.19 |
| (2,539) | 1:A:77:LEU:HG | 1:A:76:LEU:HA | 19 | 0.19 |
| (2,539) | 1:A:77:LEU:HG | 1:A:76:LEU:HA | 20 | 0.19 |
| (2,498) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HG | 13 | 0.19 |
| (2,487) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:75:LEU:HB2 | 4 | 0.19 |
| (2,479) | 1:A:2:VAL:HA | 1:A:53:TYR:HA | 7 | 0.19 |
| (2,472) | 1:A:52:PHE:HA | 1:A:47:TYR:HD2 | 1 | 0.19 |
| (2,472) | 1:A:52:PHE:HA | 1:A:47:TYR:HD1 | 1 | 0.19 |
| (2,472) | 1:A:52:PHE:HA | 1:A:47:TYR:HD2 | 8 | 0.19 |
| (2,472) | 1:A:52:PHE:HA | 1:A:47:TYR:HD1 | 8 | 0.19 |
| (2,461) | 1:A:51:ASP:HA | 1:A:47:TYR:HD2 | 3 | 0.19 |
| (2,461) | 1:A:51:ASP:HA | 1:A:47:TYR:HD1 | 3 | 0.19 |
| (2,46) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:2:VAL:HG23 | 11 | 0.19 |
| (2,46) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:2:VAL:HG21 | 11 | 0.19 |
| (2,46) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:2:VAL:HG22 | 11 | 0.19 |
| (2,46) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:77:LEU:HD21 | 11 | 0.19 |
| (2,46) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:77:LEU:HD23 | 11 | 0.19 |
| (2,46) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:77:LEU:HD22 | 11 | 0.19 |
| (2,456) | 1:A:85:ALA:HB1 | 1:A:97:GLN:HE22 | 2 | 0.19 |
| (2,456) | 1:A:85:ALA:HB2 | 1:A:97:GLN:HE22 | 2 | 0.19 |
| (2,456) | 1:A:85:ALA:HB3 | 1:A:97:GLN:HE22 | 2 | 0.19 |
| (2,450) | 1:A:49:GLN:HA | 1:A:49:GLN:HB2 | 11 | 0.19 |
| (2,446) | 1:A:47:TYR:HA | 1:A:47:TYR:HD2 | 19 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,446) | 1:A:47:TYR:HA | 1:A:47:TYR:HD1 | 19 | 0.19 |
| (2,436) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:42:LYS:HA | 20 | 0.19 |
| (2,420) | 1:A:42:LYS:HA | 1:A:44:SER:H | 5 | 0.19 |
| (2,420) | 1:A:42:LYS:HA | 1:A:44:SER:H | 12 | 0.19 |
| (2,407) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:54:LYS:HD2 | 5 | 0.19 |
| (2,407) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:54:LYS:HD2 | 5 | 0.19 |
| (2,407) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:54:LYS:HD2 | 5 | 0.19 |
| (2,407) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:54:LYS:HD2 | 7 | 0.19 |
| (2,407) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:54:LYS:HD2 | 7 | 0.19 |
| (2,407) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:54:LYS:HD2 | 7 | 0.19 |
| (2,406) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:2:VAL:HG13 | 1 | 0.19 |
| (2,406) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:2:VAL:HG12 | 1 | 0.19 |
| (2,406) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:2:VAL:HG11 | 1 | 0.19 |
| (2,406) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:2:VAL:HG13 | 16 | 0.19 |
| (2,406) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:2:VAL:HG12 | 16 | 0.19 |
| (2,406) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:2:VAL:HG11 | 16 | 0.19 |
| (2,401) | 1:A:40:ILE:HA | 1:A:43:PHE:HB3 | 4 | 0.19 |
| (2,401) | 1:A:40:ILE:HA | 1:A:43:PHE:HB3 | 20 | 0.19 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ALA:HB3 | 9 | 0.19 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ALA:HB1 | 9 | 0.19 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ALA:HB2 | 9 | 0.19 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ALA:HB3 | 9 | 0.19 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ALA:HB1 | 9 | 0.19 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ALA:HB2 | 9 | 0.19 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ALA:HB3 | 9 | 0.19 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ALA:HB1 | 9 | 0.19 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ALA:HB2 | 9 | 0.19 |
| (2,376) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:36:ILE:HG13 | 7 | 0.19 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB3 | 7 | 0.19 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB1 | 7 | 0.19 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB2 | 7 | 0.19 |
| (2,357) | 1:A:29:TRP:HA | 1:A:29:TRP:HD1 | 4 | 0.19 |
| (2,357) | 1:A:29:TRP:HA | 1:A:29:TRP:HD1 | 17 | 0.19 |
| (2,34) | 1:A:42:LYS:HD3 | 1:A:43:PHE:HA | 2 | 0.19 |
| (2,34) | 1:A:42:LYS:HD2 | 1:A:43:PHE:HA | 2 | 0.19 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:23:VAL:H | 18 | 0.19 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:23:VAL:H | 18 | 0.19 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:23:VAL:H | 18 | 0.19 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:21:VAL:HB | 2 | 0.19 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:21:VAL:HB | 2 | 0.19 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:21:VAL:HB | 2 | 0.19 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD13 | 19 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD11 | 19 | 0.19 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD12 | 19 | 0.19 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG12 | 2 | 0.19 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG11 | 2 | 0.19 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG13 | 2 | 0.19 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG12 | 7 | 0.19 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG11 | 7 | 0.19 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG13 | 7 | 0.19 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG12 | 16 | 0.19 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG11 | 16 | 0.19 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG13 | 16 | 0.19 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG12 | 20 | 0.19 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG11 | 20 | 0.19 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG13 | 20 | 0.19 |
| (2,155) | 1:A:2:VAL:HB | 1:A:44:SER:HB2 | 14 | 0.19 |
| (2,155) | 1:A:2:VAL:HB | 1:A:44:SER:HB2 | 20 | 0.19 |
| (2,1294) | 1:A:52:PHE:HE2 | 1:A:44:SER:HB3 | 5 | 0.19 |
| (2,1294) | 1:A:52:PHE:HE1 | 1:A:44:SER:HB3 | 5 | 0.19 |
| (2,1294) | 1:A:52:PHE:HE2 | 1:A:44:SER:HB3 | 16 | 0.19 |
| (2,1294) | 1:A:52:PHE:HE1 | 1:A:44:SER:HB3 | 16 | 0.19 |
| (2,1246) | 1:A:67:ASN:HD22 | 1:A:66:LYS:HB2 | 3 | 0.19 |
| (2,1236) | 1:A:49:GLN:H | 1:A:47:TYR:HD2 | 9 | 0.19 |
| (2,1236) | 1:A:49:GLN:H | 1:A:47:TYR:HD1 | 9 | 0.19 |
| (2,1224) | 1:A:100:ALA:H | 1:A:102:ASN:H | 2 | 0.19 |
| (2,1224) | 1:A:100:ALA:H | 1:A:102:ASN:H | 6 | 0.19 |
| (2,1224) | 1:A:100:ALA:H | 1:A:102:ASN:H | 8 | 0.19 |
| (2,1224) | 1:A:100:ALA:H | 1:A:102:ASN:H | 11 | 0.19 |
| (2,1224) | 1:A:100:ALA:H | 1:A:102:ASN:H | 12 | 0.19 |
| (2,1224) | 1:A:100:ALA:H | 1:A:102:ASN:H | 14 | 0.19 |
| (2,1224) | 1:A:100:ALA:H | 1:A:102:ASN:H | 17 | 0.19 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:100:ALA:H | 4 | 0.19 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:100:ALA:H | 4 | 0.19 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:100:ALA:H | 4 | 0.19 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:100:ALA:H | 14 | 0.19 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:100:ALA:H | 14 | 0.19 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:100:ALA:H | 14 | 0.19 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:100:ALA:H | 15 | 0.19 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:100:ALA:H | 15 | 0.19 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:100:ALA:H | 15 | 0.19 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:100:ALA:H | 16 | 0.19 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:100:ALA:H | 16 | 0.19 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:100:ALA:H | 16 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,1202) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:42:LYS:H | 1 | 0.19 |
| (2,1189) | 1:A:96:LYS:H | 1:A:96:LYS:HG3 | 16 | 0.19 |
| (2,1155) | 1:A:82:LYS:H | 1:A:82:LYS:HG2 | 7 | 0.19 |
| (2,1139) | 1:A:80:ASN:H | 1:A:79:LYS:HB3 | 4 | 0.19 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG21 | 3 | 0.19 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG23 | 3 | 0.19 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG22 | 3 | 0.19 |
| (2,1017) | 1:A:52:PHE:H | 1:A:47:TYR:HD2 | 19 | 0.19 |
| (2,1017) | 1:A:52:PHE:H | 1:A:47:TYR:HD1 | 19 | 0.19 |
| (2,1011) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:51:ASP:H | 14 | 0.19 |
| (2,1002) | 1:A:47:TYR:H | 1:A:44:SER:H | 1 | 0.19 |
| (2,1002) | 1:A:47:TYR:H | 1:A:44:SER:H | 9 | 0.19 |
| (1,7) | 1:A:35:MET:H | 1:A:31:GLY:O | 19 | 0.19 |
| (1,47) | 1:A:79:LYS:H | 1:A:83:GLU:O | 5 | 0.19 |
| (1,47) | 1:A:79:LYS:H | 1:A:83:GLU:O | 10 | 0.19 |
| (1,47) | 1:A:79:LYS:H | 1:A:83:GLU:O | 15 | 0.19 |
| (1,24) | 1:A:46:GLN:H | 1:A:42:LYS:O | 13 | 0.19 |
| (1,22) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:41:GLU:O | 5 | 0.19 |
| (1,22) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:41:GLU:O | 7 | 0.19 |
| (1,22) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:41:GLU:O | 17 | 0.19 |
| (2,94) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:14:ALA:HA | 2 | 0.18 |
| (2,94) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:13:SER:HA | 2 | 0.18 |
| (2,94) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:14:ALA:HA | 8 | 0.18 |
| (2,94) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:13:SER:HA | 8 | 0.18 |
| (2,94) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:14:ALA:HA | 13 | 0.18 |
| (2,94) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:13:SER:HA | 13 | 0.18 |
| (2,94) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:14:ALA:HA | 17 | 0.18 |
| (2,94) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:13:SER:HA | 17 | 0.18 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:57:VAL:H | 10 | 0.18 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:57:VAL:H | 10 | 0.18 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:57:VAL:H | 10 | 0.18 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:57:VAL:H | 20 | 0.18 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:57:VAL:H | 20 | 0.18 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:57:VAL:H | 20 | 0.18 |
| (2,873) | 1:A:7:THR:H | 1:A:5:PHE:HB2 | 10 | 0.18 |
| (2,854) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB2 | 7 | 0.18 |
| (2,854) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB2 | 15 | 0.18 |
| (2,85) | 1:A:90:ALA:HB3 | 1:A:32:PRO:HG2 | 9 | 0.18 |
| (2,85) | 1:A:90:ALA:HB1 | 1:A:32:PRO:HG2 | 9 | 0.18 |
| (2,85) | 1:A:90:ALA:HB2 | 1:A:32:PRO:HG2 | 9 | 0.18 |
| (2,85) | 1:A:90:ALA:HB3 | 1:A:32:PRO:HG3 | 9 | 0.18 |
| (2,85) | 1:A:90:ALA:HB1 | 1:A:32:PRO:HG3 | 9 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,85) | 1:A:90:ALA:HB2 | 1:A:32:PRO:HG3 | 9 | 0.18 |
| (2,839) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:31:GLY:HA2 | 19 | 0.18 |
| (2,827) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:54:LYS:HD2 | 3 | 0.18 |
| (2,827) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:54:LYS:HD2 | 13 | 0.18 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB3 | 1:A:47:TYR:HB2 | 18 | 0.18 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB1 | 1:A:47:TYR:HB2 | 18 | 0.18 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB2 | 1:A:47:TYR:HB2 | 18 | 0.18 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB3 | 1:A:47:TYR:HB3 | 18 | 0.18 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB1 | 1:A:47:TYR:HB3 | 18 | 0.18 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB2 | 1:A:47:TYR:HB3 | 18 | 0.18 |
| (2,766) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:96:LYS:HD2 | 4 | 0.18 |
| (2,754) | 1:A:98:ALA:HA | 1:A:102:ASN:H | 4 | 0.18 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG21 | 7 | 0.18 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG22 | 7 | 0.18 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG23 | 7 | 0.18 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG21 | 7 | 0.18 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG22 | 7 | 0.18 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG23 | 7 | 0.18 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG21 | 7 | 0.18 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG22 | 7 | 0.18 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG23 | 7 | 0.18 |
| (2,74) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:43:PHE:HD2 | 12 | 0.18 |
| (2,74) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:43:PHE:HD1 | 12 | 0.18 |
| (2,74) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:43:PHE:HD2 | 12 | 0.18 |
| (2,74) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:43:PHE:HD1 | 12 | 0.18 |
| (2,74) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:43:PHE:HD2 | 12 | 0.18 |
| (2,74) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:43:PHE:HD1 | 12 | 0.18 |
| (2,74) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:47:TYR:HD2 | 12 | 0.18 |
| (2,74) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:47:TYR:HD1 | 12 | 0.18 |
| (2,74) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:47:TYR:HD2 | 12 | 0.18 |
| (2,74) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:47:TYR:HD1 | 12 | 0.18 |
| (2,74) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:47:TYR:HD2 | 12 | 0.18 |
| (2,74) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:47:TYR:HD1 | 12 | 0.18 |
| (2,683) | 1:A:46:GLN:HA | 1:A:47:TYR:H | 14 | 0.18 |
| (2,682) | 1:A:46:GLN:HA | 1:A:46:GLN:HG3 | 9 | 0.18 |
| (2,680) | 1:A:82:LYS:HB2 | 1:A:82:LYS:H | 10 | 0.18 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG11 | 16 | 0.18 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG12 | 16 | 0.18 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG13 | 16 | 0.18 |
| (2,582) | 1:A:66:LYS:HB3 | 1:A:66:LYS:H | 1 | 0.18 |
| (2,582) | 1:A:66:LYS:HB3 | 1:A:66:LYS:H | 4 | 0.18 |
| (2,582) | 1:A:66:LYS:HB3 | 1:A:66:LYS:H | 13 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,582) | 1:A:66:LYS:HB3 | 1:A:66:LYS:H | 18 | 0.18 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD13 | 15 | 0.18 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD11 | 15 | 0.18 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD12 | 15 | 0.18 |
| (2,529) | 1:A:58:ASP:HB2 | 1:A:59:GLU:H | 1 | 0.18 |
| (2,498) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HG | 4 | 0.18 |
| (2,487) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:75:LEU:HB2 | 2 | 0.18 |
| (2,487) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:75:LEU:HB2 | 6 | 0.18 |
| (2,487) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:75:LEU:HB2 | 9 | 0.18 |
| (2,487) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:75:LEU:HB2 | 11 | 0.18 |
| (2,487) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:75:LEU:HB2 | 15 | 0.18 |
| (2,487) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:75:LEU:HB2 | 18 | 0.18 |
| (2,487) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:75:LEU:HB2 | 20 | 0.18 |
| (2,479) | 1:A:2:VAL:HA | 1:A:53:TYR:HA | 9 | 0.18 |
| (2,47) | 1:A:94:ALA:HA | 1:A:97:GLN:HB2 | 7 | 0.18 |
| (2,47) | 1:A:94:ALA:HA | 1:A:97:GLN:HB3 | 7 | 0.18 |
| (2,47) | 1:A:94:ALA:HA | 1:A:97:GLN:HB2 | 11 | 0.18 |
| (2,47) | 1:A:94:ALA:HA | 1:A:97:GLN:HB3 | 11 | 0.18 |
| (2,461) | 1:A:51:ASP:HA | 1:A:47:TYR:HD2 | 15 | 0.18 |
| (2,461) | 1:A:51:ASP:HA | 1:A:47:TYR:HD1 | 15 | 0.18 |
| (2,444) | 1:A:47:TYR:HA | 1:A:49:GLN:H | 19 | 0.18 |
| (2,420) | 1:A:42:LYS:HA | 1:A:44:SER:H | 13 | 0.18 |
| (2,409) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:40:ILE:H | 15 | 0.18 |
| (2,409) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:40:ILE:H | 15 | 0.18 |
| (2,409) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:40:ILE:H | 15 | 0.18 |
| (2,409) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:40:ILE:H | 18 | 0.18 |
| (2,409) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:40:ILE:H | 18 | 0.18 |
| (2,409) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:40:ILE:H | 18 | 0.18 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:92:PRO:HA | 1 | 0.18 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:92:PRO:HA | 1 | 0.18 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:92:PRO:HA | 1 | 0.18 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:92:PRO:HA | 11 | 0.18 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:92:PRO:HA | 11 | 0.18 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:92:PRO:HA | 11 | 0.18 |
| (2,407) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:54:LYS:HD2 | 17 | 0.18 |
| (2,407) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:54:LYS:HD2 | 17 | 0.18 |
| (2,407) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:54:LYS:HD2 | 17 | 0.18 |
| (2,405) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:41:GLU:H | 9 | 0.18 |
| (2,401) | 1:A:40:ILE:HA | 1:A:43:PHE:HB3 | 13 | 0.18 |
| (2,399) | 1:A:65:GLN:HG3 | 1:A:61:GLY:HA3 | 11 | 0.18 |
| (2,392) | 1:A:37:ALA:HB3 | 1:A:26:TYR:HD2 | 19 | 0.18 |
| (2,392) | 1:A:37:ALA:HB3 | 1:A:26:TYR:HD1 | 19 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,392) | 1:A:37:ALA:HB1 | 1:A:26:TYR:HD2 | 19 | 0.18 |
| (2,392) | 1:A:37:ALA:HB1 | 1:A:26:TYR:HD1 | 19 | 0.18 |
| (2,392) | 1:A:37:ALA:HB2 | 1:A:26:TYR:HD2 | 19 | 0.18 |
| (2,392) | 1:A:37:ALA:HB2 | 1:A:26:TYR:HD1 | 19 | 0.18 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ALA:HB3 | 17 | 0.18 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ALA:HB1 | 17 | 0.18 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ALA:HB2 | 17 | 0.18 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ALA:HB3 | 17 | 0.18 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ALA:HB1 | 17 | 0.18 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ALA:HB2 | 17 | 0.18 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ALA:HB3 | 17 | 0.18 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ALA:HB1 | 17 | 0.18 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ALA:HB2 | 17 | 0.18 |
| (2,383) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:40:ILE:HB | 16 | 0.18 |
| (2,383) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:40:ILE:HB | 16 | 0.18 |
| (2,383) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:40:ILE:HB | 16 | 0.18 |
| (2,317) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:74:THR:H | 16 | 0.18 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:5:PHE:HE2 | 9 | 0.18 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:5:PHE:HE1 | 9 | 0.18 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:5:PHE:HE2 | 9 | 0.18 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:5:PHE:HE1 | 9 | 0.18 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:5:PHE:HE2 | 9 | 0.18 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:5:PHE:HE1 | 9 | 0.18 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:21:VAL:HB | 4 | 0.18 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:21:VAL:HB | 4 | 0.18 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:21:VAL:HB | 4 | 0.18 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD13 | 8 | 0.18 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD11 | 8 | 0.18 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD12 | 8 | 0.18 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD13 | 17 | 0.18 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD11 | 17 | 0.18 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD12 | 17 | 0.18 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD13 | 18 | 0.18 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD11 | 18 | 0.18 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD12 | 18 | 0.18 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB1 | 1 | 0.18 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB3 | 1 | 0.18 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB2 | 1 | 0.18 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB1 | 13 | 0.18 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB3 | 13 | 0.18 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB2 | 13 | 0.18 |
| (2,1264) | 1:A:49:GLN:HE21 | 1:A:49:GLN:HB3 | 1 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG11 | 2 | 0.18 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG12 | 2 | 0.18 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG13 | 2 | 0.18 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG11 | 10 | 0.18 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG12 | 10 | 0.18 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG13 | 10 | 0.18 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG11 | 15 | 0.18 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG12 | 15 | 0.18 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG13 | 15 | 0.18 |
| (2,1224) | 1:A:100:ALA:H | 1:A:102:ASN:H | 1 | 0.18 |
| (2,1224) | 1:A:100:ALA:H | 1:A:102:ASN:H | 7 | 0.18 |
| (2,1224) | 1:A:100:ALA:H | 1:A:102:ASN:H | 15 | 0.18 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:100:ALA:H | 1 | 0.18 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:100:ALA:H | 1 | 0.18 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:100:ALA:H | 1 | 0.18 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:100:ALA:H | 8 | 0.18 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:100:ALA:H | 8 | 0.18 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:100:ALA:H | 8 | 0.18 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:100:ALA:H | 10 | 0.18 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:100:ALA:H | 10 | 0.18 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:100:ALA:H | 10 | 0.18 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:100:ALA:H | 17 | 0.18 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:100:ALA:H | 17 | 0.18 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:100:ALA:H | 17 | 0.18 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:100:ALA:H | 20 | 0.18 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:100:ALA:H | 20 | 0.18 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:100:ALA:H | 20 | 0.18 |
| (2,1202) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:42:LYS:H | 14 | 0.18 |
| (2,1139) | 1:A:80:ASN:H | 1:A:79:LYS:HB3 | 10 | 0.18 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 4 | 0.18 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 4 | 0.18 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 4 | 0.18 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG21 | 9 | 0.18 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG23 | 9 | 0.18 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG22 | 9 | 0.18 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG21 | 11 | 0.18 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG23 | 11 | 0.18 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG22 | 11 | 0.18 |
| (2,1030) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:2:VAL:HB | 3 | 0.18 |
| (2,1013) | 1:A:51:ASP:H | 1:A:51:ASP:HB3 | 8 | 0.18 |
| (2,1013) | 1:A:51:ASP:H | 1:A:51:ASP:HB3 | 20 | 0.18 |
| (2,1011) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:51:ASP:H | 9 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD21 | 19 | 0.18 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD22 | 19 | 0.18 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD23 | 19 | 0.18 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD21 | 19 | 0.18 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD23 | 19 | 0.18 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD22 | 19 | 0.18 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG23 | 19 | 0.18 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG21 | 19 | 0.18 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG22 | 19 | 0.18 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD13 | 19 | 0.18 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD11 | 19 | 0.18 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD12 | 19 | 0.18 |
| (1,7) | 1:A:35:MET:H | 1:A:31:GLY:O | 7 | 0.18 |
| (1,47) | 1:A:79:LYS:H | 1:A:83:GLU:O | 11 | 0.18 |
| (1,22) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:41:GLU:O | 18 | 0.18 |
| (1,15) | 1:A:39:MET:N | 1:A:35:MET:O | 5 | 0.18 |
| (1,15) | 1:A:39:MET:N | 1:A:35:MET:O | 16 | 0.18 |
| (2,94) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:14:ALA:HA | 10 | 0.17 |
| (2,94) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:13:SER:HA | 10 | 0.17 |
| (2,94) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:14:ALA:HA | 11 | 0.17 |
| (2,94) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:13:SER:HA | 11 | 0.17 |
| (2,94) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:14:ALA:HA | 14 | 0.17 |
| (2,94) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:13:SER:HA | 14 | 0.17 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:57:VAL:H | 4 | 0.17 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:57:VAL:H | 4 | 0.17 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:57:VAL:H | 4 | 0.17 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:57:VAL:H | 14 | 0.17 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:57:VAL:H | 14 | 0.17 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:57:VAL:H | 14 | 0.17 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:57:VAL:H | 16 | 0.17 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:57:VAL:H | 16 | 0.17 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:57:VAL:H | 16 | 0.17 |
| (2,854) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB2 | 9 | 0.17 |
| (2,833) | 1:A:31:GLY:HA3 | 1:A:34:LYS:HB3 | 14 | 0.17 |
| (2,827) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:54:LYS:HD2 | 7 | 0.17 |
| (2,827) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:54:LYS:HD2 | 9 | 0.17 |
| (2,823) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:83:GLU:HA | 13 | 0.17 |
| (2,823) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:83:GLU:HA | 18 | 0.17 |
| (2,821) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:82:LYS:H | 18 | 0.17 |
| (2,777) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:60:LEU:HD13 | 11 | 0.17 |
| (2,777) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:60:LEU:HD11 | 11 | 0.17 |
| (2,777) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:60:LEU:HD12 | 11 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,766) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:96:LYS:HD2 | 7 | 0.17 |
| (2,754) | 1:A:98:ALA:HA | 1:A:102:ASN:H | 19 | 0.17 |
| (2,749) | 1:A:96:LYS:HA | 1:A:43:PHE:HD2 | 16 | 0.17 |
| (2,749) | 1:A:96:LYS:HA | 1:A:43:PHE:HD1 | 16 | 0.17 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:85:ALA:HB1 | 20 | 0.17 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:85:ALA:HB2 | 20 | 0.17 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:85:ALA:HB3 | 20 | 0.17 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:85:ALA:HB1 | 20 | 0.17 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:85:ALA:HB2 | 20 | 0.17 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:85:ALA:HB3 | 20 | 0.17 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:85:ALA:HB1 | 20 | 0.17 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:85:ALA:HB2 | 20 | 0.17 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:85:ALA:HB3 | 20 | 0.17 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:20:LEU:HD21 | 18 | 0.17 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:20:LEU:HD22 | 18 | 0.17 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:20:LEU:HD23 | 18 | 0.17 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:20:LEU:HD21 | 18 | 0.17 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:20:LEU:HD22 | 18 | 0.17 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:20:LEU:HD23 | 18 | 0.17 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:20:LEU:HD21 | 18 | 0.17 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:20:LEU:HD22 | 18 | 0.17 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:20:LEU:HD23 | 18 | 0.17 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG11 | 8 | 0.17 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG12 | 8 | 0.17 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG13 | 8 | 0.17 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG11 | 9 | 0.17 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG12 | 9 | 0.17 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG13 | 9 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG11 | 1 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG13 | 1 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG12 | 1 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG11 | 1 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG13 | 1 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG12 | 1 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG11 | 1 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG13 | 1 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG12 | 1 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG11 | 3 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG13 | 3 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG12 | 3 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG11 | 3 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG13 | 3 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG12 | 3 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG11 | 3 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG13 | 3 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG12 | 3 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG11 | 11 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG13 | 11 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG12 | 11 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG11 | 11 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG13 | 11 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG12 | 11 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG11 | 11 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG13 | 11 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG12 | 11 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG11 | 12 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG13 | 12 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG12 | 12 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG11 | 12 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG13 | 12 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG12 | 12 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG11 | 12 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG13 | 12 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG12 | 12 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG11 | 19 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG13 | 19 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG12 | 19 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG11 | 19 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG13 | 19 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG12 | 19 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG11 | 19 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG13 | 19 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG12 | 19 | 0.17 |
| (2,582) | 1:A:66:LYS:HB3 | 1:A:66:LYS:H | 10 | 0.17 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:H | 18 | 0.17 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:H | 18 | 0.17 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:H | 18 | 0.17 |
| (2,539) | 1:A:77:LEU:HG | 1:A:76:LEU:HA | 14 | 0.17 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:61:GLY:HA3 | 20 | 0.17 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:61:GLY:HA3 | 20 | 0.17 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:61:GLY:HA3 | 20 | 0.17 |
| (2,498) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HG | 5 | 0.17 |
| (2,498) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HG | 8 | 0.17 |
| (2,498) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HG | 19 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,487) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:75:LEU:HB2 | 1 | 0.17 |
| (2,487) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:75:LEU:HB2 | 3 | 0.17 |
| (2,487) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:75:LEU:HB2 | 5 | 0.17 |
| (2,487) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:75:LEU:HB2 | 8 | 0.17 |
| (2,487) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:75:LEU:HB2 | 10 | 0.17 |
| (2,487) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:75:LEU:HB2 | 14 | 0.17 |
| (2,487) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:75:LEU:HB2 | 16 | 0.17 |
| (2,479) | 1:A:2:VAL:HA | 1:A:53:TYR:HA | 17 | 0.17 |
| (2,461) | 1:A:51:ASP:HA | 1:A:47:TYR:HD2 | 1 | 0.17 |
| (2,461) | 1:A:51:ASP:HA | 1:A:47:TYR:HD1 | 1 | 0.17 |
| (2,46) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:2:VAL:HG23 | 6 | 0.17 |
| (2,46) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:2:VAL:HG21 | 6 | 0.17 |
| (2,46) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:2:VAL:HG22 | 6 | 0.17 |
| (2,46) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:77:LEU:HD21 | 6 | 0.17 |
| (2,46) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:77:LEU:HD23 | 6 | 0.17 |
| (2,46) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:77:LEU:HD22 | 6 | 0.17 |
| (2,46) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:2:VAL:HG23 | 16 | 0.17 |
| (2,46) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:2:VAL:HG21 | 16 | 0.17 |
| (2,46) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:2:VAL:HG22 | 16 | 0.17 |
| (2,46) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:77:LEU:HD21 | 16 | 0.17 |
| (2,46) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:77:LEU:HD23 | 16 | 0.17 |
| (2,46) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:77:LEU:HD22 | 16 | 0.17 |
| (2,456) | 1:A:85:ALA:HB1 | 1:A:97:GLN:HE22 | 1 | 0.17 |
| (2,456) | 1:A:85:ALA:HB2 | 1:A:97:GLN:HE22 | 1 | 0.17 |
| (2,456) | 1:A:85:ALA:HB3 | 1:A:97:GLN:HE22 | 1 | 0.17 |
| (2,444) | 1:A:47:TYR:HA | 1:A:49:GLN:H | 17 | 0.17 |
| (2,409) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:40:ILE:H | 3 | 0.17 |
| (2,409) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:40:ILE:H | 3 | 0.17 |
| (2,409) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:40:ILE:H | 3 | 0.17 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:92:PRO:HA | 15 | 0.17 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:92:PRO:HA | 15 | 0.17 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:92:PRO:HA | 15 | 0.17 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:92:PRO:HA | 19 | 0.17 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:92:PRO:HA | 19 | 0.17 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:92:PRO:HA | 19 | 0.17 |
| (2,402) | 1:A:40:ILE:HA | 1:A:43:PHE:HD2 | 1 | 0.17 |
| (2,402) | 1:A:40:ILE:HA | 1:A:43:PHE:HD1 | 1 | 0.17 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ALA:HB3 | 1 | 0.17 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ALA:HB1 | 1 | 0.17 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ALA:HB2 | 1 | 0.17 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ALA:HB3 | 1 | 0.17 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ALA:HB1 | 1 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ALA:HB2 | 1 | 0.17 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ALA:HB3 | 1 | 0.17 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ALA:HB1 | 1 | 0.17 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ALA:HB2 | 1 | 0.17 |
| (2,357) | 1:A:29:TRP:HA | 1:A:29:TRP:HD1 | 9 | 0.17 |
| (2,357) | 1:A:29:TRP:HA | 1:A:29:TRP:HD1 | 14 | 0.17 |
| (2,357) | 1:A:29:TRP:HA | 1:A:29:TRP:HD1 | 20 | 0.17 |
| (2,35) | 1:A:42:LYS:HD3 | 1:A:42:LYS:HG2 | 20 | 0.17 |
| (2,35) | 1:A:42:LYS:HD3 | 1:A:42:LYS:HG3 | 20 | 0.17 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:5:PHE:HE2 | 7 | 0.17 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:5:PHE:HE1 | 7 | 0.17 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:5:PHE:HE2 | 7 | 0.17 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:5:PHE:HE1 | 7 | 0.17 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:5:PHE:HE2 | 7 | 0.17 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:5:PHE:HE1 | 7 | 0.17 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:5:PHE:HE2 | 11 | 0.17 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:5:PHE:HE1 | 11 | 0.17 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:5:PHE:HE2 | 11 | 0.17 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:5:PHE:HE1 | 11 | 0.17 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:5:PHE:HE2 | 11 | 0.17 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:5:PHE:HE1 | 11 | 0.17 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:23:VAL:H | 3 | 0.17 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:23:VAL:H | 3 | 0.17 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:23:VAL:H | 3 | 0.17 |
| (2,270) | 1:A:19:LYS:HA | 1:A:19:LYS:HE3 | 12 | 0.17 |
| (2,270) | 1:A:19:LYS:HA | 1:A:19:LYS:HE3 | 18 | 0.17 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:21:VAL:HB | 16 | 0.17 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:21:VAL:HB | 16 | 0.17 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:21:VAL:HB | 16 | 0.17 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:21:VAL:HB | 19 | 0.17 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:21:VAL:HB | 19 | 0.17 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:21:VAL:HB | 19 | 0.17 |
| (2,219) | 1:A:12:ASP:HB3 | 1:A:12:ASP:H | 5 | 0.17 |
| (2,219) | 1:A:12:ASP:HB3 | 1:A:12:ASP:H | 19 | 0.17 |
| (2,197) | 1:A:9:SER:HA | 1:A:12:ASP:HB2 | 9 | 0.17 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD13 | 11 | 0.17 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD11 | 11 | 0.17 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD12 | 11 | 0.17 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG12 | 1 | 0.17 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG11 | 1 | 0.17 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG13 | 1 | 0.17 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG12 | 4 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG11 | 4 | 0.17 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG13 | 4 | 0.17 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG12 | 9 | 0.17 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG11 | 9 | 0.17 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG13 | 9 | 0.17 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG12 | 12 | 0.17 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG11 | 12 | 0.17 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG13 | 12 | 0.17 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG12 | 14 | 0.17 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG11 | 14 | 0.17 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG13 | 14 | 0.17 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG12 | 15 | 0.17 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG11 | 15 | 0.17 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG13 | 15 | 0.17 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG12 | 18 | 0.17 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG11 | 18 | 0.17 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG13 | 18 | 0.17 |
| (2,191) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:11:PHE:HD1 | 20 | 0.17 |
| (2,191) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:11:PHE:HD2 | 20 | 0.17 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG13 | 1:A:52:PHE:HB3 | 3 | 0.17 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG12 | 1:A:52:PHE:HB3 | 3 | 0.17 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG11 | 1:A:52:PHE:HB3 | 3 | 0.17 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB1 | 10 | 0.17 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB3 | 10 | 0.17 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB2 | 10 | 0.17 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB1 | 17 | 0.17 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB3 | 17 | 0.17 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB2 | 17 | 0.17 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB1 | 20 | 0.17 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB3 | 20 | 0.17 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB2 | 20 | 0.17 |
| (2,1224) | 1:A:100:ALA:H | 1:A:102:ASN:H | 16 | 0.17 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:100:ALA:H | 2 | 0.17 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:100:ALA:H | 2 | 0.17 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:100:ALA:H | 2 | 0.17 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:100:ALA:H | 9 | 0.17 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:100:ALA:H | 9 | 0.17 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:100:ALA:H | 9 | 0.17 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:100:ALA:H | 12 | 0.17 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:100:ALA:H | 12 | 0.17 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:100:ALA:H | 12 | 0.17 |
| (2,1202) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:42:LYS:H | 20 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|--------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1139) | 1:A:80:ASN:H | 1:A:79:LYS:HB3 | 2 | 0.17 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:43:PHE:HD2 | 11 | 0.17 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:43:PHE:HD1 | 11 | 0.17 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:47:TYR:HD2 | 11 | 0.17 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:47:TYR:HD1 | 11 | 0.17 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:43:PHE:HD2 | 12 | 0.17 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:43:PHE:HD1 | 12 | 0.17 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:47:TYR:HD2 | 12 | 0.17 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:47:TYR:HD1 | 12 | 0.17 |
| (2,1038) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:56:ASP:HB2 | 8 | 0.17 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG21 | 18 | 0.17 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG23 | 18 | 0.17 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG22 | 18 | 0.17 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG21 | 19 | 0.17 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG23 | 19 | 0.17 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG22 | 19 | 0.17 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG21 | 20 | 0.17 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG23 | 20 | 0.17 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG22 | 20 | 0.17 |
| (2,1013) | 1:A:51:ASP:H | 1:A:51:ASP:HB3 | 12 | 0.17 |
| (2,1011) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:51:ASP:H | 18 | 0.17 |
| (2,1009) | 1:A:49:GLN:H | 1:A:49:GLN:HG3 | 8 | 0.17 |
| (2,1002) | 1:A:47:TYR:H | 1:A:44:SER:H | 10 | 0.17 |
| (2,1002) | 1:A:47:TYR:H | 1:A:44:SER:H | 13 | 0.17 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD21 | 11 | 0.17 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD22 | 11 | 0.17 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD23 | 11 | 0.17 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD21 | 11 | 0.17 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD23 | 11 | 0.17 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD22 | 11 | 0.17 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG23 | 11 | 0.17 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG21 | 11 | 0.17 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG22 | 11 | 0.17 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD13 | 11 | 0.17 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD11 | 11 | 0.17 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD12 | 11 | 0.17 |
| (1,7) | 1:A:35:MET:H | 1:A:31:GLY:O | 12 | 0.17 |
| (1,7) | 1:A:35:MET:H | 1:A:31:GLY:O | 13 | 0.17 |
| (1,24) | 1:A:46:GLN:H | 1:A:42:LYS:O | 4 | 0.17 |
| (1,24) | 1:A:46:GLN:H | 1:A:42:LYS:O | 14 | 0.17 |
| (1,22) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:41:GLU:O | 1 | 0.17 |
| (1,15) | 1:A:39:MET:N | 1:A:35:MET:O | 2 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,15) | 1:A:39:MET:N | 1:A:35:MET:O | 11 | 0.17 |
| (1,15) | 1:A:39:MET:N | 1:A:35:MET:O | 12 | 0.17 |
| (2,991) | 1:A:44:SER:H | 1:A:2:VAL:HG13 | 17 | 0.16 |
| (2,991) | 1:A:44:SER:H | 1:A:2:VAL:HG12 | 17 | 0.16 |
| (2,991) | 1:A:44:SER:H | 1:A:2:VAL:HG11 | 17 | 0.16 |
| (2,973) | 1:A:36:ILE:H | 1:A:36:ILE:HD12 | 12 | 0.16 |
| (2,973) | 1:A:36:ILE:H | 1:A:36:ILE:HD11 | 12 | 0.16 |
| (2,973) | 1:A:36:ILE:H | 1:A:36:ILE:HD13 | 12 | 0.16 |
| (2,972) | 1:A:36:ILE:H | 1:A:35:MET:HB2 | 5 | 0.16 |
| (2,94) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:14:ALA:HA | 6 | 0.16 |
| (2,94) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:13:SER:HA | 6 | 0.16 |
| (2,94) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:14:ALA:HA | 15 | 0.16 |
| (2,94) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:13:SER:HA | 15 | 0.16 |
| (2,926) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 8 | 0.16 |
| (2,926) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 8 | 0.16 |
| (2,926) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 8 | 0.16 |
| (2,926) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 12 | 0.16 |
| (2,926) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 12 | 0.16 |
| (2,926) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 12 | 0.16 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:57:VAL:H | 5 | 0.16 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:57:VAL:H | 5 | 0.16 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:57:VAL:H | 5 | 0.16 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:57:VAL:H | 17 | 0.16 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:57:VAL:H | 17 | 0.16 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:57:VAL:H | 17 | 0.16 |
| (2,854) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB2 | 11 | 0.16 |
| (2,826) | 1:A:87:VAL:HG21 | 1:A:95:ILE:HA | 11 | 0.16 |
| (2,826) | 1:A:87:VAL:HG23 | 1:A:95:ILE:HA | 11 | 0.16 |
| (2,826) | 1:A:87:VAL:HG22 | 1:A:95:ILE:HA | 11 | 0.16 |
| (2,826) | 1:A:87:VAL:HG21 | 1:A:95:ILE:HA | 18 | 0.16 |
| (2,826) | 1:A:87:VAL:HG23 | 1:A:95:ILE:HA | 18 | 0.16 |
| (2,826) | 1:A:87:VAL:HG22 | 1:A:95:ILE:HA | 18 | 0.16 |
| (2,821) | 1:A:79:LYS:HB2 | 1:A:82:LYS:H | 13 | 0.16 |
| (2,766) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:96:LYS:HD2 | 1 | 0.16 |
| (2,754) | 1:A:98:ALA:HA | 1:A:102:ASN:H | 8 | 0.16 |
| (2,754) | 1:A:98:ALA:HA | 1:A:102:ASN:H | 18 | 0.16 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG21 | 1 | 0.16 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG22 | 1 | 0.16 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG23 | 1 | 0.16 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG21 | 1 | 0.16 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG22 | 1 | 0.16 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG23 | 1 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG21 | 1 | 0.16 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG22 | 1 | 0.16 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG23 | 1 | 0.16 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG21 | 10 | 0.16 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG22 | 10 | 0.16 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG23 | 1:A:99:ILE:HG23 | 10 | 0.16 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG21 | 10 | 0.16 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG22 | 10 | 0.16 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG21 | 1:A:99:ILE:HG23 | 10 | 0.16 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG21 | 10 | 0.16 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG22 | 10 | 0.16 |
| (2,745) | 1:A:95:ILE:HG22 | 1:A:99:ILE:HG23 | 10 | 0.16 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:85:ALA:HB1 | 10 | 0.16 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:85:ALA:HB2 | 10 | 0.16 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:85:ALA:HB3 | 10 | 0.16 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:85:ALA:HB1 | 10 | 0.16 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:85:ALA:HB2 | 10 | 0.16 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:85:ALA:HB3 | 10 | 0.16 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:85:ALA:HB1 | 10 | 0.16 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:85:ALA:HB2 | 10 | 0.16 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:85:ALA:HB3 | 10 | 0.16 |
| (2,682) | 1:A:46:GLN:HA | 1:A:46:GLN:HG3 | 10 | 0.16 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG11 | 2 | 0.16 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG12 | 2 | 0.16 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG13 | 2 | 0.16 |
| (2,654) | 1:A:78:PHE:HA | 1:A:85:ALA:H | 6 | 0.16 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG11 | 5 | 0.16 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG13 | 5 | 0.16 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG12 | 5 | 0.16 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG11 | 5 | 0.16 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG13 | 5 | 0.16 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG12 | 5 | 0.16 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG11 | 5 | 0.16 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG13 | 5 | 0.16 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG12 | 5 | 0.16 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG11 | 14 | 0.16 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG13 | 14 | 0.16 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG12 | 14 | 0.16 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG11 | 14 | 0.16 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG13 | 14 | 0.16 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG12 | 14 | 0.16 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG11 | 14 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG13 | 14 | 0.16 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG12 | 14 | 0.16 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG11 | 18 | 0.16 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG13 | 18 | 0.16 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG12 | 18 | 0.16 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG11 | 18 | 0.16 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG13 | 18 | 0.16 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG12 | 18 | 0.16 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG11 | 18 | 0.16 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG13 | 18 | 0.16 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG12 | 18 | 0.16 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:H | 3 | 0.16 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:H | 3 | 0.16 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:H | 3 | 0.16 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD13 | 14 | 0.16 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD11 | 14 | 0.16 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD12 | 14 | 0.16 |
| (2,539) | 1:A:77:LEU:HG | 1:A:76:LEU:HA | 17 | 0.16 |
| (2,529) | 1:A:58:ASP:HB2 | 1:A:59:GLU:H | 11 | 0.16 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:58:ASP:HB2 | 17 | 0.16 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:58:ASP:HB2 | 17 | 0.16 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:58:ASP:HB2 | 17 | 0.16 |
| (2,508) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:56:ASP:HA | 15 | 0.16 |
| (2,508) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:56:ASP:HA | 17 | 0.16 |
| (2,498) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HG | 11 | 0.16 |
| (2,487) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:75:LEU:HB2 | 12 | 0.16 |
| (2,487) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:75:LEU:HB2 | 13 | 0.16 |
| (2,487) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:75:LEU:HB2 | 17 | 0.16 |
| (2,487) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:75:LEU:HB2 | 19 | 0.16 |
| (2,47) | 1:A:94:ALA:HA | 1:A:97:GLN:HB2 | 14 | 0.16 |
| (2,47) | 1:A:94:ALA:HA | 1:A:97:GLN:HB3 | 14 | 0.16 |
| (2,47) | 1:A:94:ALA:HA | 1:A:97:GLN:HB2 | 18 | 0.16 |
| (2,47) | 1:A:94:ALA:HA | 1:A:97:GLN:HB3 | 18 | 0.16 |
| (2,461) | 1:A:51:ASP:HA | 1:A:47:TYR:HD2 | 10 | 0.16 |
| (2,461) | 1:A:51:ASP:HA | 1:A:47:TYR:HD1 | 10 | 0.16 |
| (2,456) | 1:A:85:ALA:HB1 | 1:A:97:GLN:HE22 | 4 | 0.16 |
| (2,456) | 1:A:85:ALA:HB2 | 1:A:97:GLN:HE22 | 4 | 0.16 |
| (2,456) | 1:A:85:ALA:HB3 | 1:A:97:GLN:HE22 | 4 | 0.16 |
| (2,450) | 1:A:49:GLN:HA | 1:A:49:GLN:HB2 | 13 | 0.16 |
| (2,442) | 1:A:68:GLU:HG3 | 1:A:68:GLU:H | 1 | 0.16 |
| (2,440) | 1:A:46:GLN:HG2 | 1:A:43:PHE:HD2 | 16 | 0.16 |
| (2,440) | 1:A:46:GLN:HG2 | 1:A:43:PHE:HD1 | 16 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,420) | 1:A:42:LYS:HA | 1:A:44:SER:H | 17 | 0.16 |
| (2,411) | 1:A:40:ILE:HG22 | 1:A:54:LYS:HD2 | 20 | 0.16 |
| (2,411) | 1:A:40:ILE:HG21 | 1:A:54:LYS:HD2 | 20 | 0.16 |
| (2,411) | 1:A:40:ILE:HG23 | 1:A:54:LYS:HD2 | 20 | 0.16 |
| (2,409) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:40:ILE:H | 19 | 0.16 |
| (2,409) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:40:ILE:H | 19 | 0.16 |
| (2,409) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:40:ILE:H | 19 | 0.16 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:92:PRO:HA | 7 | 0.16 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:92:PRO:HA | 7 | 0.16 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:92:PRO:HA | 7 | 0.16 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:92:PRO:HA | 14 | 0.16 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:92:PRO:HA | 14 | 0.16 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:92:PRO:HA | 14 | 0.16 |
| (2,407) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:54:LYS:HD2 | 9 | 0.16 |
| (2,407) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:54:LYS:HD2 | 9 | 0.16 |
| (2,407) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:54:LYS:HD2 | 9 | 0.16 |
| (2,406) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:2:VAL:HG13 | 4 | 0.16 |
| (2,406) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:2:VAL:HG12 | 4 | 0.16 |
| (2,406) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:2:VAL:HG11 | 4 | 0.16 |
| (2,406) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:2:VAL:HG13 | 13 | 0.16 |
| (2,406) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:2:VAL:HG12 | 13 | 0.16 |
| (2,406) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:2:VAL:HG11 | 13 | 0.16 |
| (2,401) | 1:A:40:ILE:HA | 1:A:43:PHE:HB3 | 10 | 0.16 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ALA:HB3 | 20 | 0.16 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ALA:HB1 | 20 | 0.16 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ALA:HB2 | 20 | 0.16 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ALA:HB3 | 20 | 0.16 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ALA:HB1 | 20 | 0.16 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ALA:HB2 | 20 | 0.16 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ALA:HB3 | 20 | 0.16 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ALA:HB1 | 20 | 0.16 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ALA:HB2 | 20 | 0.16 |
| (2,384) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:54:LYS:HD2 | 6 | 0.16 |
| (2,384) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:54:LYS:HD2 | 6 | 0.16 |
| (2,384) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:54:LYS:HD2 | 6 | 0.16 |
| (2,357) | 1:A:29:TRP:HA | 1:A:29:TRP:HD1 | 2 | 0.16 |
| (2,317) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:74:THR:H | 14 | 0.16 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:23:VAL:H | 1 | 0.16 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:23:VAL:H | 1 | 0.16 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:23:VAL:H | 1 | 0.16 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:23:VAL:H | 5 | 0.16 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:23:VAL:H | 5 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:23:VAL:H | 5 | 0.16 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:21:VAL:HA | 12 | 0.16 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:21:VAL:HA | 12 | 0.16 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:21:VAL:HA | 12 | 0.16 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HA | 12 | 0.16 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HA | 12 | 0.16 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HA | 12 | 0.16 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:21:VAL:HA | 15 | 0.16 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:21:VAL:HA | 15 | 0.16 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:21:VAL:HA | 15 | 0.16 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HA | 15 | 0.16 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HA | 15 | 0.16 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HA | 15 | 0.16 |
| (2,284) | 1:A:20:LEU:HG | 1:A:22:VAL:HG11 | 6 | 0.16 |
| (2,284) | 1:A:20:LEU:HG | 1:A:22:VAL:HG13 | 6 | 0.16 |
| (2,284) | 1:A:20:LEU:HG | 1:A:22:VAL:HG12 | 6 | 0.16 |
| (2,219) | 1:A:12:ASP:HB3 | 1:A:12:ASP:H | 20 | 0.16 |
| (2,152) | 1:A:2:VAL:HA | 1:A:2:VAL:HG23 | 4 | 0.16 |
| (2,152) | 1:A:2:VAL:HA | 1:A:2:VAL:HG21 | 4 | 0.16 |
| (2,152) | 1:A:2:VAL:HA | 1:A:2:VAL:HG22 | 4 | 0.16 |
| (2,1294) | 1:A:52:PHE:HE2 | 1:A:44:SER:HB3 | 19 | 0.16 |
| (2,1294) | 1:A:52:PHE:HE1 | 1:A:44:SER:HB3 | 19 | 0.16 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB1 | 12 | 0.16 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB3 | 12 | 0.16 |
| (2,1273) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:98:ALA:HB2 | 12 | 0.16 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG11 | 6 | 0.16 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG12 | 6 | 0.16 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG13 | 6 | 0.16 |
| (2,1224) | 1:A:100:ALA:H | 1:A:102:ASN:H | 18 | 0.16 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:100:ALA:H | 13 | 0.16 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:100:ALA:H | 13 | 0.16 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:100:ALA:H | 13 | 0.16 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:100:ALA:H | 18 | 0.16 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:100:ALA:H | 18 | 0.16 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:100:ALA:H | 18 | 0.16 |
| (2,1202) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:42:LYS:H | 10 | 0.16 |
| (2,1189) | 1:A:96:LYS:H | 1:A:96:LYS:HG3 | 9 | 0.16 |
| (2,1174) | 1:A:87:VAL:H | 1:A:86:LYS:HG2 | 15 | 0.16 |
| (2,1148) | 1:A:79:LYS:H | 1:A:82:LYS:H | 7 | 0.16 |
| (2,1148) | 1:A:79:LYS:H | 1:A:82:LYS:H | 10 | 0.16 |
| (2,1139) | 1:A:80:ASN:H | 1:A:79:LYS:HB3 | 17 | 0.16 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:43:PHE:HD2 | 19 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:43:PHE:HD1 | 19 | 0.16 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:47:TYR:HD2 | 19 | 0.16 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:47:TYR:HD1 | 19 | 0.16 |
| (2,1088) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:25:PHE:HE1 | 19 | 0.16 |
| (2,1088) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:25:PHE:HE2 | 19 | 0.16 |
| (2,1055) | 1:A:60:LEU:H | 1:A:59:GLU:HB3 | 1 | 0.16 |
| (2,1038) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:56:ASP:HB2 | 13 | 0.16 |
| (2,1030) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:2:VAL:HB | 17 | 0.16 |
| (2,1013) | 1:A:51:ASP:H | 1:A:51:ASP:HB3 | 7 | 0.16 |
| (2,1013) | 1:A:51:ASP:H | 1:A:51:ASP:HB3 | 13 | 0.16 |
| (2,1011) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:51:ASP:H | 4 | 0.16 |
| (2,1011) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:51:ASP:H | 20 | 0.16 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD21 | 3 | 0.16 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD22 | 3 | 0.16 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD23 | 3 | 0.16 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD21 | 3 | 0.16 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD23 | 3 | 0.16 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD22 | 3 | 0.16 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG23 | 3 | 0.16 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG21 | 3 | 0.16 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG22 | 3 | 0.16 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD13 | 3 | 0.16 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD11 | 3 | 0.16 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD12 | 3 | 0.16 |
| (1,47) | 1:A:79:LYS:H | 1:A:83:GLU:O | 6 | 0.16 |
| (1,47) | 1:A:79:LYS:H | 1:A:83:GLU:O | 8 | 0.16 |
| (1,47) | 1:A:79:LYS:H | 1:A:83:GLU:O | 17 | 0.16 |
| (1,24) | 1:A:46:GLN:H | 1:A:42:LYS:O | 3 | 0.16 |
| (1,24) | 1:A:46:GLN:H | 1:A:42:LYS:O | 20 | 0.16 |
| (1,15) | 1:A:39:MET:N | 1:A:35:MET:O | 9 | 0.16 |
| (1,15) | 1:A:39:MET:N | 1:A:35:MET:O | 19 | 0.16 |
| (2,94) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:14:ALA:HA | 3 | 0.15 |
| (2,94) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:13:SER:HA | 3 | 0.15 |
| (2,94) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:14:ALA:HA | 7 | 0.15 |
| (2,94) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:13:SER:HA | 7 | 0.15 |
| (2,94) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:14:ALA:HA | 20 | 0.15 |
| (2,94) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:13:SER:HA | 20 | 0.15 |
| (2,928) | 1:A:19:LYS:H | 1:A:18:ASP:HB2 | 20 | 0.15 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:57:VAL:H | 11 | 0.15 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:57:VAL:H | 11 | 0.15 |
| (2,925) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:57:VAL:H | 11 | 0.15 |
| (2,873) | 1:A:7:THR:H | 1:A:5:PHE:HB2 | 8 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,873) | 1:A:7:THR:H | 1:A:5:PHE:HB2 | 13 | 0.15 |
| (2,854) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB2 | 3 | 0.15 |
| (2,854) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB2 | 6 | 0.15 |
| (2,85) | 1:A:90:ALA:HB3 | 1:A:32:PRO:HG2 | 2 | 0.15 |
| (2,85) | 1:A:90:ALA:HB1 | 1:A:32:PRO:HG2 | 2 | 0.15 |
| (2,85) | 1:A:90:ALA:HB2 | 1:A:32:PRO:HG2 | 2 | 0.15 |
| (2,85) | 1:A:90:ALA:HB3 | 1:A:32:PRO:HG3 | 2 | 0.15 |
| (2,85) | 1:A:90:ALA:HB1 | 1:A:32:PRO:HG3 | 2 | 0.15 |
| (2,85) | 1:A:90:ALA:HB2 | 1:A:32:PRO:HG3 | 2 | 0.15 |
| (2,85) | 1:A:90:ALA:HB3 | 1:A:32:PRO:HG2 | 14 | 0.15 |
| (2,85) | 1:A:90:ALA:HB1 | 1:A:32:PRO:HG2 | 14 | 0.15 |
| (2,85) | 1:A:90:ALA:HB2 | 1:A:32:PRO:HG2 | 14 | 0.15 |
| (2,85) | 1:A:90:ALA:HB3 | 1:A:32:PRO:HG3 | 14 | 0.15 |
| (2,85) | 1:A:90:ALA:HB1 | 1:A:32:PRO:HG3 | 14 | 0.15 |
| (2,85) | 1:A:90:ALA:HB2 | 1:A:32:PRO:HG3 | 14 | 0.15 |
| (2,827) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:54:LYS:HD2 | 18 | 0.15 |
| (2,826) | 1:A:87:VAL:HG21 | 1:A:95:ILE:HA | 3 | 0.15 |
| (2,826) | 1:A:87:VAL:HG23 | 1:A:95:ILE:HA | 3 | 0.15 |
| (2,826) | 1:A:87:VAL:HG22 | 1:A:95:ILE:HA | 3 | 0.15 |
| (2,826) | 1:A:87:VAL:HG21 | 1:A:95:ILE:HA | 10 | 0.15 |
| (2,826) | 1:A:87:VAL:HG23 | 1:A:95:ILE:HA | 10 | 0.15 |
| (2,826) | 1:A:87:VAL:HG22 | 1:A:95:ILE:HA | 10 | 0.15 |
| (2,813) | 1:A:55:LEU:HB3 | 1:A:60:LEU:HG | 6 | 0.15 |
| (2,767) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:100:ALA:H | 12 | 0.15 |
| (2,766) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:96:LYS:HD2 | 20 | 0.15 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD13 | 19 | 0.15 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD11 | 19 | 0.15 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD12 | 19 | 0.15 |
| (2,754) | 1:A:98:ALA:HA | 1:A:102:ASN:H | 6 | 0.15 |
| (2,749) | 1:A:96:LYS:HA | 1:A:43:PHE:HD2 | 19 | 0.15 |
| (2,749) | 1:A:96:LYS:HA | 1:A:43:PHE:HD1 | 19 | 0.15 |
| (2,714) | 1:A:88:VAL:HB | 1:A:88:VAL:H | 8 | 0.15 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:85:ALA:HB1 | 17 | 0.15 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:85:ALA:HB2 | 17 | 0.15 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:85:ALA:HB3 | 17 | 0.15 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:85:ALA:HB1 | 17 | 0.15 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:85:ALA:HB2 | 17 | 0.15 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:85:ALA:HB3 | 17 | 0.15 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:85:ALA:HB1 | 17 | 0.15 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:85:ALA:HB2 | 17 | 0.15 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:85:ALA:HB3 | 17 | 0.15 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:20:LEU:HD21 | 4 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:20:LEU:HD22 | 4 | 0.15 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:20:LEU:HD23 | 4 | 0.15 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:20:LEU:HD21 | 4 | 0.15 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:20:LEU:HD22 | 4 | 0.15 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:20:LEU:HD23 | 4 | 0.15 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:20:LEU:HD21 | 4 | 0.15 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:20:LEU:HD22 | 4 | 0.15 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:20:LEU:HD23 | 4 | 0.15 |
| (2,682) | 1:A:46:GLN:HA | 1:A:46:GLN:HG3 | 7 | 0.15 |
| (2,682) | 1:A:46:GLN:HA | 1:A:46:GLN:HG3 | 11 | 0.15 |
| (2,679) | 1:A:82:LYS:HB3 | 1:A:83:GLU:H | 10 | 0.15 |
| (2,667) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG22 | 18 | 0.15 |
| (2,667) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG21 | 18 | 0.15 |
| (2,667) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG23 | 18 | 0.15 |
| (2,663) | 1:A:78:PHE:HB2 | 1:A:21:VAL:HB | 20 | 0.15 |
| (2,654) | 1:A:78:PHE:HA | 1:A:85:ALA:H | 16 | 0.15 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG11 | 10 | 0.15 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG13 | 10 | 0.15 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG12 | 10 | 0.15 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG11 | 10 | 0.15 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG13 | 10 | 0.15 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG12 | 10 | 0.15 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG11 | 10 | 0.15 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG13 | 10 | 0.15 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG12 | 10 | 0.15 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG11 | 15 | 0.15 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG13 | 15 | 0.15 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG12 | 15 | 0.15 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG11 | 15 | 0.15 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG13 | 15 | 0.15 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG12 | 15 | 0.15 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG11 | 15 | 0.15 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG13 | 15 | 0.15 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG12 | 15 | 0.15 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:H | 7 | 0.15 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:H | 7 | 0.15 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:H | 7 | 0.15 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:H | 12 | 0.15 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:H | 12 | 0.15 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:H | 12 | 0.15 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD13 | 1 | 0.15 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD11 | 1 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD12 | 1 | 0.15 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD13 | 10 | 0.15 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD11 | 10 | 0.15 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD12 | 10 | 0.15 |
| (2,539) | 1:A:77:LEU:HG | 1:A:76:LEU:HA | 10 | 0.15 |
| (2,508) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:56:ASP:HA | 1 | 0.15 |
| (2,508) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:56:ASP:HA | 4 | 0.15 |
| (2,498) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HG | 9 | 0.15 |
| (2,487) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:75:LEU:HB2 | 7 | 0.15 |
| (2,479) | 1:A:2:VAL:HA | 1:A:53:TYR:HA | 6 | 0.15 |
| (2,46) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:2:VAL:HG23 | 15 | 0.15 |
| (2,46) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:2:VAL:HG21 | 15 | 0.15 |
| (2,46) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:2:VAL:HG22 | 15 | 0.15 |
| (2,46) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:77:LEU:HD21 | 15 | 0.15 |
| (2,46) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:77:LEU:HD23 | 15 | 0.15 |
| (2,46) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:77:LEU:HD22 | 15 | 0.15 |
| (2,456) | 1:A:85:ALA:HB1 | 1:A:97:GLN:HE22 | 3 | 0.15 |
| (2,456) | 1:A:85:ALA:HB2 | 1:A:97:GLN:HE22 | 3 | 0.15 |
| (2,456) | 1:A:85:ALA:HB3 | 1:A:97:GLN:HE22 | 3 | 0.15 |
| (2,456) | 1:A:85:ALA:HB1 | 1:A:97:GLN:HE22 | 14 | 0.15 |
| (2,456) | 1:A:85:ALA:HB2 | 1:A:97:GLN:HE22 | 14 | 0.15 |
| (2,456) | 1:A:85:ALA:HB3 | 1:A:97:GLN:HE22 | 14 | 0.15 |
| (2,456) | 1:A:85:ALA:HB1 | 1:A:97:GLN:HE22 | 17 | 0.15 |
| (2,456) | 1:A:85:ALA:HB2 | 1:A:97:GLN:HE22 | 17 | 0.15 |
| (2,456) | 1:A:85:ALA:HB3 | 1:A:97:GLN:HE22 | 17 | 0.15 |
| (2,446) | 1:A:47:TYR:HA | 1:A:47:TYR:HD2 | 20 | 0.15 |
| (2,446) | 1:A:47:TYR:HA | 1:A:47:TYR:HD1 | 20 | 0.15 |
| (2,420) | 1:A:42:LYS:HA | 1:A:44:SER:H | 8 | 0.15 |
| (2,414) | 1:A:40:ILE:HG22 | 1:A:41:GLU:H | 2 | 0.15 |
| (2,414) | 1:A:40:ILE:HG21 | 1:A:41:GLU:H | 2 | 0.15 |
| (2,414) | 1:A:40:ILE:HG23 | 1:A:41:GLU:H | 2 | 0.15 |
| (2,414) | 1:A:40:ILE:HG22 | 1:A:41:GLU:H | 10 | 0.15 |
| (2,414) | 1:A:40:ILE:HG21 | 1:A:41:GLU:H | 10 | 0.15 |
| (2,414) | 1:A:40:ILE:HG23 | 1:A:41:GLU:H | 10 | 0.15 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:92:PRO:HA | 10 | 0.15 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:92:PRO:HA | 10 | 0.15 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:92:PRO:HA | 10 | 0.15 |
| (2,406) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:2:VAL:HG13 | 9 | 0.15 |
| (2,406) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:2:VAL:HG12 | 9 | 0.15 |
| (2,406) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:2:VAL:HG11 | 9 | 0.15 |
| (2,406) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:2:VAL:HG13 | 10 | 0.15 |
| (2,406) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:2:VAL:HG12 | 10 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,406) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:2:VAL:HG11 | 10 | 0.15 |
| (2,406) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:2:VAL:HG13 | 12 | 0.15 |
| (2,406) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:2:VAL:HG12 | 12 | 0.15 |
| (2,406) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:2:VAL:HG11 | 12 | 0.15 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ALA:HB3 | 2 | 0.15 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ALA:HB1 | 2 | 0.15 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ALA:HB2 | 2 | 0.15 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ALA:HB3 | 2 | 0.15 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ALA:HB1 | 2 | 0.15 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ALA:HB2 | 2 | 0.15 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ALA:HB3 | 2 | 0.15 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ALA:HB1 | 2 | 0.15 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ALA:HB2 | 2 | 0.15 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ALA:HB3 | 11 | 0.15 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ALA:HB1 | 11 | 0.15 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ALA:HB2 | 11 | 0.15 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ALA:HB3 | 11 | 0.15 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ALA:HB1 | 11 | 0.15 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ALA:HB2 | 11 | 0.15 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ALA:HB3 | 11 | 0.15 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ALA:HB1 | 11 | 0.15 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ALA:HB2 | 11 | 0.15 |
| (2,376) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:36:ILE:HG13 | 10 | 0.15 |
| (2,34) | 1:A:42:LYS:HD3 | 1:A:43:PHE:HA | 8 | 0.15 |
| (2,34) | 1:A:42:LYS:HD2 | 1:A:43:PHE:HA | 8 | 0.15 |
| (2,317) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:74:THR:H | 18 | 0.15 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:5:PHE:HE2 | 1 | 0.15 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:5:PHE:HE1 | 1 | 0.15 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:5:PHE:HE2 | 1 | 0.15 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:5:PHE:HE1 | 1 | 0.15 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:5:PHE:HE2 | 1 | 0.15 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:5:PHE:HE1 | 1 | 0.15 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:5:PHE:HE2 | 2 | 0.15 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:5:PHE:HE1 | 2 | 0.15 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:5:PHE:HE2 | 2 | 0.15 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:5:PHE:HE1 | 2 | 0.15 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:5:PHE:HE2 | 2 | 0.15 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:5:PHE:HE1 | 2 | 0.15 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:5:PHE:HE2 | 18 | 0.15 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:5:PHE:HE1 | 18 | 0.15 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:5:PHE:HE2 | 18 | 0.15 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:5:PHE:HE1 | 18 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:5:PHE:HE2 | 18 | 0.15 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:5:PHE:HE1 | 18 | 0.15 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:23:VAL:H | 8 | 0.15 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:23:VAL:H | 8 | 0.15 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:23:VAL:H | 8 | 0.15 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:23:VAL:H | 12 | 0.15 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:23:VAL:H | 12 | 0.15 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:23:VAL:H | 12 | 0.15 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:23:VAL:H | 13 | 0.15 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:23:VAL:H | 13 | 0.15 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:23:VAL:H | 13 | 0.15 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:23:VAL:H | 14 | 0.15 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:23:VAL:H | 14 | 0.15 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:23:VAL:H | 14 | 0.15 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:23:VAL:H | 19 | 0.15 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:23:VAL:H | 19 | 0.15 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:23:VAL:H | 19 | 0.15 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:21:VAL:HA | 8 | 0.15 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:21:VAL:HA | 8 | 0.15 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:21:VAL:HA | 8 | 0.15 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HA | 8 | 0.15 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HA | 8 | 0.15 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HA | 8 | 0.15 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:21:VAL:HB | 13 | 0.15 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:21:VAL:HB | 13 | 0.15 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:21:VAL:HB | 13 | 0.15 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:21:VAL:HB | 17 | 0.15 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:21:VAL:HB | 17 | 0.15 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:21:VAL:HB | 17 | 0.15 |
| (2,219) | 1:A:12:ASP:HB3 | 1:A:12:ASP:H | 15 | 0.15 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD13 | 12 | 0.15 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD11 | 12 | 0.15 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD12 | 12 | 0.15 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG12 | 10 | 0.15 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG11 | 10 | 0.15 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG13 | 10 | 0.15 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG12 | 17 | 0.15 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG11 | 17 | 0.15 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG13 | 17 | 0.15 |
| (2,191) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:11:PHE:HD1 | 17 | 0.15 |
| (2,191) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:11:PHE:HD2 | 17 | 0.15 |
| (2,191) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:11:PHE:HD1 | 19 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,191) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:11:PHE:HD2 | 19 | 0.15 |
| (2,168) | 1:A:3:THR:HG21 | 1:A:3:THR:H | 4 | 0.15 |
| (2,168) | 1:A:3:THR:HG23 | 1:A:3:THR:H | 4 | 0.15 |
| (2,168) | 1:A:3:THR:HG22 | 1:A:3:THR:H | 4 | 0.15 |
| (2,1281) | 1:A:102:ASN:HD21 | 1:A:20:LEU:HD21 | 4 | 0.15 |
| (2,1281) | 1:A:102:ASN:HD21 | 1:A:20:LEU:HD22 | 4 | 0.15 |
| (2,1281) | 1:A:102:ASN:HD21 | 1:A:20:LEU:HD23 | 4 | 0.15 |
| (2,1281) | 1:A:102:ASN:HD21 | 1:A:20:LEU:HD21 | 19 | 0.15 |
| (2,1281) | 1:A:102:ASN:HD21 | 1:A:20:LEU:HD22 | 19 | 0.15 |
| (2,1281) | 1:A:102:ASN:HD21 | 1:A:20:LEU:HD23 | 19 | 0.15 |
| (2,1236) | 1:A:49:GLN:H | 1:A:47:TYR:HD2 | 15 | 0.15 |
| (2,1236) | 1:A:49:GLN:H | 1:A:47:TYR:HD1 | 15 | 0.15 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG11 | 5 | 0.15 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG12 | 5 | 0.15 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG13 | 5 | 0.15 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG11 | 7 | 0.15 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG12 | 7 | 0.15 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG13 | 7 | 0.15 |
| (2,1224) | 1:A:100:ALA:H | 1:A:102:ASN:H | 9 | 0.15 |
| (2,1155) | 1:A:82:LYS:H | 1:A:82:LYS:HG2 | 11 | 0.15 |
| (2,1148) | 1:A:79:LYS:H | 1:A:82:LYS:H | 4 | 0.15 |
| (2,1148) | 1:A:79:LYS:H | 1:A:82:LYS:H | 15 | 0.15 |
| (2,1148) | 1:A:79:LYS:H | 1:A:82:LYS:H | 17 | 0.15 |
| (2,1139) | 1:A:80:ASN:H | 1:A:79:LYS:HB3 | 9 | 0.15 |
| (2,1038) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:56:ASP:HB2 | 4 | 0.15 |
| (2,1038) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:56:ASP:HB2 | 19 | 0.15 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG21 | 8 | 0.15 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG23 | 8 | 0.15 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG22 | 8 | 0.15 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG21 | 16 | 0.15 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG23 | 16 | 0.15 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG22 | 16 | 0.15 |
| (2,1029) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:53:TYR:HB2 | 15 | 0.15 |
| (2,1015) | 1:A:51:ASP:H | 1:A:20:LEU:HB2 | 9 | 0.15 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD21 | 10 | 0.15 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD22 | 10 | 0.15 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD23 | 10 | 0.15 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD21 | 10 | 0.15 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD23 | 10 | 0.15 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD22 | 10 | 0.15 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG23 | 10 | 0.15 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG21 | 10 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG22 | 10 | 0.15 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD13 | 10 | 0.15 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD11 | 10 | 0.15 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD12 | 10 | 0.15 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD21 | 12 | 0.15 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD22 | 12 | 0.15 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD23 | 12 | 0.15 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD21 | 12 | 0.15 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD23 | 12 | 0.15 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD22 | 12 | 0.15 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG23 | 12 | 0.15 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG21 | 12 | 0.15 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG22 | 12 | 0.15 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD13 | 12 | 0.15 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD11 | 12 | 0.15 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD12 | 12 | 0.15 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD21 | 18 | 0.15 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD22 | 18 | 0.15 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD23 | 18 | 0.15 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD21 | 18 | 0.15 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD23 | 18 | 0.15 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD22 | 18 | 0.15 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG23 | 18 | 0.15 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG21 | 18 | 0.15 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG22 | 18 | 0.15 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD13 | 18 | 0.15 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD11 | 18 | 0.15 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD12 | 18 | 0.15 |
| (1,47) | 1:A:79:LYS:H | 1:A:83:GLU:O | 2 | 0.15 |
| (1,47) | 1:A:79:LYS:H | 1:A:83:GLU:O | 4 | 0.15 |
| (1,47) | 1:A:79:LYS:H | 1:A:83:GLU:O | 7 | 0.15 |
| (1,47) | 1:A:79:LYS:H | 1:A:83:GLU:O | 9 | 0.15 |
| (1,47) | 1:A:79:LYS:H | 1:A:83:GLU:O | 12 | 0.15 |
| (1,47) | 1:A:79:LYS:H | 1:A:83:GLU:O | 18 | 0.15 |
| (1,34) | 1:A:98:ALA:H | 1:A:94:ALA:O | 5 | 0.15 |
| (1,24) | 1:A:46:GLN:H | 1:A:42:LYS:O | 8 | 0.15 |
| (1,22) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:41:GLU:O | 3 | 0.15 |
| (1,22) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:41:GLU:O | 6 | 0.15 |
| (1,22) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:41:GLU:O | 13 | 0.15 |
| (1,15) | 1:A:39:MET:N | 1:A:35:MET:O | 18 | 0.15 |
| (2,978) | 1:A:39:MET:HG3 | 1:A:39:MET:H | 8 | 0.14 |
| (2,978) | 1:A:39:MET:HG3 | 1:A:39:MET:H | 13 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,972) | 1:A:36:ILE:H | 1:A:35:MET:HB2 | 8 | 0.14 |
| (2,972) | 1:A:36:ILE:H | 1:A:35:MET:HB2 | 9 | 0.14 |
| (2,961) | 1:A:27:ALA:H | 1:A:28:THR:HA | 18 | 0.14 |
| (2,94) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:14:ALA:HA | 9 | 0.14 |
| (2,94) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:13:SER:HA | 9 | 0.14 |
| (2,94) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:14:ALA:HA | 12 | 0.14 |
| (2,94) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:13:SER:HA | 12 | 0.14 |
| (2,928) | 1:A:19:LYS:H | 1:A:18:ASP:HB2 | 17 | 0.14 |
| (2,928) | 1:A:19:LYS:H | 1:A:18:ASP:HB2 | 19 | 0.14 |
| (2,926) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 19 | 0.14 |
| (2,926) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 19 | 0.14 |
| (2,926) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 19 | 0.14 |
| (2,854) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB2 | 14 | 0.14 |
| (2,827) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:54:LYS:HD2 | 5 | 0.14 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG11 | 1 | 0.14 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG13 | 1 | 0.14 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG12 | 1 | 0.14 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG11 | 2 | 0.14 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG13 | 2 | 0.14 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG12 | 2 | 0.14 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG11 | 11 | 0.14 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG13 | 11 | 0.14 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG12 | 11 | 0.14 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG11 | 16 | 0.14 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG13 | 16 | 0.14 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG12 | 16 | 0.14 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG11 | 19 | 0.14 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG13 | 19 | 0.14 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG12 | 19 | 0.14 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG11 | 20 | 0.14 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG13 | 20 | 0.14 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG12 | 20 | 0.14 |
| (2,767) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:100:ALA:H | 7 | 0.14 |
| (2,766) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:96:LYS:HD2 | 10 | 0.14 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD13 | 6 | 0.14 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD11 | 6 | 0.14 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD12 | 6 | 0.14 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD13 | 17 | 0.14 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD11 | 17 | 0.14 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD12 | 17 | 0.14 |
| (2,754) | 1:A:98:ALA:HA | 1:A:102:ASN:H | 12 | 0.14 |
| (2,754) | 1:A:98:ALA:HA | 1:A:102:ASN:H | 17 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,749) | 1:A:96:LYS:HA | 1:A:43:PHE:HD2 | 8 | 0.14 |
| (2,749) | 1:A:96:LYS:HA | 1:A:43:PHE:HD1 | 8 | 0.14 |
| (2,749) | 1:A:96:LYS:HA | 1:A:43:PHE:HD2 | 18 | 0.14 |
| (2,749) | 1:A:96:LYS:HA | 1:A:43:PHE:HD1 | 18 | 0.14 |
| (2,714) | 1:A:88:VAL:HB | 1:A:88:VAL:H | 2 | 0.14 |
| (2,687) | 1:A:84:VAL:HB | 1:A:77:LEU:HB2 | 20 | 0.14 |
| (2,685) | 1:A:84:VAL:HA | 1:A:84:VAL:HB | 1 | 0.14 |
| (2,685) | 1:A:84:VAL:HA | 1:A:84:VAL:HB | 10 | 0.14 |
| (2,685) | 1:A:84:VAL:HA | 1:A:84:VAL:HB | 14 | 0.14 |
| (2,685) | 1:A:84:VAL:HA | 1:A:84:VAL:HB | 16 | 0.14 |
| (2,683) | 1:A:46:GLN:HA | 1:A:47:TYR:H | 6 | 0.14 |
| (2,682) | 1:A:46:GLN:HA | 1:A:46:GLN:HG3 | 13 | 0.14 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG11 | 1 | 0.14 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG12 | 1 | 0.14 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG13 | 1 | 0.14 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG11 | 19 | 0.14 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG12 | 19 | 0.14 |
| (2,666) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG13 | 19 | 0.14 |
| (2,661) | 1:A:78:PHE:HB3 | 1:A:21:VAL:HB | 1 | 0.14 |
| (2,661) | 1:A:78:PHE:HB3 | 1:A:21:VAL:HB | 19 | 0.14 |
| (2,654) | 1:A:78:PHE:HA | 1:A:85:ALA:H | 13 | 0.14 |
| (2,654) | 1:A:78:PHE:HA | 1:A:85:ALA:H | 18 | 0.14 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG11 | 8 | 0.14 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG13 | 8 | 0.14 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG12 | 8 | 0.14 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG11 | 8 | 0.14 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG13 | 8 | 0.14 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG12 | 8 | 0.14 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG11 | 8 | 0.14 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG13 | 8 | 0.14 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG12 | 8 | 0.14 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG11 | 16 | 0.14 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG13 | 16 | 0.14 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG12 | 16 | 0.14 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG11 | 16 | 0.14 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG13 | 16 | 0.14 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG12 | 16 | 0.14 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG11 | 16 | 0.14 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG13 | 16 | 0.14 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG12 | 16 | 0.14 |
| (2,577) | 1:A:66:LYS:HA | 1:A:66:LYS:HB3 | 3 | 0.14 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:H | 1 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:H | 1 | 0.14 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:H | 1 | 0.14 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:H | 9 | 0.14 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:H | 9 | 0.14 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:H | 9 | 0.14 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:H | 17 | 0.14 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:H | 17 | 0.14 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:H | 17 | 0.14 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:H | 19 | 0.14 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:H | 19 | 0.14 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:H | 19 | 0.14 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD13 | 7 | 0.14 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD11 | 7 | 0.14 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD12 | 7 | 0.14 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD13 | 16 | 0.14 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD11 | 16 | 0.14 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD12 | 16 | 0.14 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:58:ASP:HB2 | 3 | 0.14 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:58:ASP:HB2 | 3 | 0.14 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:58:ASP:HB2 | 3 | 0.14 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:58:ASP:HB2 | 4 | 0.14 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:58:ASP:HB2 | 4 | 0.14 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:58:ASP:HB2 | 4 | 0.14 |
| (2,498) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HG | 1 | 0.14 |
| (2,493) | 1:A:54:LYS:HE2 | 1:A:40:ILE:HG22 | 2 | 0.14 |
| (2,493) | 1:A:54:LYS:HE2 | 1:A:40:ILE:HG21 | 2 | 0.14 |
| (2,493) | 1:A:54:LYS:HE2 | 1:A:40:ILE:HG23 | 2 | 0.14 |
| (2,472) | 1:A:52:PHE:HA | 1:A:47:TYR:HD2 | 5 | 0.14 |
| (2,472) | 1:A:52:PHE:HA | 1:A:47:TYR:HD1 | 5 | 0.14 |
| (2,472) | 1:A:52:PHE:HA | 1:A:47:TYR:HD2 | 11 | 0.14 |
| (2,472) | 1:A:52:PHE:HA | 1:A:47:TYR:HD1 | 11 | 0.14 |
| (2,47) | 1:A:94:ALA:HA | 1:A:97:GLN:HB2 | 3 | 0.14 |
| (2,47) | 1:A:94:ALA:HA | 1:A:97:GLN:HB3 | 3 | 0.14 |
| (2,47) | 1:A:94:ALA:HA | 1:A:97:GLN:HB2 | 5 | 0.14 |
| (2,47) | 1:A:94:ALA:HA | 1:A:97:GLN:HB3 | 5 | 0.14 |
| (2,461) | 1:A:51:ASP:HA | 1:A:47:TYR:HD2 | 2 | 0.14 |
| (2,461) | 1:A:51:ASP:HA | 1:A:47:TYR:HD1 | 2 | 0.14 |
| (2,461) | 1:A:51:ASP:HA | 1:A:47:TYR:HD2 | 4 | 0.14 |
| (2,461) | 1:A:51:ASP:HA | 1:A:47:TYR:HD1 | 4 | 0.14 |
| (2,461) | 1:A:51:ASP:HA | 1:A:47:TYR:HD2 | 6 | 0.14 |
| (2,461) | 1:A:51:ASP:HA | 1:A:47:TYR:HD1 | 6 | 0.14 |
| (2,46) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:2:VAL:HG23 | 19 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,46) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:2:VAL:HG21 | 19 | 0.14 |
| (2,46) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:2:VAL:HG22 | 19 | 0.14 |
| (2,46) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:77:LEU:HD21 | 19 | 0.14 |
| (2,46) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:77:LEU:HD23 | 19 | 0.14 |
| (2,46) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:77:LEU:HD22 | 19 | 0.14 |
| (2,420) | 1:A:42:LYS:HA | 1:A:44:SER:H | 6 | 0.14 |
| (2,414) | 1:A:40:ILE:HG22 | 1:A:41:GLU:H | 4 | 0.14 |
| (2,414) | 1:A:40:ILE:HG21 | 1:A:41:GLU:H | 4 | 0.14 |
| (2,414) | 1:A:40:ILE:HG23 | 1:A:41:GLU:H | 4 | 0.14 |
| (2,41) | 1:A:49:GLN:HA | 1:A:49:GLN:HG3 | 9 | 0.14 |
| (2,41) | 1:A:49:GLN:HA | 1:A:49:GLN:HG2 | 9 | 0.14 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ALA:HB3 | 5 | 0.14 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ALA:HB1 | 5 | 0.14 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ALA:HB2 | 5 | 0.14 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ALA:HB3 | 5 | 0.14 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ALA:HB1 | 5 | 0.14 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ALA:HB2 | 5 | 0.14 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ALA:HB3 | 5 | 0.14 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ALA:HB1 | 5 | 0.14 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ALA:HB2 | 5 | 0.14 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ALA:HB3 | 6 | 0.14 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ALA:HB1 | 6 | 0.14 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ALA:HB2 | 6 | 0.14 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ALA:HB3 | 6 | 0.14 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ALA:HB1 | 6 | 0.14 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ALA:HB2 | 6 | 0.14 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ALA:HB3 | 6 | 0.14 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ALA:HB1 | 6 | 0.14 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ALA:HB2 | 6 | 0.14 |
| (2,384) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:54:LYS:HD2 | 7 | 0.14 |
| (2,384) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:54:LYS:HD2 | 7 | 0.14 |
| (2,384) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:54:LYS:HD2 | 7 | 0.14 |
| (2,383) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:40:ILE:HB | 4 | 0.14 |
| (2,383) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:40:ILE:HB | 4 | 0.14 |
| (2,383) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:40:ILE:HB | 4 | 0.14 |
| (2,357) | 1:A:29:TRP:HA | 1:A:29:TRP:HD1 | 8 | 0.14 |
| (2,34) | 1:A:42:LYS:HD3 | 1:A:43:PHE:HA | 7 | 0.14 |
| (2,34) | 1:A:42:LYS:HD2 | 1:A:43:PHE:HA | 7 | 0.14 |
| (2,34) | 1:A:42:LYS:HD3 | 1:A:43:PHE:HA | 20 | 0.14 |
| (2,34) | 1:A:42:LYS:HD2 | 1:A:43:PHE:HA | 20 | 0.14 |
| (2,317) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:74:THR:H | 4 | 0.14 |
| (2,317) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:74:THR:H | 9 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,317) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:74:THR:H | 15 | 0.14 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:23:VAL:H | 16 | 0.14 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:23:VAL:H | 16 | 0.14 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:23:VAL:H | 16 | 0.14 |
| (2,270) | 1:A:19:LYS:HA | 1:A:19:LYS:HE3 | 3 | 0.14 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB2 | 15 | 0.14 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB1 | 15 | 0.14 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB3 | 15 | 0.14 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:21:VAL:HB | 8 | 0.14 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:21:VAL:HB | 8 | 0.14 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:21:VAL:HB | 8 | 0.14 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:21:VAL:HB | 10 | 0.14 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:21:VAL:HB | 10 | 0.14 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:21:VAL:HB | 10 | 0.14 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:21:VAL:HB | 15 | 0.14 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:21:VAL:HB | 15 | 0.14 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:21:VAL:HB | 15 | 0.14 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD13 | 5 | 0.14 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD11 | 5 | 0.14 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD12 | 5 | 0.14 |
| (2,1290) | 1:A:5:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 7 | 0.14 |
| (2,1290) | 1:A:5:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 7 | 0.14 |
| (2,1281) | 1:A:102:ASN:HD21 | 1:A:20:LEU:HD21 | 1 | 0.14 |
| (2,1281) | 1:A:102:ASN:HD21 | 1:A:20:LEU:HD22 | 1 | 0.14 |
| (2,1281) | 1:A:102:ASN:HD21 | 1:A:20:LEU:HD23 | 1 | 0.14 |
| (2,1281) | 1:A:102:ASN:HD21 | 1:A:20:LEU:HD21 | 6 | 0.14 |
| (2,1281) | 1:A:102:ASN:HD21 | 1:A:20:LEU:HD22 | 6 | 0.14 |
| (2,1281) | 1:A:102:ASN:HD21 | 1:A:20:LEU:HD23 | 6 | 0.14 |
| (2,1281) | 1:A:102:ASN:HD21 | 1:A:20:LEU:HD21 | 15 | 0.14 |
| (2,1281) | 1:A:102:ASN:HD21 | 1:A:20:LEU:HD22 | 15 | 0.14 |
| (2,1281) | 1:A:102:ASN:HD21 | 1:A:20:LEU:HD23 | 15 | 0.14 |
| (2,1281) | 1:A:102:ASN:HD21 | 1:A:20:LEU:HD21 | 17 | 0.14 |
| (2,1281) | 1:A:102:ASN:HD21 | 1:A:20:LEU:HD22 | 17 | 0.14 |
| (2,1281) | 1:A:102:ASN:HD21 | 1:A:20:LEU:HD23 | 17 | 0.14 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG11 | 9 | 0.14 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG12 | 9 | 0.14 |
| (2,1231) | 1:A:103:ALA:H | 1:A:84:VAL:HG13 | 9 | 0.14 |
| (2,1224) | 1:A:100:ALA:H | 1:A:102:ASN:H | 10 | 0.14 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:100:ALA:H | 7 | 0.14 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:100:ALA:H | 7 | 0.14 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:100:ALA:H | 7 | 0.14 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:100:ALA:H | 11 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:100:ALA:H | 11 | 0.14 |
| (2,1214) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:100:ALA:H | 11 | 0.14 |
| (2,1202) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:42:LYS:H | 11 | 0.14 |
| (2,1202) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:42:LYS:H | 19 | 0.14 |
| (2,1171) | 1:A:86:LYS:HB2 | 1:A:86:LYS:H | 12 | 0.14 |
| (2,1139) | 1:A:80:ASN:H | 1:A:79:LYS:HB3 | 20 | 0.14 |
| (2,1038) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:56:ASP:HB2 | 9 | 0.14 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 1 | 0.14 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 1 | 0.14 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 1 | 0.14 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 8 | 0.14 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 8 | 0.14 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 8 | 0.14 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 20 | 0.14 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 20 | 0.14 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 20 | 0.14 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG21 | 1 | 0.14 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG23 | 1 | 0.14 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG22 | 1 | 0.14 |
| (2,1030) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:2:VAL:HB | 12 | 0.14 |
| (2,1029) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:53:TYR:HB2 | 14 | 0.14 |
| (2,1017) | 1:A:52:PHE:H | 1:A:47:TYR:HD2 | 2 | 0.14 |
| (2,1017) | 1:A:52:PHE:H | 1:A:47:TYR:HD1 | 2 | 0.14 |
| (2,1011) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:51:ASP:H | 3 | 0.14 |
| (2,1011) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:51:ASP:H | 7 | 0.14 |
| (2,1011) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:51:ASP:H | 8 | 0.14 |
| (2,1005) | 1:A:47:TYR:H | 1:A:43:PHE:HA | 1 | 0.14 |
| (2,1005) | 1:A:47:TYR:H | 1:A:43:PHE:HA | 5 | 0.14 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD21 | 1 | 0.14 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD22 | 1 | 0.14 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD23 | 1 | 0.14 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD21 | 1 | 0.14 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD23 | 1 | 0.14 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD22 | 1 | 0.14 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG23 | 1 | 0.14 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG21 | 1 | 0.14 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG22 | 1 | 0.14 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD13 | 1 | 0.14 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD11 | 1 | 0.14 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD12 | 1 | 0.14 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD21 | 2 | 0.14 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD22 | 2 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD23 | 2 | 0.14 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD21 | 2 | 0.14 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD23 | 2 | 0.14 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD22 | 2 | 0.14 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG23 | 2 | 0.14 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG21 | 2 | 0.14 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG22 | 2 | 0.14 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD13 | 2 | 0.14 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD11 | 2 | 0.14 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD12 | 2 | 0.14 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD21 | 17 | 0.14 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD22 | 17 | 0.14 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD23 | 17 | 0.14 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD21 | 17 | 0.14 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD23 | 17 | 0.14 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD22 | 17 | 0.14 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG23 | 17 | 0.14 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG21 | 17 | 0.14 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG22 | 17 | 0.14 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD13 | 17 | 0.14 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD11 | 17 | 0.14 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD12 | 17 | 0.14 |
| (1,7) | 1:A:35:MET:H | 1:A:31:GLY:O | 1 | 0.14 |
| (1,7) | 1:A:35:MET:H | 1:A:31:GLY:O | 8 | 0.14 |
| (1,47) | 1:A:79:LYS:H | 1:A:83:GLU:O | 16 | 0.14 |
| (1,47) | 1:A:79:LYS:H | 1:A:83:GLU:O | 19 | 0.14 |
| (1,47) | 1:A:79:LYS:H | 1:A:83:GLU:O | 20 | 0.14 |
| (1,34) | 1:A:98:ALA:H | 1:A:94:ALA:O | 1 | 0.14 |
| (1,34) | 1:A:98:ALA:H | 1:A:94:ALA:O | 7 | 0.14 |
| (1,24) | 1:A:46:GLN:H | 1:A:42:LYS:O | 2 | 0.14 |
| (1,22) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:41:GLU:O | 12 | 0.14 |
| (1,22) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:41:GLU:O | 16 | 0.14 |
| (1,15) | 1:A:39:MET:N | 1:A:35:MET:O | 3 | 0.14 |
| (2,998) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:46:GLN:HG3 | 4 | 0.13 |
| (2,978) | 1:A:39:MET:HG3 | 1:A:39:MET:H | 5 | 0.13 |
| (2,973) | 1:A:36:ILE:H | 1:A:36:ILE:HD12 | 10 | 0.13 |
| (2,973) | 1:A:36:ILE:H | 1:A:36:ILE:HD11 | 10 | 0.13 |
| (2,973) | 1:A:36:ILE:H | 1:A:36:ILE:HD13 | 10 | 0.13 |
| (2,972) | 1:A:36:ILE:H | 1:A:35:MET:HB2 | 2 | 0.13 |
| (2,972) | 1:A:36:ILE:H | 1:A:35:MET:HB2 | 19 | 0.13 |
| (2,94) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:14:ALA:HA | 16 | 0.13 |
| (2,94) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:13:SER:HA | 16 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,926) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 7 | 0.13 |
| (2,926) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 7 | 0.13 |
| (2,926) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 7 | 0.13 |
| (2,926) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 9 | 0.13 |
| (2,926) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 9 | 0.13 |
| (2,926) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 9 | 0.13 |
| (2,926) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 11 | 0.13 |
| (2,926) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 11 | 0.13 |
| (2,926) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 11 | 0.13 |
| (2,926) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 13 | 0.13 |
| (2,926) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 13 | 0.13 |
| (2,926) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 13 | 0.13 |
| (2,905) | 1:A:15:ILE:H | 1:A:15:ILE:HG13 | 20 | 0.13 |
| (2,863) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 6 | 0.13 |
| (2,863) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 6 | 0.13 |
| (2,863) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 6 | 0.13 |
| (2,863) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 7 | 0.13 |
| (2,863) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 7 | 0.13 |
| (2,863) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 7 | 0.13 |
| (2,826) | 1:A:87:VAL:HG21 | 1:A:95:ILE:HA | 9 | 0.13 |
| (2,826) | 1:A:87:VAL:HG23 | 1:A:95:ILE:HA | 9 | 0.13 |
| (2,826) | 1:A:87:VAL:HG22 | 1:A:95:ILE:HA | 9 | 0.13 |
| (2,826) | 1:A:87:VAL:HG21 | 1:A:95:ILE:HA | 12 | 0.13 |
| (2,826) | 1:A:87:VAL:HG23 | 1:A:95:ILE:HA | 12 | 0.13 |
| (2,826) | 1:A:87:VAL:HG22 | 1:A:95:ILE:HA | 12 | 0.13 |
| (2,826) | 1:A:87:VAL:HG21 | 1:A:95:ILE:HA | 14 | 0.13 |
| (2,826) | 1:A:87:VAL:HG23 | 1:A:95:ILE:HA | 14 | 0.13 |
| (2,826) | 1:A:87:VAL:HG22 | 1:A:95:ILE:HA | 14 | 0.13 |
| (2,814) | 1:A:55:LEU:HB3 | 1:A:25:PHE:HD1 | 15 | 0.13 |
| (2,814) | 1:A:55:LEU:HB3 | 1:A:25:PHE:HD2 | 15 | 0.13 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG11 | 3 | 0.13 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG13 | 3 | 0.13 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG12 | 3 | 0.13 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG11 | 15 | 0.13 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG13 | 15 | 0.13 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG12 | 15 | 0.13 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG11 | 17 | 0.13 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG13 | 17 | 0.13 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG12 | 17 | 0.13 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG11 | 18 | 0.13 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG13 | 18 | 0.13 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG12 | 18 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD13 | 3 | 0.13 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD11 | 3 | 0.13 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD12 | 3 | 0.13 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD13 | 5 | 0.13 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD11 | 5 | 0.13 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD12 | 5 | 0.13 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD13 | 8 | 0.13 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD11 | 8 | 0.13 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD12 | 8 | 0.13 |
| (2,754) | 1:A:98:ALA:HA | 1:A:102:ASN:H | 3 | 0.13 |
| (2,741) | 1:A:95:ILE:HB | 1:A:92:PRO:HA | 4 | 0.13 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:20:LEU:HD21 | 11 | 0.13 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:20:LEU:HD22 | 11 | 0.13 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:20:LEU:HD23 | 11 | 0.13 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:20:LEU:HD21 | 11 | 0.13 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:20:LEU:HD22 | 11 | 0.13 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:20:LEU:HD23 | 11 | 0.13 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:20:LEU:HD21 | 11 | 0.13 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:20:LEU:HD22 | 11 | 0.13 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:20:LEU:HD23 | 11 | 0.13 |
| (2,695) | 1:A:87:VAL:HG12 | 1:A:89:GLY:H | 14 | 0.13 |
| (2,695) | 1:A:87:VAL:HG11 | 1:A:89:GLY:H | 14 | 0.13 |
| (2,695) | 1:A:87:VAL:HG13 | 1:A:89:GLY:H | 14 | 0.13 |
| (2,685) | 1:A:84:VAL:HA | 1:A:84:VAL:HB | 2 | 0.13 |
| (2,685) | 1:A:84:VAL:HA | 1:A:84:VAL:HB | 5 | 0.13 |
| (2,685) | 1:A:84:VAL:HA | 1:A:84:VAL:HB | 6 | 0.13 |
| (2,685) | 1:A:84:VAL:HA | 1:A:84:VAL:HB | 7 | 0.13 |
| (2,685) | 1:A:84:VAL:HA | 1:A:84:VAL:HB | 12 | 0.13 |
| (2,685) | 1:A:84:VAL:HA | 1:A:84:VAL:HB | 17 | 0.13 |
| (2,682) | 1:A:46:GLN:HA | 1:A:46:GLN:HG3 | 18 | 0.13 |
| (2,67) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG11 | 7 | 0.13 |
| (2,67) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG12 | 7 | 0.13 |
| (2,67) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG13 | 7 | 0.13 |
| (2,67) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:77:LEU:HG | 7 | 0.13 |
| (2,67) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:77:LEU:HG | 7 | 0.13 |
| (2,67) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:77:LEU:HG | 7 | 0.13 |
| (2,661) | 1:A:78:PHE:HB3 | 1:A:21:VAL:HB | 3 | 0.13 |
| (2,654) | 1:A:78:PHE:HA | 1:A:85:ALA:H | 3 | 0.13 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG11 | 6 | 0.13 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG13 | 6 | 0.13 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG12 | 6 | 0.13 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG11 | 6 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG13 | 6 | 0.13 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG12 | 6 | 0.13 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG11 | 6 | 0.13 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG13 | 6 | 0.13 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG12 | 6 | 0.13 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG11 | 9 | 0.13 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG13 | 9 | 0.13 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HG12 | 9 | 0.13 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG11 | 9 | 0.13 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG13 | 9 | 0.13 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HG12 | 9 | 0.13 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG11 | 9 | 0.13 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG13 | 9 | 0.13 |
| (2,650) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HG12 | 9 | 0.13 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:H | 4 | 0.13 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:H | 4 | 0.13 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:H | 4 | 0.13 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:H | 6 | 0.13 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:H | 6 | 0.13 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:H | 6 | 0.13 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:H | 15 | 0.13 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:H | 15 | 0.13 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:H | 15 | 0.13 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD13 | 4 | 0.13 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD11 | 4 | 0.13 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD12 | 4 | 0.13 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD13 | 5 | 0.13 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD11 | 5 | 0.13 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD12 | 5 | 0.13 |
| (2,493) | 1:A:54:LYS:HE2 | 1:A:40:ILE:HG22 | 3 | 0.13 |
| (2,493) | 1:A:54:LYS:HE2 | 1:A:40:ILE:HG21 | 3 | 0.13 |
| (2,493) | 1:A:54:LYS:HE2 | 1:A:40:ILE:HG23 | 3 | 0.13 |
| (2,485) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:24:ALA:HB1 | 3 | 0.13 |
| (2,485) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:24:ALA:HB2 | 3 | 0.13 |
| (2,485) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:24:ALA:HB3 | 3 | 0.13 |
| (2,479) | 1:A:2:VAL:HA | 1:A:53:TYR:HA | 14 | 0.13 |
| (2,47) | 1:A:94:ALA:HA | 1:A:97:GLN:HB2 | 2 | 0.13 |
| (2,47) | 1:A:94:ALA:HA | 1:A:97:GLN:HB3 | 2 | 0.13 |
| (2,46) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:2:VAL:HG23 | 5 | 0.13 |
| (2,46) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:2:VAL:HG21 | 5 | 0.13 |
| (2,46) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:2:VAL:HG22 | 5 | 0.13 |
| (2,46) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:77:LEU:HD21 | 5 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,46) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:77:LEU:HD23 | 5 | 0.13 |
| (2,46) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:77:LEU:HD22 | 5 | 0.13 |
| (2,456) | 1:A:85:ALA:HB1 | 1:A:97:GLN:HE22 | 6 | 0.13 |
| (2,456) | 1:A:85:ALA:HB2 | 1:A:97:GLN:HE22 | 6 | 0.13 |
| (2,456) | 1:A:85:ALA:HB3 | 1:A:97:GLN:HE22 | 6 | 0.13 |
| (2,456) | 1:A:85:ALA:HB1 | 1:A:97:GLN:HE22 | 20 | 0.13 |
| (2,456) | 1:A:85:ALA:HB2 | 1:A:97:GLN:HE22 | 20 | 0.13 |
| (2,456) | 1:A:85:ALA:HB3 | 1:A:97:GLN:HE22 | 20 | 0.13 |
| (2,447) | 1:A:47:TYR:HA | 1:A:50:ALA:HB1 | 4 | 0.13 |
| (2,447) | 1:A:47:TYR:HA | 1:A:50:ALA:HB2 | 4 | 0.13 |
| (2,447) | 1:A:47:TYR:HA | 1:A:50:ALA:HB3 | 4 | 0.13 |
| (2,440) | 1:A:46:GLN:HG2 | 1:A:43:PHE:HD2 | 14 | 0.13 |
| (2,440) | 1:A:46:GLN:HG2 | 1:A:43:PHE:HD1 | 14 | 0.13 |
| (2,438) | 1:A:46:GLN:HB3 | 1:A:43:PHE:HA | 16 | 0.13 |
| (2,438) | 1:A:46:GLN:HB3 | 1:A:43:PHE:HA | 18 | 0.13 |
| (2,436) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:42:LYS:HA | 2 | 0.13 |
| (2,420) | 1:A:42:LYS:HA | 1:A:44:SER:H | 19 | 0.13 |
| (2,406) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:2:VAL:HG13 | 17 | 0.13 |
| (2,406) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:2:VAL:HG12 | 17 | 0.13 |
| (2,406) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:2:VAL:HG11 | 17 | 0.13 |
| (2,401) | 1:A:40:ILE:HA | 1:A:43:PHE:HB3 | 14 | 0.13 |
| (2,34) | 1:A:42:LYS:HD3 | 1:A:43:PHE:HA | 3 | 0.13 |
| (2,34) | 1:A:42:LYS:HD2 | 1:A:43:PHE:HA | 3 | 0.13 |
| (2,34) | 1:A:42:LYS:HD3 | 1:A:43:PHE:HA | 6 | 0.13 |
| (2,34) | 1:A:42:LYS:HD2 | 1:A:43:PHE:HA | 6 | 0.13 |
| (2,34) | 1:A:42:LYS:HD3 | 1:A:43:PHE:HA | 12 | 0.13 |
| (2,34) | 1:A:42:LYS:HD2 | 1:A:43:PHE:HA | 12 | 0.13 |
| (2,319) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:25:PHE:HB2 | 2 | 0.13 |
| (2,319) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:25:PHE:HB2 | 3 | 0.13 |
| (2,319) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:25:PHE:HB2 | 4 | 0.13 |
| (2,319) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:25:PHE:HB2 | 11 | 0.13 |
| (2,319) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:25:PHE:HB2 | 13 | 0.13 |
| (2,319) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:25:PHE:HB2 | 18 | 0.13 |
| (2,317) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:74:THR:H | 10 | 0.13 |
| (2,317) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:74:THR:H | 11 | 0.13 |
| (2,311) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:23:VAL:HG21 | 15 | 0.13 |
| (2,311) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:23:VAL:HG23 | 15 | 0.13 |
| (2,311) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:23:VAL:HG22 | 15 | 0.13 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:23:VAL:H | 17 | 0.13 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:23:VAL:H | 17 | 0.13 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:23:VAL:H | 17 | 0.13 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:21:VAL:HA | 4 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:21:VAL:HA | 4 | 0.13 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:21:VAL:HA | 4 | 0.13 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HA | 4 | 0.13 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HA | 4 | 0.13 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HA | 4 | 0.13 |
| (2,284) | 1:A:20:LEU:HG | 1:A:22:VAL:HG11 | 10 | 0.13 |
| (2,284) | 1:A:20:LEU:HG | 1:A:22:VAL:HG13 | 10 | 0.13 |
| (2,284) | 1:A:20:LEU:HG | 1:A:22:VAL:HG12 | 10 | 0.13 |
| (2,276) | 1:A:25:PHE:HA | 1:A:57:VAL:HG23 | 6 | 0.13 |
| (2,276) | 1:A:25:PHE:HA | 1:A:57:VAL:HG21 | 6 | 0.13 |
| (2,276) | 1:A:25:PHE:HA | 1:A:57:VAL:HG22 | 6 | 0.13 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB2 | 6 | 0.13 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB1 | 6 | 0.13 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB3 | 6 | 0.13 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:21:VAL:HB | 3 | 0.13 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:21:VAL:HB | 3 | 0.13 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:21:VAL:HB | 3 | 0.13 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG12 | 19 | 0.13 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG11 | 19 | 0.13 |
| (2,194) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:63:VAL:HG13 | 19 | 0.13 |
| (2,163) | 1:A:2:VAL:HA | 1:A:2:VAL:HG13 | 6 | 0.13 |
| (2,163) | 1:A:2:VAL:HA | 1:A:2:VAL:HG12 | 6 | 0.13 |
| (2,163) | 1:A:2:VAL:HA | 1:A:2:VAL:HG11 | 6 | 0.13 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG13 | 1:A:52:PHE:HB3 | 19 | 0.13 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG12 | 1:A:52:PHE:HB3 | 19 | 0.13 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG11 | 1:A:52:PHE:HB3 | 19 | 0.13 |
| (2,137) | 1:A:101:ALA:H | 1:A:98:ALA:HB1 | 10 | 0.13 |
| (2,137) | 1:A:101:ALA:H | 1:A:98:ALA:HB3 | 10 | 0.13 |
| (2,137) | 1:A:101:ALA:H | 1:A:98:ALA:HB2 | 10 | 0.13 |
| (2,137) | 1:A:98:ALA:HB1 | 1:A:97:GLN:H | 10 | 0.13 |
| (2,137) | 1:A:98:ALA:HB3 | 1:A:97:GLN:H | 10 | 0.13 |
| (2,137) | 1:A:98:ALA:HB2 | 1:A:97:GLN:H | 10 | 0.13 |
| (2,137) | 1:A:97:GLN:H | 1:A:96:LYS:HG3 | 10 | 0.13 |
| (2,1294) | 1:A:52:PHE:HE2 | 1:A:44:SER:HB3 | 8 | 0.13 |
| (2,1294) | 1:A:52:PHE:HE1 | 1:A:44:SER:HB3 | 8 | 0.13 |
| (2,1290) | 1:A:5:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 3 | 0.13 |
| (2,1290) | 1:A:5:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 3 | 0.13 |
| (2,1290) | 1:A:5:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 13 | 0.13 |
| (2,1290) | 1:A:5:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 13 | 0.13 |
| (2,1290) | 1:A:5:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 14 | 0.13 |
| (2,1290) | 1:A:5:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 14 | 0.13 |
| (2,1290) | 1:A:5:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 15 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1290) | 1:A:5:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 15 | 0.13 |
| (2,1290) | 1:A:5:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 17 | 0.13 |
| (2,1290) | 1:A:5:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 17 | 0.13 |
| (2,1290) | 1:A:5:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 18 | 0.13 |
| (2,1290) | 1:A:5:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 18 | 0.13 |
| (2,1281) | 1:A:102:ASN:HD21 | 1:A:20:LEU:HD21 | 20 | 0.13 |
| (2,1281) | 1:A:102:ASN:HD21 | 1:A:20:LEU:HD22 | 20 | 0.13 |
| (2,1281) | 1:A:102:ASN:HD21 | 1:A:20:LEU:HD23 | 20 | 0.13 |
| (2,1264) | 1:A:49:GLN:HE21 | 1:A:49:GLN:HB3 | 2 | 0.13 |
| (2,1242) | 1:A:4:GLN:HE22 | 1:A:6:LYS:HB3 | 3 | 0.13 |
| (2,1202) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:42:LYS:H | 8 | 0.13 |
| (2,1202) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:42:LYS:H | 15 | 0.13 |
| (2,1164) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:84:VAL:H | 13 | 0.13 |
| (2,1164) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:84:VAL:H | 13 | 0.13 |
| (2,1164) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:84:VAL:H | 13 | 0.13 |
| (2,1148) | 1:A:79:LYS:H | 1:A:82:LYS:H | 1 | 0.13 |
| (2,1148) | 1:A:79:LYS:H | 1:A:82:LYS:H | 2 | 0.13 |
| (2,1148) | 1:A:79:LYS:H | 1:A:82:LYS:H | 3 | 0.13 |
| (2,1079) | 1:A:65:GLN:H | 1:A:66:LYS:HB2 | 7 | 0.13 |
| (2,1079) | 1:A:65:GLN:H | 1:A:66:LYS:HB2 | 14 | 0.13 |
| (2,1079) | 1:A:65:GLN:H | 1:A:66:LYS:HB2 | 17 | 0.13 |
| (2,1079) | 1:A:65:GLN:H | 1:A:66:LYS:HB2 | 20 | 0.13 |
| (2,104) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:43:PHE:HB3 | 13 | 0.13 |
| (2,104) | 1:A:41:GLU:H | 1:A:44:SER:HB2 | 13 | 0.13 |
| (2,1037) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:56:ASP:HB3 | 12 | 0.13 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 5 | 0.13 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 5 | 0.13 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 5 | 0.13 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 17 | 0.13 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 17 | 0.13 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 17 | 0.13 |
| (2,1033) | 1:A:5:PHE:H | 1:A:55:LEU:H | 20 | 0.13 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG21 | 7 | 0.13 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG23 | 7 | 0.13 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG22 | 7 | 0.13 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG21 | 17 | 0.13 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG23 | 17 | 0.13 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG22 | 17 | 0.13 |
| (2,1013) | 1:A:51:ASP:H | 1:A:51:ASP:HB3 | 11 | 0.13 |
| (2,1011) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:51:ASP:H | 2 | 0.13 |
| (1,5) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:12:ASP:O | 20 | 0.13 |
| (1,47) | 1:A:79:LYS:H | 1:A:83:GLU:O | 3 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,47) | 1:A:79:LYS:H | 1:A:83:GLU:O | 14 | 0.13 |
| (1,36) | 1:A:101:ALA:H | 1:A:97:GLN:O | 10 | 0.13 |
| (1,35) | 1:A:98:ALA:N | 1:A:94:ALA:O | 10 | 0.13 |
| (1,34) | 1:A:98:ALA:H | 1:A:94:ALA:O | 14 | 0.13 |
| (1,34) | 1:A:98:ALA:H | 1:A:94:ALA:O | 16 | 0.13 |
| (1,34) | 1:A:98:ALA:H | 1:A:94:ALA:O | 18 | 0.13 |
| (1,15) | 1:A:39:MET:N | 1:A:35:MET:O | 10 | 0.13 |
| (2,998) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:46:GLN:HG3 | 6 | 0.12 |
| (2,998) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:46:GLN:HG3 | 17 | 0.12 |
| (2,978) | 1:A:39:MET:HG3 | 1:A:39:MET:H | 17 | 0.12 |
| (2,972) | 1:A:36:ILE:H | 1:A:35:MET:HB2 | 12 | 0.12 |
| (2,969) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:33:CYS:H | 13 | 0.12 |
| (2,958) | 1:A:26:TYR:H | 1:A:57:VAL:HG23 | 13 | 0.12 |
| (2,958) | 1:A:26:TYR:H | 1:A:57:VAL:HG21 | 13 | 0.12 |
| (2,958) | 1:A:26:TYR:H | 1:A:57:VAL:HG22 | 13 | 0.12 |
| (2,928) | 1:A:19:LYS:H | 1:A:18:ASP:HB2 | 8 | 0.12 |
| (2,926) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 1 | 0.12 |
| (2,926) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 1 | 0.12 |
| (2,926) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 1 | 0.12 |
| (2,85) | 1:A:90:ALA:HB3 | 1:A:32:PRO:HG2 | 11 | 0.12 |
| (2,85) | 1:A:90:ALA:HB1 | 1:A:32:PRO:HG2 | 11 | 0.12 |
| (2,85) | 1:A:90:ALA:HB2 | 1:A:32:PRO:HG2 | 11 | 0.12 |
| (2,85) | 1:A:90:ALA:HB3 | 1:A:32:PRO:HG3 | 11 | 0.12 |
| (2,85) | 1:A:90:ALA:HB1 | 1:A:32:PRO:HG3 | 11 | 0.12 |
| (2,85) | 1:A:90:ALA:HB2 | 1:A:32:PRO:HG3 | 11 | 0.12 |
| (2,827) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:54:LYS:HD2 | 17 | 0.12 |
| (2,826) | 1:A:87:VAL:HG21 | 1:A:95:ILE:HA | 13 | 0.12 |
| (2,826) | 1:A:87:VAL:HG23 | 1:A:95:ILE:HA | 13 | 0.12 |
| (2,826) | 1:A:87:VAL:HG22 | 1:A:95:ILE:HA | 13 | 0.12 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG11 | 5 | 0.12 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG13 | 5 | 0.12 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG12 | 5 | 0.12 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG11 | 6 | 0.12 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG13 | 6 | 0.12 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG12 | 6 | 0.12 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG11 | 8 | 0.12 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG13 | 8 | 0.12 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG12 | 8 | 0.12 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG11 | 10 | 0.12 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG13 | 10 | 0.12 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG12 | 10 | 0.12 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG11 | 14 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG13 | 14 | 0.12 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG12 | 14 | 0.12 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD13 | 1 | 0.12 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD11 | 1 | 0.12 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD12 | 1 | 0.12 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD13 | 2 | 0.12 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD11 | 2 | 0.12 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD12 | 2 | 0.12 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD13 | 7 | 0.12 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD11 | 7 | 0.12 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD12 | 7 | 0.12 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD13 | 11 | 0.12 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD11 | 11 | 0.12 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD12 | 11 | 0.12 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD13 | 13 | 0.12 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD11 | 13 | 0.12 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD12 | 13 | 0.12 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD13 | 18 | 0.12 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD11 | 18 | 0.12 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD12 | 18 | 0.12 |
| (2,749) | 1:A:96:LYS:HA | 1:A:43:PHE:HD2 | 7 | 0.12 |
| (2,749) | 1:A:96:LYS:HA | 1:A:43:PHE:HD1 | 7 | 0.12 |
| (2,719) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:86:LYS:HE3 | 17 | 0.12 |
| (2,719) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:86:LYS:HE3 | 17 | 0.12 |
| (2,719) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:86:LYS:HE3 | 17 | 0.12 |
| (2,695) | 1:A:87:VAL:HG12 | 1:A:89:GLY:H | 16 | 0.12 |
| (2,695) | 1:A:87:VAL:HG11 | 1:A:89:GLY:H | 16 | 0.12 |
| (2,695) | 1:A:87:VAL:HG13 | 1:A:89:GLY:H | 16 | 0.12 |
| (2,685) | 1:A:84:VAL:HA | 1:A:84:VAL:HB | 3 | 0.12 |
| (2,685) | 1:A:84:VAL:HA | 1:A:84:VAL:HB | 8 | 0.12 |
| (2,685) | 1:A:84:VAL:HA | 1:A:84:VAL:HB | 9 | 0.12 |
| (2,685) | 1:A:84:VAL:HA | 1:A:84:VAL:HB | 15 | 0.12 |
| (2,661) | 1:A:78:PHE:HB3 | 1:A:21:VAL:HB | 10 | 0.12 |
| (2,661) | 1:A:78:PHE:HB3 | 1:A:21:VAL:HB | 15 | 0.12 |
| (2,661) | 1:A:78:PHE:HB3 | 1:A:21:VAL:HB | 17 | 0.12 |
| (2,661) | 1:A:78:PHE:HB3 | 1:A:21:VAL:HB | 18 | 0.12 |
| (2,654) | 1:A:78:PHE:HA | 1:A:85:ALA:H | 4 | 0.12 |
| (2,646) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:102:ASN:HB3 | 20 | 0.12 |
| (2,646) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:102:ASN:HB3 | 20 | 0.12 |
| (2,646) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:102:ASN:HB3 | 20 | 0.12 |
| (2,624) | 1:A:75:LEU:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 4 | 0.12 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:H | 10 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:H | 10 | 0.12 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:H | 10 | 0.12 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:H | 14 | 0.12 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:H | 14 | 0.12 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:H | 14 | 0.12 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD13 | 2 | 0.12 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD11 | 2 | 0.12 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD12 | 2 | 0.12 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD13 | 3 | 0.12 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD11 | 3 | 0.12 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD12 | 3 | 0.12 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD13 | 18 | 0.12 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD11 | 18 | 0.12 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD12 | 18 | 0.12 |
| (2,508) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:56:ASP:HA | 10 | 0.12 |
| (2,498) | 1:A:55:LEU:HA | 1:A:55:LEU:HG | 20 | 0.12 |
| (2,485) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:24:ALA:HB1 | 18 | 0.12 |
| (2,485) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:24:ALA:HB2 | 18 | 0.12 |
| (2,485) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:24:ALA:HB3 | 18 | 0.12 |
| (2,479) | 1:A:2:VAL:HA | 1:A:53:TYR:HA | 2 | 0.12 |
| (2,47) | 1:A:94:ALA:HA | 1:A:97:GLN:HB2 | 9 | 0.12 |
| (2,47) | 1:A:94:ALA:HA | 1:A:97:GLN:HB3 | 9 | 0.12 |
| (2,47) | 1:A:94:ALA:HA | 1:A:97:GLN:HB2 | 13 | 0.12 |
| (2,47) | 1:A:94:ALA:HA | 1:A:97:GLN:HB3 | 13 | 0.12 |
| (2,461) | 1:A:51:ASP:HA | 1:A:47:TYR:HD2 | 16 | 0.12 |
| (2,461) | 1:A:51:ASP:HA | 1:A:47:TYR:HD1 | 16 | 0.12 |
| (2,46) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:2:VAL:HG23 | 2 | 0.12 |
| (2,46) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:2:VAL:HG21 | 2 | 0.12 |
| (2,46) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:2:VAL:HG22 | 2 | 0.12 |
| (2,46) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:77:LEU:HD21 | 2 | 0.12 |
| (2,46) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:77:LEU:HD23 | 2 | 0.12 |
| (2,46) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:77:LEU:HD22 | 2 | 0.12 |
| (2,46) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:2:VAL:HG23 | 9 | 0.12 |
| (2,46) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:2:VAL:HG21 | 9 | 0.12 |
| (2,46) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:2:VAL:HG22 | 9 | 0.12 |
| (2,46) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:77:LEU:HD21 | 9 | 0.12 |
| (2,46) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:77:LEU:HD23 | 9 | 0.12 |
| (2,46) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:77:LEU:HD22 | 9 | 0.12 |
| (2,456) | 1:A:85:ALA:HB1 | 1:A:97:GLN:HE22 | 8 | 0.12 |
| (2,456) | 1:A:85:ALA:HB2 | 1:A:97:GLN:HE22 | 8 | 0.12 |
| (2,456) | 1:A:85:ALA:HB3 | 1:A:97:GLN:HE22 | 8 | 0.12 |
| (2,456) | 1:A:85:ALA:HB1 | 1:A:97:GLN:HE22 | 15 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,456) | 1:A:85:ALA:HB2 | 1:A:97:GLN:HE22 | 15 | 0.12 |
| (2,456) | 1:A:85:ALA:HB3 | 1:A:97:GLN:HE22 | 15 | 0.12 |
| (2,45) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:103:ALA:HB3 | 11 | 0.12 |
| (2,45) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:103:ALA:HB1 | 11 | 0.12 |
| (2,45) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:103:ALA:HB2 | 11 | 0.12 |
| (2,45) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:50:ALA:HB1 | 11 | 0.12 |
| (2,45) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:50:ALA:HB2 | 11 | 0.12 |
| (2,45) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:50:ALA:HB3 | 11 | 0.12 |
| (2,438) | 1:A:46:GLN:HB3 | 1:A:43:PHE:HA | 11 | 0.12 |
| (2,438) | 1:A:46:GLN:HB3 | 1:A:43:PHE:HA | 13 | 0.12 |
| (2,436) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:42:LYS:HA | 10 | 0.12 |
| (2,420) | 1:A:42:LYS:HA | 1:A:44:SER:H | 3 | 0.12 |
| (2,414) | 1:A:40:ILE:HG22 | 1:A:41:GLU:H | 20 | 0.12 |
| (2,414) | 1:A:40:ILE:HG21 | 1:A:41:GLU:H | 20 | 0.12 |
| (2,414) | 1:A:40:ILE:HG23 | 1:A:41:GLU:H | 20 | 0.12 |
| (2,413) | 1:A:40:ILE:HA | 1:A:40:ILE:HG22 | 7 | 0.12 |
| (2,413) | 1:A:40:ILE:HA | 1:A:40:ILE:HG21 | 7 | 0.12 |
| (2,413) | 1:A:40:ILE:HA | 1:A:40:ILE:HG23 | 7 | 0.12 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:92:PRO:HA | 9 | 0.12 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:92:PRO:HA | 9 | 0.12 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:92:PRO:HA | 9 | 0.12 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:92:PRO:HA | 20 | 0.12 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:92:PRO:HA | 20 | 0.12 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:92:PRO:HA | 20 | 0.12 |
| (2,407) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:54:LYS:HD2 | 6 | 0.12 |
| (2,407) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:54:LYS:HD2 | 6 | 0.12 |
| (2,407) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:54:LYS:HD2 | 6 | 0.12 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ALA:HB3 | 4 | 0.12 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ALA:HB1 | 4 | 0.12 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ALA:HB2 | 4 | 0.12 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ALA:HB3 | 4 | 0.12 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ALA:HB1 | 4 | 0.12 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ALA:HB2 | 4 | 0.12 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ALA:HB3 | 4 | 0.12 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ALA:HB1 | 4 | 0.12 |
| (2,385) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ALA:HB2 | 4 | 0.12 |
| (2,376) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:36:ILE:HG13 | 12 | 0.12 |
| (2,363) | 1:A:65:GLN:HA | 1:A:69:VAL:H | 10 | 0.12 |
| (2,35) | 1:A:42:LYS:HD3 | 1:A:42:LYS:HG2 | 2 | 0.12 |
| (2,35) | 1:A:42:LYS:HD3 | 1:A:42:LYS:HG3 | 2 | 0.12 |
| (2,34) | 1:A:42:LYS:HD3 | 1:A:43:PHE:HA | 18 | 0.12 |
| (2,34) | 1:A:42:LYS:HD2 | 1:A:43:PHE:HA | 18 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,319) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:25:PHE:HB2 | 8 | 0.12 |
| (2,319) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:25:PHE:HB2 | 14 | 0.12 |
| (2,319) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:25:PHE:HB2 | 16 | 0.12 |
| (2,317) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:74:THR:H | 2 | 0.12 |
| (2,317) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:74:THR:H | 7 | 0.12 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:5:PHE:HE2 | 6 | 0.12 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:5:PHE:HE1 | 6 | 0.12 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:5:PHE:HE2 | 6 | 0.12 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:5:PHE:HE1 | 6 | 0.12 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:5:PHE:HE2 | 6 | 0.12 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:5:PHE:HE1 | 6 | 0.12 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:23:VAL:H | 2 | 0.12 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:23:VAL:H | 2 | 0.12 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:23:VAL:H | 2 | 0.12 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:23:VAL:H | 15 | 0.12 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:23:VAL:H | 15 | 0.12 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:23:VAL:H | 15 | 0.12 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:21:VAL:HA | 7 | 0.12 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:21:VAL:HA | 7 | 0.12 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:21:VAL:HA | 7 | 0.12 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HA | 7 | 0.12 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HA | 7 | 0.12 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HA | 7 | 0.12 |
| (2,284) | 1:A:20:LEU:HG | 1:A:22:VAL:HG11 | 1 | 0.12 |
| (2,284) | 1:A:20:LEU:HG | 1:A:22:VAL:HG13 | 1 | 0.12 |
| (2,284) | 1:A:20:LEU:HG | 1:A:22:VAL:HG12 | 1 | 0.12 |
| (2,284) | 1:A:20:LEU:HG | 1:A:22:VAL:HG11 | 20 | 0.12 |
| (2,284) | 1:A:20:LEU:HG | 1:A:22:VAL:HG13 | 20 | 0.12 |
| (2,284) | 1:A:20:LEU:HG | 1:A:22:VAL:HG12 | 20 | 0.12 |
| (2,270) | 1:A:19:LYS:HA | 1:A:19:LYS:HE3 | 15 | 0.12 |
| (2,267) | 1:A:19:LYS:HA | 1:A:20:LEU:H | 9 | 0.12 |
| (2,267) | 1:A:19:LYS:HA | 1:A:20:LEU:H | 13 | 0.12 |
| (2,267) | 1:A:19:LYS:HA | 1:A:20:LEU:H | 19 | 0.12 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB2 | 4 | 0.12 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB1 | 4 | 0.12 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB3 | 4 | 0.12 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB2 | 5 | 0.12 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB1 | 5 | 0.12 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB3 | 5 | 0.12 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB2 | 12 | 0.12 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB1 | 12 | 0.12 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB3 | 12 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB2 | 13 | 0.12 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB1 | 13 | 0.12 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB3 | 13 | 0.12 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB2 | 18 | 0.12 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB1 | 18 | 0.12 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB3 | 18 | 0.12 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB2 | 19 | 0.12 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB1 | 19 | 0.12 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB3 | 19 | 0.12 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:21:VAL:HB | 6 | 0.12 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:21:VAL:HB | 6 | 0.12 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:21:VAL:HB | 6 | 0.12 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:21:VAL:HB | 12 | 0.12 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:21:VAL:HB | 12 | 0.12 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:21:VAL:HB | 12 | 0.12 |
| (2,197) | 1:A:9:SER:HA | 1:A:12:ASP:HB2 | 6 | 0.12 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD13 | 7 | 0.12 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD11 | 7 | 0.12 |
| (2,195) | 1:A:100:ALA:HA | 1:A:99:ILE:HD12 | 7 | 0.12 |
| (2,191) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:11:PHE:HD1 | 5 | 0.12 |
| (2,191) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:11:PHE:HD2 | 5 | 0.12 |
| (2,191) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:11:PHE:HD1 | 16 | 0.12 |
| (2,191) | 1:A:8:ALA:HA | 1:A:11:PHE:HD2 | 16 | 0.12 |
| (2,168) | 1:A:3:THR:HG21 | 1:A:3:THR:H | 17 | 0.12 |
| (2,168) | 1:A:3:THR:HG23 | 1:A:3:THR:H | 17 | 0.12 |
| (2,168) | 1:A:3:THR:HG22 | 1:A:3:THR:H | 17 | 0.12 |
| (2,163) | 1:A:2:VAL:HA | 1:A:2:VAL:HG13 | 3 | 0.12 |
| (2,163) | 1:A:2:VAL:HA | 1:A:2:VAL:HG12 | 3 | 0.12 |
| (2,163) | 1:A:2:VAL:HA | 1:A:2:VAL:HG11 | 3 | 0.12 |
| (2,163) | 1:A:2:VAL:HA | 1:A:2:VAL:HG13 | 12 | 0.12 |
| (2,163) | 1:A:2:VAL:HA | 1:A:2:VAL:HG12 | 12 | 0.12 |
| (2,163) | 1:A:2:VAL:HA | 1:A:2:VAL:HG11 | 12 | 0.12 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG13 | 1:A:52:PHE:HB3 | 16 | 0.12 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG12 | 1:A:52:PHE:HB3 | 16 | 0.12 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG11 | 1:A:52:PHE:HB3 | 16 | 0.12 |
| (2,155) | 1:A:2:VAL:HB | 1:A:44:SER:HB2 | 19 | 0.12 |
| (2,152) | 1:A:2:VAL:HA | 1:A:2:VAL:HG23 | 20 | 0.12 |
| (2,152) | 1:A:2:VAL:HA | 1:A:2:VAL:HG21 | 20 | 0.12 |
| (2,152) | 1:A:2:VAL:HA | 1:A:2:VAL:HG22 | 20 | 0.12 |
| (2,1298) | 1:A:26:TYR:HE2 | 1:A:24:ALA:HB1 | 12 | 0.12 |
| (2,1298) | 1:A:26:TYR:HE2 | 1:A:24:ALA:HB2 | 12 | 0.12 |
| (2,1298) | 1:A:26:TYR:HE2 | 1:A:24:ALA:HB3 | 12 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1298) | 1:A:26:TYR:HE1 | 1:A:24:ALA:HB1 | 12 | 0.12 |
| (2,1298) | 1:A:26:TYR:HE1 | 1:A:24:ALA:HB2 | 12 | 0.12 |
| (2,1298) | 1:A:26:TYR:HE1 | 1:A:24:ALA:HB3 | 12 | 0.12 |
| (2,1294) | 1:A:52:PHE:HE2 | 1:A:44:SER:HB3 | 12 | 0.12 |
| (2,1294) | 1:A:52:PHE:HE1 | 1:A:44:SER:HB3 | 12 | 0.12 |
| (2,1290) | 1:A:5:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 1 | 0.12 |
| (2,1290) | 1:A:5:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 1 | 0.12 |
| (2,1290) | 1:A:5:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 11 | 0.12 |
| (2,1290) | 1:A:5:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 11 | 0.12 |
| (2,1281) | 1:A:102:ASN:HD21 | 1:A:20:LEU:HD21 | 8 | 0.12 |
| (2,1281) | 1:A:102:ASN:HD21 | 1:A:20:LEU:HD22 | 8 | 0.12 |
| (2,1281) | 1:A:102:ASN:HD21 | 1:A:20:LEU:HD23 | 8 | 0.12 |
| (2,1274) | 1:A:102:ASN:HD22 | 1:A:101:ALA:HB2 | 6 | 0.12 |
| (2,1274) | 1:A:102:ASN:HD22 | 1:A:101:ALA:HB1 | 6 | 0.12 |
| (2,1274) | 1:A:102:ASN:HD22 | 1:A:101:ALA:HB3 | 6 | 0.12 |
| (2,1245) | 1:A:67:ASN:HD22 | 1:A:66:LYS:HG3 | 12 | 0.12 |
| (2,1245) | 1:A:67:ASN:HD22 | 1:A:66:LYS:HG3 | 14 | 0.12 |
| (2,1245) | 1:A:67:ASN:HD22 | 1:A:66:LYS:HG3 | 18 | 0.12 |
| (2,1205) | 1:A:99:ILE:HD13 | 1:A:99:ILE:H | 12 | 0.12 |
| (2,1205) | 1:A:99:ILE:HD11 | 1:A:99:ILE:H | 12 | 0.12 |
| (2,1205) | 1:A:99:ILE:HD12 | 1:A:99:ILE:H | 12 | 0.12 |
| (2,1202) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:42:LYS:H | 3 | 0.12 |
| (2,1202) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:42:LYS:H | 4 | 0.12 |
| (2,1202) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:42:LYS:H | 18 | 0.12 |
| (2,1164) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:84:VAL:H | 4 | 0.12 |
| (2,1164) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:84:VAL:H | 4 | 0.12 |
| (2,1164) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:84:VAL:H | 4 | 0.12 |
| (2,1164) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:84:VAL:H | 5 | 0.12 |
| (2,1164) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:84:VAL:H | 5 | 0.12 |
| (2,1164) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:84:VAL:H | 5 | 0.12 |
| (2,1164) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:84:VAL:H | 18 | 0.12 |
| (2,1164) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:84:VAL:H | 18 | 0.12 |
| (2,1164) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:84:VAL:H | 18 | 0.12 |
| (2,1148) | 1:A:79:LYS:H | 1:A:82:LYS:H | 8 | 0.12 |
| (2,1148) | 1:A:79:LYS:H | 1:A:82:LYS:H | 9 | 0.12 |
| (2,1148) | 1:A:79:LYS:H | 1:A:82:LYS:H | 13 | 0.12 |
| (2,1148) | 1:A:79:LYS:H | 1:A:82:LYS:H | 19 | 0.12 |
| (2,1139) | 1:A:80:ASN:H | 1:A:79:LYS:HB3 | 1 | 0.12 |
| (2,1139) | 1:A:80:ASN:H | 1:A:79:LYS:HB3 | 16 | 0.12 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:43:PHE:HD2 | 17 | 0.12 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:43:PHE:HD1 | 17 | 0.12 |
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:47:TYR:HD2 | 17 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|--------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,112) | 1:A:45:GLU:H | 1:A:47:TYR:HD1 | 17 | 0.12 |
| (2,1079) | 1:A:65:GLN:H | 1:A:66:LYS:HB2 | 4 | 0.12 |
| (2,1079) | 1:A:65:GLN:H | 1:A:66:LYS:HB2 | 10 | 0.12 |
| (2,1038) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:56:ASP:HB2 | 14 | 0.12 |
| (2,1038) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:56:ASP:HB2 | 17 | 0.12 |
| (2,1037) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:56:ASP:HB3 | 1 | 0.12 |
| (2,1037) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:56:ASP:HB3 | 16 | 0.12 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 13 | 0.12 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 13 | 0.12 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 13 | 0.12 |
| (2,1033) | 1:A:5:PHE:H | 1:A:55:LEU:H | 1 | 0.12 |
| (2,1017) | 1:A:52:PHE:H | 1:A:47:TYR:HD2 | 10 | 0.12 |
| (2,1017) | 1:A:52:PHE:H | 1:A:47:TYR:HD1 | 10 | 0.12 |
| (2,1017) | 1:A:52:PHE:H | 1:A:47:TYR:HD2 | 14 | 0.12 |
| (2,1017) | 1:A:52:PHE:H | 1:A:47:TYR:HD1 | 14 | 0.12 |
| (2,1017) | 1:A:52:PHE:H | 1:A:47:TYR:HD2 | 15 | 0.12 |
| (2,1017) | 1:A:52:PHE:H | 1:A:47:TYR:HD1 | 15 | 0.12 |
| (2,1011) | 1:A:50:ALA:H | 1:A:51:ASP:H | 10 | 0.12 |
| (2,1002) | 1:A:47:TYR:H | 1:A:44:SER:H | 20 | 0.12 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD21 | 14 | 0.12 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD22 | 14 | 0.12 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD23 | 14 | 0.12 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD21 | 14 | 0.12 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD23 | 14 | 0.12 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD22 | 14 | 0.12 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG23 | 14 | 0.12 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG21 | 14 | 0.12 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG22 | 14 | 0.12 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD13 | 14 | 0.12 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD11 | 14 | 0.12 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD12 | 14 | 0.12 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD21 | 15 | 0.12 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD22 | 15 | 0.12 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD23 | 15 | 0.12 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD21 | 15 | 0.12 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD23 | 15 | 0.12 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD22 | 15 | 0.12 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG23 | 15 | 0.12 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG21 | 15 | 0.12 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG22 | 15 | 0.12 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD13 | 15 | 0.12 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD11 | 15 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD12 | 15 | 0.12 |
| (1,8) | 1:A:35:MET:N | 1:A:31:GLY:O | 7 | 0.12 |
| (1,7) | 1:A:35:MET:H | 1:A:31:GLY:O | 15 | 0.12 |
| (1,36) | 1:A:101:ALA:H | 1:A:97:GLN:O | 1 | 0.12 |
| (1,34) | 1:A:98:ALA:H | 1:A:94:ALA:O | 3 | 0.12 |
| (1,34) | 1:A:98:ALA:H | 1:A:94:ALA:O | 9 | 0.12 |
| (1,34) | 1:A:98:ALA:H | 1:A:94:ALA:O | 11 | 0.12 |
| (1,34) | 1:A:98:ALA:H | 1:A:94:ALA:O | 15 | 0.12 |
| (1,27) | 1:A:60:LEU:N | 1:A:56:ASP:O | 18 | 0.12 |
| (1,24) | 1:A:46:GLN:H | 1:A:42:LYS:O | 19 | 0.12 |
| (2,989) | 1:A:43:PHE:H | 1:A:41:GLU:HB3 | 11 | 0.11 |
| (2,978) | 1:A:39:MET:HG3 | 1:A:39:MET:H | 3 | 0.11 |
| (2,973) | 1:A:36:ILE:H | 1:A:36:ILE:HD12 | 8 | 0.11 |
| (2,973) | 1:A:36:ILE:H | 1:A:36:ILE:HD11 | 8 | 0.11 |
| (2,973) | 1:A:36:ILE:H | 1:A:36:ILE:HD13 | 8 | 0.11 |
| (2,969) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:33:CYS:H | 7 | 0.11 |
| (2,958) | 1:A:26:TYR:H | 1:A:57:VAL:HG23 | 5 | 0.11 |
| (2,958) | 1:A:26:TYR:H | 1:A:57:VAL:HG21 | 5 | 0.11 |
| (2,958) | 1:A:26:TYR:H | 1:A:57:VAL:HG22 | 5 | 0.11 |
| (2,94) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:14:ALA:HA | 19 | 0.11 |
| (2,94) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:13:SER:HA | 19 | 0.11 |
| (2,935) | 1:A:20:LEU:H | 1:A:103:ALA:HA | 11 | 0.11 |
| (2,928) | 1:A:19:LYS:H | 1:A:18:ASP:HB2 | 18 | 0.11 |
| (2,927) | 1:A:19:LYS:H | 1:A:80:ASN:H | 5 | 0.11 |
| (2,85) | 1:A:90:ALA:HB3 | 1:A:32:PRO:HG2 | 7 | 0.11 |
| (2,85) | 1:A:90:ALA:HB1 | 1:A:32:PRO:HG2 | 7 | 0.11 |
| (2,85) | 1:A:90:ALA:HB2 | 1:A:32:PRO:HG2 | 7 | 0.11 |
| (2,85) | 1:A:90:ALA:HB3 | 1:A:32:PRO:HG3 | 7 | 0.11 |
| (2,85) | 1:A:90:ALA:HB1 | 1:A:32:PRO:HG3 | 7 | 0.11 |
| (2,85) | 1:A:90:ALA:HB2 | 1:A:32:PRO:HG3 | 7 | 0.11 |
| (2,833) | 1:A:31:GLY:HA3 | 1:A:34:LYS:HB3 | 2 | 0.11 |
| (2,833) | 1:A:31:GLY:HA3 | 1:A:34:LYS:HB3 | 10 | 0.11 |
| (2,827) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:54:LYS:HD2 | 6 | 0.11 |
| (2,827) | 1:A:40:ILE:HB | 1:A:54:LYS:HD2 | 19 | 0.11 |
| (2,826) | 1:A:87:VAL:HG21 | 1:A:95:ILE:HA | 2 | 0.11 |
| (2,826) | 1:A:87:VAL:HG23 | 1:A:95:ILE:HA | 2 | 0.11 |
| (2,826) | 1:A:87:VAL:HG22 | 1:A:95:ILE:HA | 2 | 0.11 |
| (2,826) | 1:A:87:VAL:HG21 | 1:A:95:ILE:HA | 7 | 0.11 |
| (2,826) | 1:A:87:VAL:HG23 | 1:A:95:ILE:HA | 7 | 0.11 |
| (2,826) | 1:A:87:VAL:HG22 | 1:A:95:ILE:HA | 7 | 0.11 |
| (2,826) | 1:A:87:VAL:HG21 | 1:A:95:ILE:HA | 17 | 0.11 |
| (2,826) | 1:A:87:VAL:HG23 | 1:A:95:ILE:HA | 17 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,826) | 1:A:87:VAL:HG22 | 1:A:95:ILE:HA | 17 | 0.11 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG11 | 7 | 0.11 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG13 | 7 | 0.11 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG12 | 7 | 0.11 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG11 | 12 | 0.11 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG13 | 12 | 0.11 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG12 | 12 | 0.11 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG11 | 13 | 0.11 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG13 | 13 | 0.11 |
| (2,811) | 1:A:22:VAL:HA | 1:A:22:VAL:HG12 | 13 | 0.11 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB3 | 1:A:47:TYR:HB2 | 12 | 0.11 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB1 | 1:A:47:TYR:HB2 | 12 | 0.11 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB2 | 1:A:47:TYR:HB2 | 12 | 0.11 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB3 | 1:A:47:TYR:HB3 | 12 | 0.11 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB1 | 1:A:47:TYR:HB3 | 12 | 0.11 |
| (2,77) | 1:A:103:ALA:HB2 | 1:A:47:TYR:HB3 | 12 | 0.11 |
| (2,767) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:100:ALA:H | 8 | 0.11 |
| (2,767) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:100:ALA:H | 13 | 0.11 |
| (2,767) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:100:ALA:H | 17 | 0.11 |
| (2,767) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:100:ALA:H | 18 | 0.11 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD13 | 4 | 0.11 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD11 | 4 | 0.11 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD12 | 4 | 0.11 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD13 | 9 | 0.11 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD11 | 9 | 0.11 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD12 | 9 | 0.11 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD13 | 10 | 0.11 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD11 | 10 | 0.11 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD12 | 10 | 0.11 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD13 | 14 | 0.11 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD11 | 14 | 0.11 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD12 | 14 | 0.11 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD13 | 20 | 0.11 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD11 | 20 | 0.11 |
| (2,765) | 1:A:99:ILE:HB | 1:A:99:ILE:HD12 | 20 | 0.11 |
| (2,764) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:99:ILE:HA | 5 | 0.11 |
| (2,764) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:99:ILE:HA | 5 | 0.11 |
| (2,764) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:99:ILE:HA | 5 | 0.11 |
| (2,764) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:99:ILE:HA | 11 | 0.11 |
| (2,764) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:99:ILE:HA | 11 | 0.11 |
| (2,764) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:99:ILE:HA | 11 | 0.11 |
| (2,728) | 1:A:1:MET:HA | 1:A:2:VAL:H | 10 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:85:ALA:HB1 | 7 | 0.11 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:85:ALA:HB2 | 7 | 0.11 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:85:ALA:HB3 | 7 | 0.11 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:85:ALA:HB1 | 7 | 0.11 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:85:ALA:HB2 | 7 | 0.11 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:85:ALA:HB3 | 7 | 0.11 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:85:ALA:HB1 | 7 | 0.11 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:85:ALA:HB2 | 7 | 0.11 |
| (2,701) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:85:ALA:HB3 | 7 | 0.11 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:20:LEU:HD21 | 5 | 0.11 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:20:LEU:HD22 | 5 | 0.11 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:20:LEU:HD23 | 5 | 0.11 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:20:LEU:HD21 | 5 | 0.11 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:20:LEU:HD22 | 5 | 0.11 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:20:LEU:HD23 | 5 | 0.11 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:20:LEU:HD21 | 5 | 0.11 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:20:LEU:HD22 | 5 | 0.11 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:20:LEU:HD23 | 5 | 0.11 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:20:LEU:HD21 | 6 | 0.11 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:20:LEU:HD22 | 6 | 0.11 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:20:LEU:HD23 | 6 | 0.11 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:20:LEU:HD21 | 6 | 0.11 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:20:LEU:HD22 | 6 | 0.11 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:20:LEU:HD23 | 6 | 0.11 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:20:LEU:HD21 | 6 | 0.11 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:20:LEU:HD22 | 6 | 0.11 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:20:LEU:HD23 | 6 | 0.11 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:20:LEU:HD21 | 16 | 0.11 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:20:LEU:HD22 | 16 | 0.11 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:20:LEU:HD23 | 16 | 0.11 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:20:LEU:HD21 | 16 | 0.11 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:20:LEU:HD22 | 16 | 0.11 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:20:LEU:HD23 | 16 | 0.11 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:20:LEU:HD21 | 16 | 0.11 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:20:LEU:HD22 | 16 | 0.11 |
| (2,696) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:20:LEU:HD23 | 16 | 0.11 |
| (2,695) | 1:A:87:VAL:HG12 | 1:A:89:GLY:H | 2 | 0.11 |
| (2,695) | 1:A:87:VAL:HG11 | 1:A:89:GLY:H | 2 | 0.11 |
| (2,695) | 1:A:87:VAL:HG13 | 1:A:89:GLY:H | 2 | 0.11 |
| (2,695) | 1:A:87:VAL:HG12 | 1:A:89:GLY:H | 11 | 0.11 |
| (2,695) | 1:A:87:VAL:HG11 | 1:A:89:GLY:H | 11 | 0.11 |
| (2,695) | 1:A:87:VAL:HG13 | 1:A:89:GLY:H | 11 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,695) | 1:A:87:VAL:HG12 | 1:A:89:GLY:H | 13 | 0.11 |
| (2,695) | 1:A:87:VAL:HG11 | 1:A:89:GLY:H | 13 | 0.11 |
| (2,695) | 1:A:87:VAL:HG13 | 1:A:89:GLY:H | 13 | 0.11 |
| (2,687) | 1:A:84:VAL:HB | 1:A:77:LEU:HB2 | 7 | 0.11 |
| (2,687) | 1:A:84:VAL:HB | 1:A:77:LEU:HB2 | 13 | 0.11 |
| (2,687) | 1:A:84:VAL:HB | 1:A:77:LEU:HB2 | 18 | 0.11 |
| (2,685) | 1:A:84:VAL:HA | 1:A:84:VAL:HB | 11 | 0.11 |
| (2,685) | 1:A:84:VAL:HA | 1:A:84:VAL:HB | 13 | 0.11 |
| (2,685) | 1:A:84:VAL:HA | 1:A:84:VAL:HB | 18 | 0.11 |
| (2,685) | 1:A:84:VAL:HA | 1:A:84:VAL:HB | 19 | 0.11 |
| (2,685) | 1:A:84:VAL:HA | 1:A:84:VAL:HB | 20 | 0.11 |
| (2,683) | 1:A:46:GLN:HA | 1:A:47:TYR:H | 5 | 0.11 |
| (2,683) | 1:A:46:GLN:HA | 1:A:47:TYR:H | 19 | 0.11 |
| (2,67) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG11 | 13 | 0.11 |
| (2,67) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG12 | 13 | 0.11 |
| (2,67) | 1:A:79:LYS:HB3 | 1:A:84:VAL:HG13 | 13 | 0.11 |
| (2,67) | 1:A:84:VAL:HG11 | 1:A:77:LEU:HG | 13 | 0.11 |
| (2,67) | 1:A:84:VAL:HG12 | 1:A:77:LEU:HG | 13 | 0.11 |
| (2,67) | 1:A:84:VAL:HG13 | 1:A:77:LEU:HG | 13 | 0.11 |
| (2,661) | 1:A:78:PHE:HB3 | 1:A:21:VAL:HB | 16 | 0.11 |
| (2,654) | 1:A:78:PHE:HA | 1:A:85:ALA:H | 1 | 0.11 |
| (2,654) | 1:A:78:PHE:HA | 1:A:85:ALA:H | 5 | 0.11 |
| (2,615) | 1:A:74:THR:HA | 1:A:74:THR:H | 15 | 0.11 |
| (2,579) | 1:A:66:LYS:HA | 1:A:66:LYS:H | 2 | 0.11 |
| (2,579) | 1:A:66:LYS:HA | 1:A:66:LYS:H | 3 | 0.11 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:H | 5 | 0.11 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:H | 5 | 0.11 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:H | 5 | 0.11 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:ALA:H | 16 | 0.11 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:ALA:H | 16 | 0.11 |
| (2,563) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:ALA:H | 16 | 0.11 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD13 | 11 | 0.11 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD11 | 11 | 0.11 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD12 | 11 | 0.11 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD13 | 20 | 0.11 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD11 | 20 | 0.11 |
| (2,557) | 1:A:63:VAL:HB | 1:A:60:LEU:HD12 | 20 | 0.11 |
| (2,536) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:60:LEU:HD13 | 3 | 0.11 |
| (2,536) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:60:LEU:HD11 | 3 | 0.11 |
| (2,536) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:60:LEU:HD12 | 3 | 0.11 |
| (2,536) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:60:LEU:HD13 | 5 | 0.11 |
| (2,536) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:60:LEU:HD11 | 5 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,536) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:60:LEU:HD12 | 5 | 0.11 |
| (2,536) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:60:LEU:HD13 | 7 | 0.11 |
| (2,536) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:60:LEU:HD11 | 7 | 0.11 |
| (2,536) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:60:LEU:HD12 | 7 | 0.11 |
| (2,536) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:60:LEU:HD13 | 8 | 0.11 |
| (2,536) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:60:LEU:HD11 | 8 | 0.11 |
| (2,536) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:60:LEU:HD12 | 8 | 0.11 |
| (2,536) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:60:LEU:HD13 | 9 | 0.11 |
| (2,536) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:60:LEU:HD11 | 9 | 0.11 |
| (2,536) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:60:LEU:HD12 | 9 | 0.11 |
| (2,536) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:60:LEU:HD13 | 11 | 0.11 |
| (2,536) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:60:LEU:HD11 | 11 | 0.11 |
| (2,536) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:60:LEU:HD12 | 11 | 0.11 |
| (2,536) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:60:LEU:HD13 | 12 | 0.11 |
| (2,536) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:60:LEU:HD11 | 12 | 0.11 |
| (2,536) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:60:LEU:HD12 | 12 | 0.11 |
| (2,536) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:60:LEU:HD13 | 15 | 0.11 |
| (2,536) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:60:LEU:HD11 | 15 | 0.11 |
| (2,536) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:60:LEU:HD12 | 15 | 0.11 |
| (2,536) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:60:LEU:HD13 | 16 | 0.11 |
| (2,536) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:60:LEU:HD11 | 16 | 0.11 |
| (2,536) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:60:LEU:HD12 | 16 | 0.11 |
| (2,536) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:60:LEU:HD13 | 19 | 0.11 |
| (2,536) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:60:LEU:HD11 | 19 | 0.11 |
| (2,536) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:60:LEU:HD12 | 19 | 0.11 |
| (2,536) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:60:LEU:HD13 | 20 | 0.11 |
| (2,536) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:60:LEU:HD11 | 20 | 0.11 |
| (2,536) | 1:A:60:LEU:HB2 | 1:A:60:LEU:HD12 | 20 | 0.11 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG23 | 1:A:61:GLY:HA3 | 3 | 0.11 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG21 | 1:A:61:GLY:HA3 | 3 | 0.11 |
| (2,524) | 1:A:57:VAL:HG22 | 1:A:61:GLY:HA3 | 3 | 0.11 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:58:ASP:HB2 | 6 | 0.11 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:58:ASP:HB2 | 6 | 0.11 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:58:ASP:HB2 | 6 | 0.11 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:58:ASP:HB2 | 12 | 0.11 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:58:ASP:HB2 | 12 | 0.11 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:58:ASP:HB2 | 12 | 0.11 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG11 | 1:A:58:ASP:HB2 | 13 | 0.11 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG12 | 1:A:58:ASP:HB2 | 13 | 0.11 |
| (2,519) | 1:A:57:VAL:HG13 | 1:A:58:ASP:HB2 | 13 | 0.11 |
| (2,493) | 1:A:54:LYS:HE2 | 1:A:40:ILE:HG22 | 4 | 0.11 |
| (2,493) | 1:A:54:LYS:HE2 | 1:A:40:ILE:HG21 | 4 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,493) | 1:A:54:LYS:HE2 | 1:A:40:ILE:HG23 | 4 | 0.11 |
| (2,485) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:24:ALA:HB1 | 20 | 0.11 |
| (2,485) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:24:ALA:HB2 | 20 | 0.11 |
| (2,485) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:24:ALA:HB3 | 20 | 0.11 |
| (2,479) | 1:A:2:VAL:HA | 1:A:53:TYR:HA | 5 | 0.11 |
| (2,47) | 1:A:94:ALA:HA | 1:A:97:GLN:HB2 | 6 | 0.11 |
| (2,47) | 1:A:94:ALA:HA | 1:A:97:GLN:HB3 | 6 | 0.11 |
| (2,47) | 1:A:94:ALA:HA | 1:A:97:GLN:HB2 | 12 | 0.11 |
| (2,47) | 1:A:94:ALA:HA | 1:A:97:GLN:HB3 | 12 | 0.11 |
| (2,449) | 1:A:49:GLN:HA | 1:A:50:ALA:H | 5 | 0.11 |
| (2,449) | 1:A:49:GLN:HA | 1:A:50:ALA:H | 14 | 0.11 |
| (2,440) | 1:A:46:GLN:HG2 | 1:A:43:PHE:HD2 | 1 | 0.11 |
| (2,440) | 1:A:46:GLN:HG2 | 1:A:43:PHE:HD1 | 1 | 0.11 |
| (2,414) | 1:A:40:ILE:HG22 | 1:A:41:GLU:H | 15 | 0.11 |
| (2,414) | 1:A:40:ILE:HG21 | 1:A:41:GLU:H | 15 | 0.11 |
| (2,414) | 1:A:40:ILE:HG23 | 1:A:41:GLU:H | 15 | 0.11 |
| (2,414) | 1:A:40:ILE:HG22 | 1:A:41:GLU:H | 18 | 0.11 |
| (2,414) | 1:A:40:ILE:HG21 | 1:A:41:GLU:H | 18 | 0.11 |
| (2,414) | 1:A:40:ILE:HG23 | 1:A:41:GLU:H | 18 | 0.11 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:92:PRO:HA | 2 | 0.11 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:92:PRO:HA | 2 | 0.11 |
| (2,408) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:92:PRO:HA | 2 | 0.11 |
| (2,407) | 1:A:40:ILE:HD11 | 1:A:54:LYS:HD2 | 18 | 0.11 |
| (2,407) | 1:A:40:ILE:HD13 | 1:A:54:LYS:HD2 | 18 | 0.11 |
| (2,407) | 1:A:40:ILE:HD12 | 1:A:54:LYS:HD2 | 18 | 0.11 |
| (2,369) | 1:A:35:MET:HA | 1:A:35:MET:HG3 | 16 | 0.11 |
| (2,369) | 1:A:35:MET:HA | 1:A:35:MET:HG3 | 17 | 0.11 |
| (2,369) | 1:A:35:MET:HA | 1:A:35:MET:HG3 | 19 | 0.11 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB3 | 12 | 0.11 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB1 | 12 | 0.11 |
| (2,362) | 1:A:33:CYS:HA | 1:A:37:ALA:HB2 | 12 | 0.11 |
| (2,357) | 1:A:29:TRP:HA | 1:A:29:TRP:HD1 | 1 | 0.11 |
| (2,34) | 1:A:42:LYS:HD3 | 1:A:43:PHE:HA | 4 | 0.11 |
| (2,34) | 1:A:42:LYS:HD2 | 1:A:43:PHE:HA | 4 | 0.11 |
| (2,34) | 1:A:42:LYS:HD3 | 1:A:43:PHE:HA | 5 | 0.11 |
| (2,34) | 1:A:42:LYS:HD2 | 1:A:43:PHE:HA | 5 | 0.11 |
| (2,34) | 1:A:42:LYS:HD3 | 1:A:43:PHE:HA | 15 | 0.11 |
| (2,34) | 1:A:42:LYS:HD2 | 1:A:43:PHE:HA | 15 | 0.11 |
| (2,324) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:54:LYS:HD2 | 8 | 0.11 |
| (2,324) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:54:LYS:HD2 | 8 | 0.11 |
| (2,324) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:54:LYS:HD2 | 8 | 0.11 |
| (2,319) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:25:PHE:HB2 | 12 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,319) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:25:PHE:HB2 | 20 | 0.11 |
| (2,317) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:74:THR:H | 5 | 0.11 |
| (2,317) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:74:THR:H | 12 | 0.11 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:5:PHE:HE2 | 5 | 0.11 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:5:PHE:HE1 | 5 | 0.11 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:5:PHE:HE2 | 5 | 0.11 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:5:PHE:HE1 | 5 | 0.11 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:5:PHE:HE2 | 5 | 0.11 |
| (2,294) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:5:PHE:HE1 | 5 | 0.11 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:23:VAL:H | 7 | 0.11 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:23:VAL:H | 7 | 0.11 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:23:VAL:H | 7 | 0.11 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG12 | 1:A:23:VAL:H | 10 | 0.11 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG11 | 1:A:23:VAL:H | 10 | 0.11 |
| (2,291) | 1:A:21:VAL:HG13 | 1:A:23:VAL:H | 10 | 0.11 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:21:VAL:HA | 3 | 0.11 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:21:VAL:HA | 3 | 0.11 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:21:VAL:HA | 3 | 0.11 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HA | 3 | 0.11 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HA | 3 | 0.11 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HA | 3 | 0.11 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:21:VAL:HA | 16 | 0.11 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:21:VAL:HA | 16 | 0.11 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:21:VAL:HA | 16 | 0.11 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HA | 16 | 0.11 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HA | 16 | 0.11 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HA | 16 | 0.11 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:21:VAL:HA | 19 | 0.11 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:21:VAL:HA | 19 | 0.11 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:21:VAL:HA | 19 | 0.11 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:22:VAL:HA | 19 | 0.11 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:22:VAL:HA | 19 | 0.11 |
| (2,29) | 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:22:VAL:HA | 19 | 0.11 |
| (2,267) | 1:A:19:LYS:HA | 1:A:20:LEU:H | 2 | 0.11 |
| (2,267) | 1:A:19:LYS:HA | 1:A:20:LEU:H | 14 | 0.11 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB2 | 1 | 0.11 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB1 | 1 | 0.11 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB3 | 1 | 0.11 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB2 | 9 | 0.11 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB1 | 9 | 0.11 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB3 | 9 | 0.11 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB2 | 10 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB1 | 10 | 0.11 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB3 | 10 | 0.11 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB2 | 11 | 0.11 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB1 | 11 | 0.11 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB3 | 11 | 0.11 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB2 | 14 | 0.11 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB1 | 14 | 0.11 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB3 | 14 | 0.11 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB2 | 16 | 0.11 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB1 | 16 | 0.11 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB3 | 16 | 0.11 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB2 | 17 | 0.11 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB1 | 17 | 0.11 |
| (2,255) | 1:A:17:GLN:HA | 1:A:16:ALA:HB3 | 17 | 0.11 |
| (2,251) | 1:A:16:ALA:HA | 1:A:17:GLN:H | 2 | 0.11 |
| (2,251) | 1:A:16:ALA:HA | 1:A:17:GLN:H | 16 | 0.11 |
| (2,249) | 1:A:16:ALA:HA | 1:A:80:ASN:HA | 5 | 0.11 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:21:VAL:HB | 1 | 0.11 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:21:VAL:HB | 1 | 0.11 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:21:VAL:HB | 1 | 0.11 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB1 | 1:A:21:VAL:HB | 11 | 0.11 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB2 | 1:A:21:VAL:HB | 11 | 0.11 |
| (2,227) | 1:A:14:ALA:HB3 | 1:A:21:VAL:HB | 11 | 0.11 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG13 | 1:A:52:PHE:HB3 | 6 | 0.11 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG12 | 1:A:52:PHE:HB3 | 6 | 0.11 |
| (2,162) | 1:A:2:VAL:HG11 | 1:A:52:PHE:HB3 | 6 | 0.11 |
| (2,139) | 1:A:42:LYS:H | 1:A:42:LYS:HD3 | 19 | 0.11 |
| (2,139) | 1:A:42:LYS:H | 1:A:42:LYS:HD2 | 19 | 0.11 |
| (2,137) | 1:A:101:ALA:H | 1:A:98:ALA:HB1 | 3 | 0.11 |
| (2,137) | 1:A:101:ALA:H | 1:A:98:ALA:HB3 | 3 | 0.11 |
| (2,137) | 1:A:101:ALA:H | 1:A:98:ALA:HB2 | 3 | 0.11 |
| (2,137) | 1:A:98:ALA:HB1 | 1:A:97:GLN:H | 3 | 0.11 |
| (2,137) | 1:A:98:ALA:HB3 | 1:A:97:GLN:H | 3 | 0.11 |
| (2,137) | 1:A:98:ALA:HB2 | 1:A:97:GLN:H | 3 | 0.11 |
| (2,137) | 1:A:97:GLN:H | 1:A:96:LYS:HG3 | 3 | 0.11 |
| (2,137) | 1:A:101:ALA:H | 1:A:98:ALA:HB1 | 17 | 0.11 |
| (2,137) | 1:A:101:ALA:H | 1:A:98:ALA:HB3 | 17 | 0.11 |
| (2,137) | 1:A:101:ALA:H | 1:A:98:ALA:HB2 | 17 | 0.11 |
| (2,137) | 1:A:98:ALA:HB1 | 1:A:97:GLN:H | 17 | 0.11 |
| (2,137) | 1:A:98:ALA:HB3 | 1:A:97:GLN:H | 17 | 0.11 |
| (2,137) | 1:A:98:ALA:HB2 | 1:A:97:GLN:H | 17 | 0.11 |
| (2,137) | 1:A:97:GLN:H | 1:A:96:LYS:HG3 | 17 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,131) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 19 | 0.11 |
| (2,131) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 19 | 0.11 |
| (2,131) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 19 | 0.11 |
| (2,131) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:87:VAL:HG12 | 19 | 0.11 |
| (2,131) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:87:VAL:HG11 | 19 | 0.11 |
| (2,131) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:87:VAL:HG13 | 19 | 0.11 |
| (2,1290) | 1:A:5:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 2 | 0.11 |
| (2,1290) | 1:A:5:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 2 | 0.11 |
| (2,1290) | 1:A:5:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 12 | 0.11 |
| (2,1290) | 1:A:5:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 12 | 0.11 |
| (2,1290) | 1:A:5:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 16 | 0.11 |
| (2,1290) | 1:A:5:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 16 | 0.11 |
| (2,1290) | 1:A:5:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 20 | 0.11 |
| (2,1290) | 1:A:5:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 20 | 0.11 |
| (2,1281) | 1:A:102:ASN:HD21 | 1:A:20:LEU:HD21 | 2 | 0.11 |
| (2,1281) | 1:A:102:ASN:HD21 | 1:A:20:LEU:HD22 | 2 | 0.11 |
| (2,1281) | 1:A:102:ASN:HD21 | 1:A:20:LEU:HD23 | 2 | 0.11 |
| (2,1281) | 1:A:102:ASN:HD21 | 1:A:20:LEU:HD21 | 3 | 0.11 |
| (2,1281) | 1:A:102:ASN:HD21 | 1:A:20:LEU:HD22 | 3 | 0.11 |
| (2,1281) | 1:A:102:ASN:HD21 | 1:A:20:LEU:HD23 | 3 | 0.11 |
| (2,1281) | 1:A:102:ASN:HD21 | 1:A:20:LEU:HD21 | 12 | 0.11 |
| (2,1281) | 1:A:102:ASN:HD21 | 1:A:20:LEU:HD22 | 12 | 0.11 |
| (2,1281) | 1:A:102:ASN:HD21 | 1:A:20:LEU:HD23 | 12 | 0.11 |
| (2,1281) | 1:A:102:ASN:HD21 | 1:A:20:LEU:HD21 | 16 | 0.11 |
| (2,1281) | 1:A:102:ASN:HD21 | 1:A:20:LEU:HD22 | 16 | 0.11 |
| (2,1281) | 1:A:102:ASN:HD21 | 1:A:20:LEU:HD23 | 16 | 0.11 |
| (2,1212) | 1:A:100:ALA:H | 1:A:96:LYS:HD2 | 5 | 0.11 |
| (2,1202) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:42:LYS:H | 2 | 0.11 |
| (2,1202) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:42:LYS:H | 5 | 0.11 |
| (2,1202) | 1:A:39:MET:HA | 1:A:42:LYS:H | 12 | 0.11 |
| (2,1174) | 1:A:87:VAL:H | 1:A:86:LYS:HG2 | 12 | 0.11 |
| (2,1171) | 1:A:86:LYS:HB2 | 1:A:86:LYS:H | 11 | 0.11 |
| (2,1164) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:84:VAL:H | 3 | 0.11 |
| (2,1164) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:84:VAL:H | 3 | 0.11 |
| (2,1164) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:84:VAL:H | 3 | 0.11 |
| (2,1164) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:84:VAL:H | 7 | 0.11 |
| (2,1164) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:84:VAL:H | 7 | 0.11 |
| (2,1164) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:84:VAL:H | 7 | 0.11 |
| (2,1164) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:84:VAL:H | 11 | 0.11 |
| (2,1164) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:84:VAL:H | 11 | 0.11 |
| (2,1164) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:84:VAL:H | 11 | 0.11 |
| (2,1164) | 1:A:84:VAL:HG22 | 1:A:84:VAL:H | 12 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1164) | 1:A:84:VAL:HG21 | 1:A:84:VAL:H | 12 | 0.11 |
| (2,1164) | 1:A:84:VAL:HG23 | 1:A:84:VAL:H | 12 | 0.11 |
| (2,1148) | 1:A:79:LYS:H | 1:A:82:LYS:H | 12 | 0.11 |
| (2,1148) | 1:A:79:LYS:H | 1:A:82:LYS:H | 14 | 0.11 |
| (2,1148) | 1:A:79:LYS:H | 1:A:82:LYS:H | 20 | 0.11 |
| (2,1139) | 1:A:80:ASN:H | 1:A:79:LYS:HB3 | 8 | 0.11 |
| (2,1139) | 1:A:80:ASN:H | 1:A:79:LYS:HB3 | 15 | 0.11 |
| (2,1086) | 1:A:66:LYS:H | 1:A:66:LYS:HG3 | 3 | 0.11 |
| (2,1079) | 1:A:65:GLN:H | 1:A:66:LYS:HB2 | 6 | 0.11 |
| (2,1079) | 1:A:65:GLN:H | 1:A:66:LYS:HB2 | 13 | 0.11 |
| (2,1046) | 1:A:72:MET:H | 1:A:72:MET:HE1 | 8 | 0.11 |
| (2,1046) | 1:A:72:MET:H | 1:A:72:MET:HE2 | 8 | 0.11 |
| (2,1046) | 1:A:72:MET:H | 1:A:72:MET:HE3 | 8 | 0.11 |
| (2,1046) | 1:A:72:MET:H | 1:A:72:MET:HE1 | 13 | 0.11 |
| (2,1046) | 1:A:72:MET:H | 1:A:72:MET:HE2 | 13 | 0.11 |
| (2,1046) | 1:A:72:MET:H | 1:A:72:MET:HE3 | 13 | 0.11 |
| (2,1038) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:56:ASP:HB2 | 3 | 0.11 |
| (2,1037) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:56:ASP:HB3 | 10 | 0.11 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 6 | 0.11 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 6 | 0.11 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 6 | 0.11 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 12 | 0.11 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 12 | 0.11 |
| (2,1036) | 1:A:56:ASP:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 12 | 0.11 |
| (2,1033) | 1:A:5:PHE:H | 1:A:55:LEU:H | 5 | 0.11 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG21 | 13 | 0.11 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG23 | 13 | 0.11 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG22 | 13 | 0.11 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG21 | 14 | 0.11 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG23 | 14 | 0.11 |
| (2,1031) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:3:THR:HG22 | 14 | 0.11 |
| (2,1030) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:2:VAL:HB | 6 | 0.11 |
| (2,1030) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:2:VAL:HB | 19 | 0.11 |
| (2,1018) | 1:A:52:PHE:HB2 | 1:A:52:PHE:H | 17 | 0.11 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD21 | 4 | 0.11 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD22 | 4 | 0.11 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:20:LEU:HD23 | 4 | 0.11 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD21 | 4 | 0.11 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD23 | 4 | 0.11 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD22 | 4 | 0.11 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG23 | 4 | 0.11 |
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG21 | 4 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,100) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:2:VAL:HG22 | 4 | 0.11 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD13 | 4 | 0.11 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD11 | 4 | 0.11 |
| (2,100) | 1:A:22:VAL:H | 1:A:77:LEU:HD12 | 4 | 0.11 |
| (1,8) | 1:A:35:MET:N | 1:A:31:GLY:O | 13 | 0.11 |
| (1,7) | 1:A:35:MET:H | 1:A:31:GLY:O | 14 | 0.11 |
| (1,5) | 1:A:16:ALA:H | 1:A:12:ASP:O | 10 | 0.11 |
| (1,47) | 1:A:79:LYS:H | 1:A:83:GLU:O | 13 | 0.11 |
| (1,36) | 1:A:101:ALA:H | 1:A:97:GLN:O | 15 | 0.11 |
| (1,24) | 1:A:46:GLN:H | 1:A:42:LYS:O | 12 | 0.11 |

10 Dihedral-angle violation analysis [i](#)

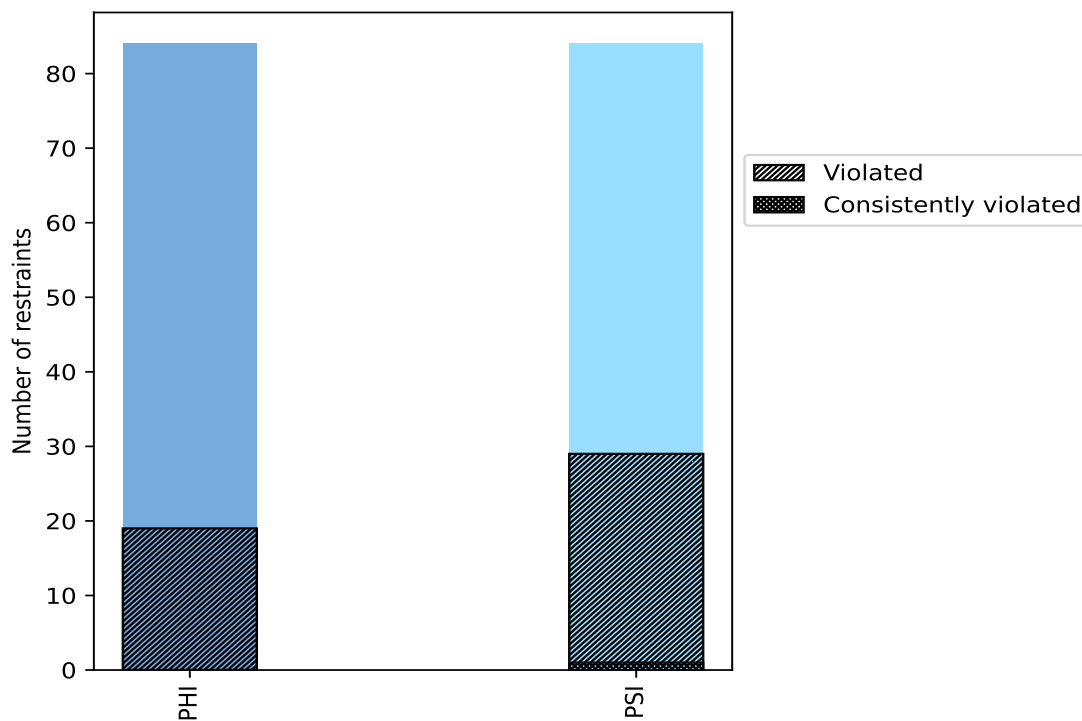
10.1 Summary of dihedral-angle violations [i](#)

The following table provides the summary of dihedral-angle violations in different dihedral-angle types. Violations less than 1° are not included in the calculation.

| Angle type | Count | % ¹ | Violated ³ | | | Consistently Violated ⁴ | | |
|------------|-------|----------------|-----------------------|----------------|----------------|------------------------------------|----------------|----------------|
| | | | Count | % ² | % ¹ | Count | % ² | % ¹ |
| PHI | 84 | 50.0 | 19 | 22.6 | 11.3 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| PSI | 84 | 50.0 | 29 | 34.5 | 17.3 | 1 | 1.2 | 0.6 |
| Total | 168 | 100.0 | 48 | 28.6 | 28.6 | 1 | 0.6 | 0.6 |

¹ percentage calculated with respect to total number of dihedral-angle restraints, ² percentage calculated with respect to number of restraints in a particular dihedral-angle type, ³ violated in at least one model, ⁴ violated in all the models

10.1.1 Bar chart : Distribution of dihedral-angles and violations [i](#)



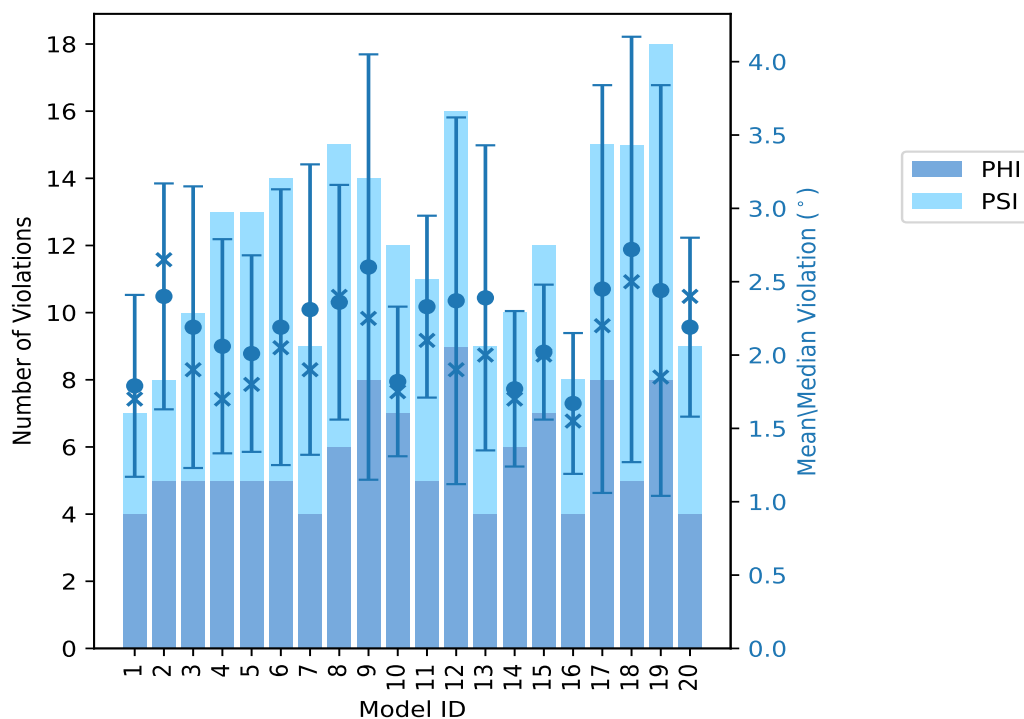
Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories

10.2 Dihedral-angle violation statistics for each model [i](#)

The following table provides the dihedral-angle violation statistics for each model in the ensemble. Violations less than 1° are not included in the statistics.

| Model ID | Number of violations | | | Mean (°) | Max (°) | SD (°) | Median (°) |
|----------|----------------------|-----|-------|----------|---------|--------|------------|
| | PHI | PSI | Total | | | | |
| 1 | 4 | 3 | 7 | 1.79 | 2.8 | 0.62 | 1.7 |
| 2 | 5 | 3 | 8 | 2.4 | 3.3 | 0.77 | 2.65 |
| 3 | 5 | 5 | 10 | 2.19 | 4.4 | 0.96 | 1.9 |
| 4 | 5 | 8 | 13 | 2.06 | 3.9 | 0.73 | 1.7 |
| 5 | 5 | 8 | 13 | 2.01 | 3.2 | 0.67 | 1.8 |
| 6 | 5 | 9 | 14 | 2.19 | 4.4 | 0.94 | 2.05 |
| 7 | 4 | 5 | 9 | 2.31 | 4.2 | 0.99 | 1.9 |
| 8 | 6 | 9 | 15 | 2.36 | 3.8 | 0.8 | 2.4 |
| 9 | 8 | 6 | 14 | 2.6 | 6.9 | 1.45 | 2.25 |
| 10 | 7 | 5 | 12 | 1.82 | 2.8 | 0.51 | 1.75 |
| 11 | 5 | 6 | 11 | 2.33 | 3.4 | 0.62 | 2.1 |
| 12 | 9 | 7 | 16 | 2.37 | 5.2 | 1.25 | 1.9 |
| 13 | 4 | 5 | 9 | 2.39 | 4.9 | 1.04 | 2.0 |
| 14 | 6 | 4 | 10 | 1.77 | 2.6 | 0.53 | 1.7 |
| 15 | 7 | 5 | 12 | 2.02 | 2.7 | 0.46 | 2.0 |
| 16 | 4 | 4 | 8 | 1.67 | 2.6 | 0.48 | 1.55 |
| 17 | 8 | 7 | 15 | 2.45 | 6.6 | 1.39 | 2.2 |
| 18 | 5 | 10 | 15 | 2.72 | 6.7 | 1.45 | 2.5 |
| 19 | 8 | 10 | 18 | 2.44 | 6.6 | 1.4 | 1.85 |
| 20 | 4 | 5 | 9 | 2.19 | 3.1 | 0.61 | 2.4 |

10.2.1 Bar graph : Dihedral violation statistics for each model [i](#)



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

10.3 Dihedral-angle violation statistics for the ensemble [i](#)

Violation analysis may find that some restraints are violated in very few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of ensemble.

| Number of violated restraints | | | Fraction of the ensemble | |
|-------------------------------|-----|-------|--------------------------|------|
| PHI | PSI | Total | Count ¹ | % |
| 3 | 9 | 12 | 1 | 5.0 |
| 5 | 6 | 11 | 2 | 10.0 |
| 3 | 1 | 4 | 3 | 15.0 |
| 0 | 3 | 3 | 4 | 20.0 |
| 1 | 4 | 5 | 5 | 25.0 |
| 1 | 0 | 1 | 6 | 30.0 |
| 1 | 1 | 2 | 7 | 35.0 |
| 0 | 0 | 0 | 8 | 40.0 |
| 0 | 0 | 0 | 9 | 45.0 |
| 0 | 3 | 3 | 10 | 50.0 |
| 1 | 1 | 2 | 11 | 55.0 |

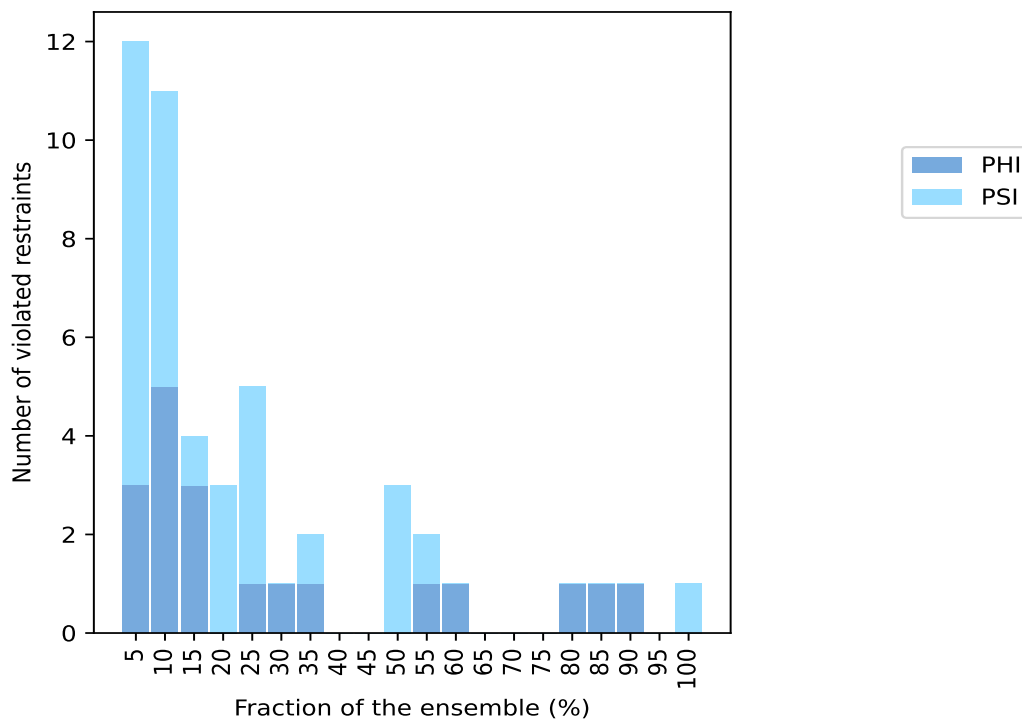
Continued on next page...

Continued from previous page...

| Number of violated restraints | | | Fraction of the ensemble | |
|-------------------------------|-----|-------|--------------------------|-------|
| PHI | PSI | Total | Count ¹ | % |
| 1 | 0 | 1 | 12 | 60.0 |
| 0 | 0 | 0 | 13 | 65.0 |
| 0 | 0 | 0 | 14 | 70.0 |
| 0 | 0 | 0 | 15 | 75.0 |
| 1 | 0 | 1 | 16 | 80.0 |
| 1 | 0 | 1 | 17 | 85.0 |
| 1 | 0 | 1 | 18 | 90.0 |
| 0 | 0 | 0 | 19 | 95.0 |
| 0 | 1 | 1 | 20 | 100.0 |

¹ Number of models with violations

10.3.1 Bar graph : Dihedral-angle Violation statistics for the ensemble [i](#)

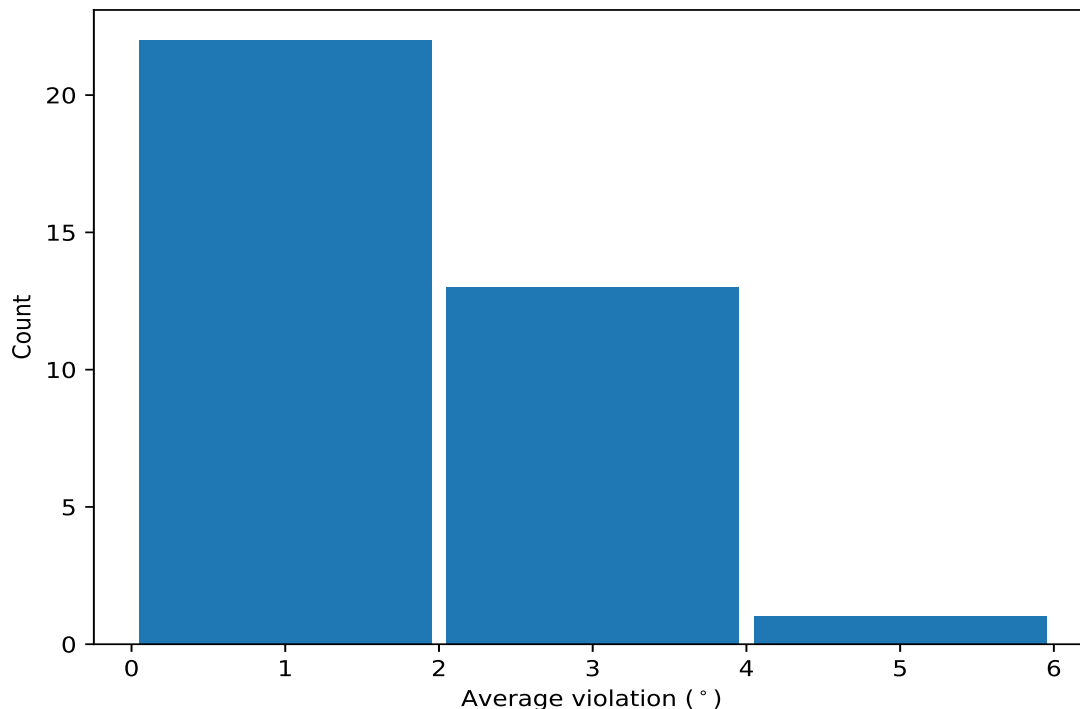


10.4 Most violated dihedral-angle restraints in the ensemble [i](#)

10.4.1 Histogram : Distribution of mean dihedral-angle violations [i](#)

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

in the ensemble



10.4.2 Table: Most violated dihedral-angle restraints [i](#)

The following table provides the mean and the standard deviation of the violation for each restraint sorted by number of violated models and the mean value. The Key (restraint list ID, restraint ID) is the unique identifier for a given restraint.

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Models ¹ | Mean | SD ² | Median |
|---------|--------------|---------------|----------------|---------------|---------------------|------|-----------------|--------|
| (1,154) | 1:A:94:ALA:N | 1:A:94:ALA:CA | 1:A:94:ALA:C | 1:A:95:ILE:N | 20 | 2.74 | 0.54 | 2.8 |
| (1,63) | 1:A:35:MET:C | 1:A:36:ILE:N | 1:A:36:ILE:CA | 1:A:36:ILE:C | 18 | 2.43 | 0.69 | 2.3 |
| (1,165) | 1:A:99:ILE:C | 1:A:100:ALA:N | 1:A:100:ALA:CA | 1:A:100:ALA:C | 17 | 2.59 | 0.97 | 2.4 |
| (1,151) | 1:A:92:PRO:C | 1:A:93:ALA:N | 1:A:93:ALA:CA | 1:A:93:ALA:C | 16 | 2.06 | 0.56 | 2.15 |
| (1,87) | 1:A:48:PRO:C | 1:A:49:GLN:N | 1:A:49:GLN:CA | 1:A:49:GLN:C | 12 | 4.03 | 2.23 | 3.95 |
| (1,86) | 1:A:48:PRO:N | 1:A:48:PRO:CA | 1:A:48:PRO:C | 1:A:49:GLN:N | 11 | 2.66 | 0.82 | 2.9 |
| (1,47) | 1:A:25:PHE:C | 1:A:26:TYR:N | 1:A:26:TYR:CA | 1:A:26:TYR:C | 11 | 2.65 | 0.77 | 2.6 |
| (1,80) | 1:A:44:SER:N | 1:A:44:SER:CA | 1:A:44:SER:C | 1:A:45:GLU:N | 10 | 2.49 | 1.18 | 2.1 |
| (1,98) | 1:A:54:LYS:N | 1:A:54:LYS:CA | 1:A:54:LYS:C | 1:A:55:LEU:N | 10 | 2.32 | 0.85 | 2.1 |
| (1,52) | 1:A:28:THR:N | 1:A:28:THR:CA | 1:A:28:THR:C | 1:A:29:TRP:N | 10 | 1.95 | 0.52 | 1.95 |
| (1,128) | 1:A:73:PRO:N | 1:A:73:PRO:CA | 1:A:73:PRO:C | 1:A:74:THR:N | 7 | 1.97 | 0.76 | 1.7 |
| (1,51) | 1:A:27:ALA:C | 1:A:28:THR:N | 1:A:28:THR:CA | 1:A:28:THR:C | 7 | 1.37 | 0.34 | 1.2 |
| (1,79) | 1:A:43:PHE:C | 1:A:44:SER:N | 1:A:44:SER:CA | 1:A:44:SER:C | 6 | 1.8 | 0.33 | 1.95 |
| (1,130) | 1:A:74:THR:N | 1:A:74:THR:CA | 1:A:74:THR:C | 1:A:75:LEU:N | 5 | 2.42 | 1.3 | 1.8 |
| (1,84) | 1:A:47:TYR:N | 1:A:47:TYR:CA | 1:A:47:TYR:C | 1:A:48:PRO:N | 5 | 1.94 | 0.48 | 2.1 |
| (1,53) | 1:A:30:CYS:C | 1:A:31:GLY:N | 1:A:31:GLY:CA | 1:A:31:GLY:C | 5 | 1.68 | 0.48 | 1.7 |
| (1,4) | 1:A:3:THR:N | 1:A:3:THR:CA | 1:A:3:THR:C | 1:A:4:GLN:N | 5 | 1.58 | 0.55 | 1.3 |
| (1,38) | 1:A:21:VAL:N | 1:A:21:VAL:CA | 1:A:21:VAL:C | 1:A:22:VAL:N | 5 | 1.26 | 0.14 | 1.3 |
| (1,96) | 1:A:53:TYR:N | 1:A:53:TYR:CA | 1:A:53:TYR:C | 1:A:54:LYS:N | 4 | 2.15 | 0.98 | 1.75 |
| (1,88) | 1:A:49:GLN:N | 1:A:49:GLN:CA | 1:A:49:GLN:C | 1:A:50:ALA:N | 4 | 1.8 | 0.6 | 1.6 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

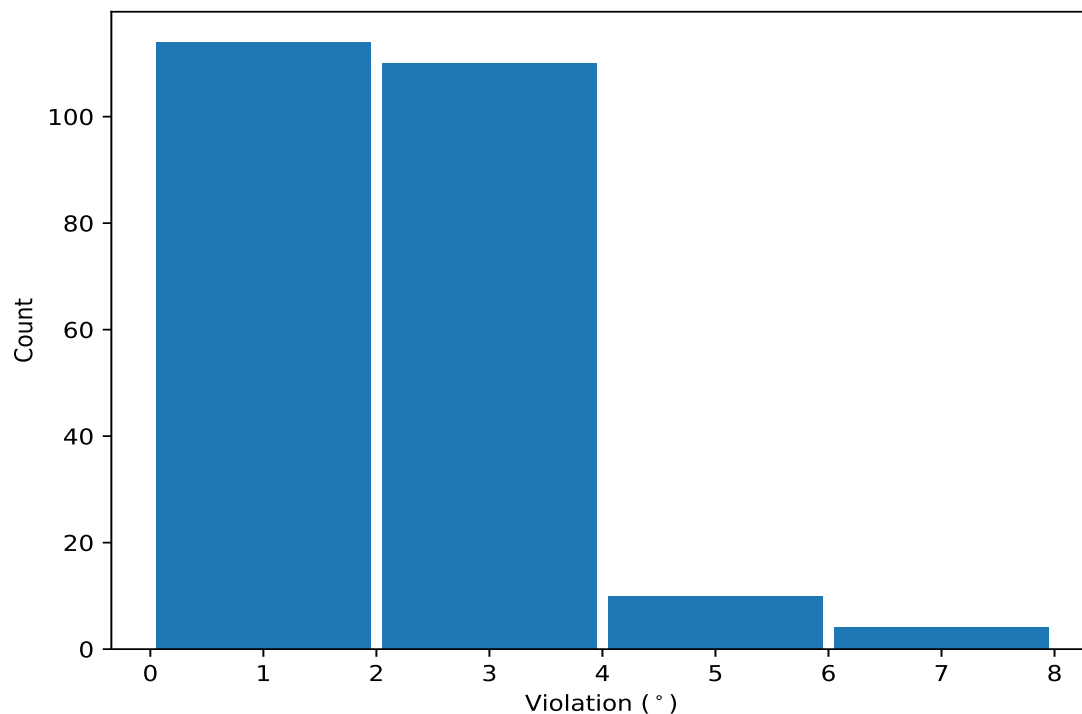
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Models ¹ | Mean | SD ² | Median |
|---------|--------------|---------------|---------------|--------------|---------------------|------|-----------------|--------|
| (1,64) | 1:A:36:ILE:N | 1:A:36:ILE:CA | 1:A:36:ILE:C | 1:A:37:ALA:N | 4 | 1.65 | 0.52 | 1.5 |
| (1,34) | 1:A:19:LYS:N | 1:A:19:LYS:CA | 1:A:19:LYS:C | 1:A:20:LEU:N | 3 | 2.7 | 0.22 | 2.8 |
| (1,83) | 1:A:46:GLN:C | 1:A:47:TYR:N | 1:A:47:TYR:CA | 1:A:47:TYR:C | 3 | 1.97 | 0.73 | 1.5 |
| (1,45) | 1:A:24:ALA:C | 1:A:25:PHE:N | 1:A:25:PHE:CA | 1:A:25:PHE:C | 3 | 1.7 | 0.43 | 1.5 |
| (1,43) | 1:A:23:VAL:C | 1:A:24:ALA:N | 1:A:24:ALA:CA | 1:A:24:ALA:C | 3 | 1.43 | 0.4 | 1.2 |
| (1,8) | 1:A:5:PHE:N | 1:A:5:PHE:CA | 1:A:5:PHE:C | 1:A:6:LYS:N | 2 | 2.05 | 0.15 | 2.05 |
| (1,40) | 1:A:22:VAL:N | 1:A:22:VAL:CA | 1:A:22:VAL:C | 1:A:23:VAL:N | 2 | 2.05 | 0.55 | 2.05 |
| (1,103) | 1:A:58:ASP:C | 1:A:59:GLU:N | 1:A:59:GLU:CA | 1:A:59:GLU:C | 2 | 1.85 | 0.15 | 1.85 |
| (1,132) | 1:A:75:LEU:N | 1:A:75:LEU:CA | 1:A:75:LEU:C | 1:A:76:LEU:N | 2 | 1.8 | 0.6 | 1.8 |
| (1,122) | 1:A:69:VAL:N | 1:A:69:VAL:CA | 1:A:69:VAL:C | 1:A:70:SER:N | 2 | 1.7 | 0.2 | 1.7 |
| (1,33) | 1:A:18:ASP:C | 1:A:19:LYS:N | 1:A:19:LYS:CA | 1:A:19:LYS:C | 2 | 1.55 | 0.15 | 1.55 |
| (1,1) | 1:A:1:MET:C | 1:A:2:VAL:N | 1:A:2:VAL:CA | 1:A:2:VAL:C | 2 | 1.5 | 0.3 | 1.5 |
| (1,141) | 1:A:79:LYS:C | 1:A:80:ASN:N | 1:A:80:ASN:CA | 1:A:80:ASN:C | 2 | 1.5 | 0.3 | 1.5 |
| (1,6) | 1:A:4:GLN:N | 1:A:4:GLN:CA | 1:A:4:GLN:C | 1:A:5:PHE:N | 2 | 1.3 | 0.2 | 1.3 |
| (1,42) | 1:A:23:VAL:N | 1:A:23:VAL:CA | 1:A:23:VAL:C | 1:A:24:ALA:N | 2 | 1.25 | 0.05 | 1.25 |
| (1,89) | 1:A:49:GLN:C | 1:A:50:ALA:N | 1:A:50:ALA:CA | 1:A:50:ALA:C | 2 | 1.15 | 0.05 | 1.15 |

¹ Number of violated models, ²Standard deviation, All angle values are in degree (°)

10.5 All violated dihedral-angle restraints [i](#)

10.5.1 Histogram : Distribution of violations [i](#)

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



10.5.2 Table: All violated dihedral-angle restraints [\(i\)](#)

The following table lists the absolute value of the violation for each restraint in the ensemble sorted by its value. The Key (restraint list ID, restraint ID) is the unique identifier for a given restraint.

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|--------------|---------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,87) | 1:A:48:PRO:C | 1:A:49:GLN:N | 1:A:49:GLN:CA | 1:A:49:GLN:C | 9 | 6.9 |
| (1,87) | 1:A:48:PRO:C | 1:A:49:GLN:N | 1:A:49:GLN:CA | 1:A:49:GLN:C | 18 | 6.7 |
| (1,87) | 1:A:48:PRO:C | 1:A:49:GLN:N | 1:A:49:GLN:CA | 1:A:49:GLN:C | 17 | 6.6 |
| (1,87) | 1:A:48:PRO:C | 1:A:49:GLN:N | 1:A:49:GLN:CA | 1:A:49:GLN:C | 19 | 6.6 |
| (1,87) | 1:A:48:PRO:C | 1:A:49:GLN:N | 1:A:49:GLN:CA | 1:A:49:GLN:C | 12 | 5.2 |
| (1,87) | 1:A:48:PRO:C | 1:A:49:GLN:N | 1:A:49:GLN:CA | 1:A:49:GLN:C | 13 | 4.9 |
| (1,130) | 1:A:74:THR:N | 1:A:74:THR:CA | 1:A:74:THR:C | 1:A:75:LEU:N | 19 | 4.9 |
| (1,80) | 1:A:44:SER:N | 1:A:44:SER:CA | 1:A:44:SER:C | 1:A:45:GLU:N | 18 | 4.8 |
| (1,98) | 1:A:54:LYS:N | 1:A:54:LYS:CA | 1:A:54:LYS:C | 1:A:55:LEU:N | 12 | 4.4 |
| (1,80) | 1:A:44:SER:N | 1:A:44:SER:CA | 1:A:44:SER:C | 1:A:45:GLU:N | 12 | 4.4 |
| (1,165) | 1:A:99:ILE:C | 1:A:100:ALA:N | 1:A:100:ALA:CA | 1:A:100:ALA:C | 3 | 4.4 |
| (1,165) | 1:A:99:ILE:C | 1:A:100:ALA:N | 1:A:100:ALA:CA | 1:A:100:ALA:C | 6 | 4.4 |
| (1,47) | 1:A:25:PHE:C | 1:A:26:TYR:N | 1:A:26:TYR:CA | 1:A:26:TYR:C | 7 | 4.2 |
| (1,47) | 1:A:25:PHE:C | 1:A:26:TYR:N | 1:A:26:TYR:CA | 1:A:26:TYR:C | 9 | 4.0 |
| (1,44) | 1:A:24:ALA:N | 1:A:24:ALA:CA | 1:A:24:ALA:C | 1:A:25:PHE:N | 4 | 3.9 |
| (1,96) | 1:A:53:TYR:N | 1:A:53:TYR:CA | 1:A:53:TYR:C | 1:A:54:LYS:N | 6 | 3.8 |
| (1,165) | 1:A:99:ILE:C | 1:A:100:ALA:N | 1:A:100:ALA:CA | 1:A:100:ALA:C | 8 | 3.8 |
| (1,154) | 1:A:94:ALA:N | 1:A:94:ALA:CA | 1:A:94:ALA:C | 1:A:95:ILE:N | 18 | 3.8 |
| (1,165) | 1:A:99:ILE:C | 1:A:100:ALA:N | 1:A:100:ALA:CA | 1:A:100:ALA:C | 17 | 3.7 |
| (1,86) | 1:A:48:PRO:N | 1:A:48:PRO:CA | 1:A:48:PRO:C | 1:A:49:GLN:N | 12 | 3.6 |
| (1,63) | 1:A:35:MET:C | 1:A:36:ILE:N | 1:A:36:ILE:CA | 1:A:36:ILE:C | 17 | 3.6 |
| (1,165) | 1:A:99:ILE:C | 1:A:100:ALA:N | 1:A:100:ALA:CA | 1:A:100:ALA:C | 19 | 3.6 |
| (1,86) | 1:A:48:PRO:N | 1:A:48:PRO:CA | 1:A:48:PRO:C | 1:A:49:GLN:N | 19 | 3.5 |
| (1,154) | 1:A:94:ALA:N | 1:A:94:ALA:CA | 1:A:94:ALA:C | 1:A:95:ILE:N | 7 | 3.5 |
| (1,86) | 1:A:48:PRO:N | 1:A:48:PRO:CA | 1:A:48:PRO:C | 1:A:49:GLN:N | 11 | 3.4 |
| (1,63) | 1:A:35:MET:C | 1:A:36:ILE:N | 1:A:36:ILE:CA | 1:A:36:ILE:C | 8 | 3.4 |
| (1,63) | 1:A:35:MET:C | 1:A:36:ILE:N | 1:A:36:ILE:CA | 1:A:36:ILE:C | 2 | 3.3 |
| (1,128) | 1:A:73:PRO:N | 1:A:73:PRO:CA | 1:A:73:PRO:C | 1:A:74:THR:N | 8 | 3.3 |
| (1,86) | 1:A:48:PRO:N | 1:A:48:PRO:CA | 1:A:48:PRO:C | 1:A:49:GLN:N | 18 | 3.2 |
| (1,63) | 1:A:35:MET:C | 1:A:36:ILE:N | 1:A:36:ILE:CA | 1:A:36:ILE:C | 3 | 3.2 |
| (1,63) | 1:A:35:MET:C | 1:A:36:ILE:N | 1:A:36:ILE:CA | 1:A:36:ILE:C | 9 | 3.2 |
| (1,154) | 1:A:94:ALA:N | 1:A:94:ALA:CA | 1:A:94:ALA:C | 1:A:95:ILE:N | 5 | 3.2 |
| (1,86) | 1:A:48:PRO:N | 1:A:48:PRO:CA | 1:A:48:PRO:C | 1:A:49:GLN:N | 9 | 3.1 |
| (1,154) | 1:A:94:ALA:N | 1:A:94:ALA:CA | 1:A:94:ALA:C | 1:A:95:ILE:N | 13 | 3.1 |
| (1,154) | 1:A:94:ALA:N | 1:A:94:ALA:CA | 1:A:94:ALA:C | 1:A:95:ILE:N | 20 | 3.1 |
| (1,151) | 1:A:92:PRO:C | 1:A:93:ALA:N | 1:A:93:ALA:CA | 1:A:93:ALA:C | 7 | 3.1 |
| (1,87) | 1:A:48:PRO:C | 1:A:49:GLN:N | 1:A:49:GLN:CA | 1:A:49:GLN:C | 11 | 3.0 |
| (1,83) | 1:A:46:GLN:C | 1:A:47:TYR:N | 1:A:47:TYR:CA | 1:A:47:TYR:C | 11 | 3.0 |
| (1,52) | 1:A:28:THR:N | 1:A:28:THR:CA | 1:A:28:THR:C | 1:A:29:TRP:N | 18 | 3.0 |
| (1,154) | 1:A:94:ALA:N | 1:A:94:ALA:CA | 1:A:94:ALA:C | 1:A:95:ILE:N | 2 | 3.0 |
| (1,154) | 1:A:94:ALA:N | 1:A:94:ALA:CA | 1:A:94:ALA:C | 1:A:95:ILE:N | 9 | 3.0 |
| (1,98) | 1:A:54:LYS:N | 1:A:54:LYS:CA | 1:A:54:LYS:C | 1:A:55:LEU:N | 6 | 2.9 |
| (1,86) | 1:A:48:PRO:N | 1:A:48:PRO:CA | 1:A:48:PRO:C | 1:A:49:GLN:N | 8 | 2.9 |
| (1,80) | 1:A:44:SER:N | 1:A:44:SER:CA | 1:A:44:SER:C | 1:A:45:GLU:N | 19 | 2.9 |
| (1,34) | 1:A:19:LYS:N | 1:A:19:LYS:CA | 1:A:19:LYS:C | 1:A:20:LEU:N | 2 | 2.9 |
| (1,154) | 1:A:94:ALA:N | 1:A:94:ALA:CA | 1:A:94:ALA:C | 1:A:95:ILE:N | 3 | 2.9 |
| (1,154) | 1:A:94:ALA:N | 1:A:94:ALA:CA | 1:A:94:ALA:C | 1:A:95:ILE:N | 8 | 2.9 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|--------------|---------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,134) | 1:A:76:LEU:N | 1:A:76:LEU:CA | 1:A:76:LEU:C | 1:A:77:LEU:N | 4 | 2.9 |
| (1,98) | 1:A:54:LYS:N | 1:A:54:LYS:CA | 1:A:54:LYS:C | 1:A:55:LEU:N | 8 | 2.8 |
| (1,88) | 1:A:49:GLN:N | 1:A:49:GLN:CA | 1:A:49:GLN:C | 1:A:50:ALA:N | 5 | 2.8 |
| (1,86) | 1:A:48:PRO:N | 1:A:48:PRO:CA | 1:A:48:PRO:C | 1:A:49:GLN:N | 17 | 2.8 |
| (1,63) | 1:A:35:MET:C | 1:A:36:ILE:N | 1:A:36:ILE:CA | 1:A:36:ILE:C | 1 | 2.8 |
| (1,63) | 1:A:35:MET:C | 1:A:36:ILE:N | 1:A:36:ILE:CA | 1:A:36:ILE:C | 13 | 2.8 |
| (1,34) | 1:A:19:LYS:N | 1:A:19:LYS:CA | 1:A:19:LYS:C | 1:A:20:LEU:N | 19 | 2.8 |
| (1,154) | 1:A:94:ALA:N | 1:A:94:ALA:CA | 1:A:94:ALA:C | 1:A:95:ILE:N | 10 | 2.8 |
| (1,154) | 1:A:94:ALA:N | 1:A:94:ALA:CA | 1:A:94:ALA:C | 1:A:95:ILE:N | 11 | 2.8 |
| (1,154) | 1:A:94:ALA:N | 1:A:94:ALA:CA | 1:A:94:ALA:C | 1:A:95:ILE:N | 17 | 2.8 |
| (1,151) | 1:A:92:PRO:C | 1:A:93:ALA:N | 1:A:93:ALA:CA | 1:A:93:ALA:C | 2 | 2.8 |
| (1,100) | 1:A:57:VAL:N | 1:A:57:VAL:CA | 1:A:57:VAL:C | 1:A:58:ASP:N | 18 | 2.8 |
| (1,63) | 1:A:35:MET:C | 1:A:36:ILE:N | 1:A:36:ILE:CA | 1:A:36:ILE:C | 5 | 2.7 |
| (1,47) | 1:A:25:PHE:C | 1:A:26:TYR:N | 1:A:26:TYR:CA | 1:A:26:TYR:C | 4 | 2.7 |
| (1,47) | 1:A:25:PHE:C | 1:A:26:TYR:N | 1:A:26:TYR:CA | 1:A:26:TYR:C | 17 | 2.7 |
| (1,47) | 1:A:25:PHE:C | 1:A:26:TYR:N | 1:A:26:TYR:CA | 1:A:26:TYR:C | 20 | 2.7 |
| (1,128) | 1:A:73:PRO:N | 1:A:73:PRO:CA | 1:A:73:PRO:C | 1:A:74:THR:N | 15 | 2.7 |
| (1,80) | 1:A:44:SER:N | 1:A:44:SER:CA | 1:A:44:SER:C | 1:A:45:GLU:N | 17 | 2.6 |
| (1,52) | 1:A:28:THR:N | 1:A:28:THR:CA | 1:A:28:THR:C | 1:A:29:TRP:N | 9 | 2.6 |
| (1,47) | 1:A:25:PHE:C | 1:A:26:TYR:N | 1:A:26:TYR:CA | 1:A:26:TYR:C | 15 | 2.6 |
| (1,40) | 1:A:22:VAL:N | 1:A:22:VAL:CA | 1:A:22:VAL:C | 1:A:23:VAL:N | 20 | 2.6 |
| (1,154) | 1:A:94:ALA:N | 1:A:94:ALA:CA | 1:A:94:ALA:C | 1:A:95:ILE:N | 1 | 2.6 |
| (1,154) | 1:A:94:ALA:N | 1:A:94:ALA:CA | 1:A:94:ALA:C | 1:A:95:ILE:N | 14 | 2.6 |
| (1,154) | 1:A:94:ALA:N | 1:A:94:ALA:CA | 1:A:94:ALA:C | 1:A:95:ILE:N | 16 | 2.6 |
| (1,84) | 1:A:47:TYR:N | 1:A:47:TYR:CA | 1:A:47:TYR:C | 1:A:48:PRO:N | 9 | 2.5 |
| (1,64) | 1:A:36:ILE:N | 1:A:36:ILE:CA | 1:A:36:ILE:C | 1:A:37:ALA:N | 8 | 2.5 |
| (1,53) | 1:A:30:CYS:C | 1:A:31:GLY:N | 1:A:31:GLY:CA | 1:A:31:GLY:C | 10 | 2.5 |
| (1,47) | 1:A:25:PHE:C | 1:A:26:TYR:N | 1:A:26:TYR:CA | 1:A:26:TYR:C | 2 | 2.5 |
| (1,4) | 1:A:3:THR:N | 1:A:3:THR:CA | 1:A:3:THR:C | 1:A:4:GLN:N | 11 | 2.5 |
| (1,165) | 1:A:99:ILE:C | 1:A:100:ALA:N | 1:A:100:ALA:CA | 1:A:100:ALA:C | 4 | 2.5 |
| (1,165) | 1:A:99:ILE:C | 1:A:100:ALA:N | 1:A:100:ALA:CA | 1:A:100:ALA:C | 20 | 2.5 |
| (1,151) | 1:A:92:PRO:C | 1:A:93:ALA:N | 1:A:93:ALA:CA | 1:A:93:ALA:C | 5 | 2.5 |
| (1,151) | 1:A:92:PRO:C | 1:A:93:ALA:N | 1:A:93:ALA:CA | 1:A:93:ALA:C | 15 | 2.5 |
| (1,151) | 1:A:92:PRO:C | 1:A:93:ALA:N | 1:A:93:ALA:CA | 1:A:93:ALA:C | 18 | 2.5 |
| (1,130) | 1:A:74:THR:N | 1:A:74:THR:CA | 1:A:74:THR:C | 1:A:75:LEU:N | 18 | 2.5 |
| (1,98) | 1:A:54:LYS:N | 1:A:54:LYS:CA | 1:A:54:LYS:C | 1:A:55:LEU:N | 20 | 2.4 |
| (1,87) | 1:A:48:PRO:C | 1:A:49:GLN:N | 1:A:49:GLN:CA | 1:A:49:GLN:C | 15 | 2.4 |
| (1,86) | 1:A:48:PRO:N | 1:A:48:PRO:CA | 1:A:48:PRO:C | 1:A:49:GLN:N | 5 | 2.4 |
| (1,63) | 1:A:35:MET:C | 1:A:36:ILE:N | 1:A:36:ILE:CA | 1:A:36:ILE:C | 18 | 2.4 |
| (1,34) | 1:A:19:LYS:N | 1:A:19:LYS:CA | 1:A:19:LYS:C | 1:A:20:LEU:N | 14 | 2.4 |
| (1,165) | 1:A:99:ILE:C | 1:A:100:ALA:N | 1:A:100:ALA:CA | 1:A:100:ALA:C | 2 | 2.4 |
| (1,165) | 1:A:99:ILE:C | 1:A:100:ALA:N | 1:A:100:ALA:CA | 1:A:100:ALA:C | 14 | 2.4 |
| (1,154) | 1:A:94:ALA:N | 1:A:94:ALA:CA | 1:A:94:ALA:C | 1:A:95:ILE:N | 6 | 2.4 |
| (1,154) | 1:A:94:ALA:N | 1:A:94:ALA:CA | 1:A:94:ALA:C | 1:A:95:ILE:N | 19 | 2.4 |
| (1,151) | 1:A:92:PRO:C | 1:A:93:ALA:N | 1:A:93:ALA:CA | 1:A:93:ALA:C | 8 | 2.4 |
| (1,132) | 1:A:75:LEU:N | 1:A:75:LEU:CA | 1:A:75:LEU:C | 1:A:76:LEU:N | 5 | 2.4 |
| (1,98) | 1:A:54:LYS:N | 1:A:54:LYS:CA | 1:A:54:LYS:C | 1:A:55:LEU:N | 13 | 2.3 |
| (1,80) | 1:A:44:SER:N | 1:A:44:SER:CA | 1:A:44:SER:C | 1:A:45:GLU:N | 6 | 2.3 |
| (1,45) | 1:A:24:ALA:C | 1:A:25:PHE:N | 1:A:25:PHE:CA | 1:A:25:PHE:C | 12 | 2.3 |
| (1,154) | 1:A:94:ALA:N | 1:A:94:ALA:CA | 1:A:94:ALA:C | 1:A:95:ILE:N | 15 | 2.3 |
| (1,128) | 1:A:73:PRO:N | 1:A:73:PRO:CA | 1:A:73:PRO:C | 1:A:74:THR:N | 4 | 2.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|--------------|---------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,84) | 1:A:47:TYR:N | 1:A:47:TYR:CA | 1:A:47:TYR:C | 1:A:48:PRO:N | 20 | 2.2 |
| (1,8) | 1:A:5:PHE:N | 1:A:5:PHE:CA | 1:A:5:PHE:C | 1:A:6:LYS:N | 17 | 2.2 |
| (1,63) | 1:A:35:MET:C | 1:A:36:ILE:N | 1:A:36:ILE:CA | 1:A:36:ILE:C | 7 | 2.2 |
| (1,47) | 1:A:25:PHE:C | 1:A:26:TYR:N | 1:A:26:TYR:CA | 1:A:26:TYR:C | 6 | 2.2 |
| (1,165) | 1:A:99:ILE:C | 1:A:100:ALA:N | 1:A:100:ALA:CA | 1:A:100:ALA:C | 10 | 2.2 |
| (1,151) | 1:A:92:PRO:C | 1:A:93:ALA:N | 1:A:93:ALA:CA | 1:A:93:ALA:C | 10 | 2.2 |
| (1,151) | 1:A:92:PRO:C | 1:A:93:ALA:N | 1:A:93:ALA:CA | 1:A:93:ALA:C | 12 | 2.2 |
| (1,84) | 1:A:47:TYR:N | 1:A:47:TYR:CA | 1:A:47:TYR:C | 1:A:48:PRO:N | 16 | 2.1 |
| (1,79) | 1:A:43:PHE:C | 1:A:44:SER:N | 1:A:44:SER:CA | 1:A:44:SER:C | 12 | 2.1 |
| (1,79) | 1:A:43:PHE:C | 1:A:44:SER:N | 1:A:44:SER:CA | 1:A:44:SER:C | 18 | 2.1 |
| (1,63) | 1:A:35:MET:C | 1:A:36:ILE:N | 1:A:36:ILE:CA | 1:A:36:ILE:C | 11 | 2.1 |
| (1,52) | 1:A:28:THR:N | 1:A:28:THR:CA | 1:A:28:THR:C | 1:A:29:TRP:N | 17 | 2.1 |
| (1,51) | 1:A:27:ALA:C | 1:A:28:THR:N | 1:A:28:THR:CA | 1:A:28:THR:C | 8 | 2.1 |
| (1,165) | 1:A:99:ILE:C | 1:A:100:ALA:N | 1:A:100:ALA:CA | 1:A:100:ALA:C | 18 | 2.1 |
| (1,151) | 1:A:92:PRO:C | 1:A:93:ALA:N | 1:A:93:ALA:CA | 1:A:93:ALA:C | 6 | 2.1 |
| (1,129) | 1:A:73:PRO:C | 1:A:74:THR:N | 1:A:74:THR:CA | 1:A:74:THR:C | 19 | 2.1 |
| (1,127) | 1:A:72:MET:C | 1:A:73:PRO:N | 1:A:73:PRO:CA | 1:A:73:PRO:C | 15 | 2.1 |
| (1,79) | 1:A:43:PHE:C | 1:A:44:SER:N | 1:A:44:SER:CA | 1:A:44:SER:C | 8 | 2.0 |
| (1,63) | 1:A:35:MET:C | 1:A:36:ILE:N | 1:A:36:ILE:CA | 1:A:36:ILE:C | 6 | 2.0 |
| (1,63) | 1:A:35:MET:C | 1:A:36:ILE:N | 1:A:36:ILE:CA | 1:A:36:ILE:C | 14 | 2.0 |
| (1,52) | 1:A:28:THR:N | 1:A:28:THR:CA | 1:A:28:THR:C | 1:A:29:TRP:N | 3 | 2.0 |
| (1,52) | 1:A:28:THR:N | 1:A:28:THR:CA | 1:A:28:THR:C | 1:A:29:TRP:N | 16 | 2.0 |
| (1,47) | 1:A:25:PHE:C | 1:A:26:TYR:N | 1:A:26:TYR:CA | 1:A:26:TYR:C | 11 | 2.0 |
| (1,43) | 1:A:23:VAL:C | 1:A:24:ALA:N | 1:A:24:ALA:CA | 1:A:24:ALA:C | 6 | 2.0 |
| (1,151) | 1:A:92:PRO:C | 1:A:93:ALA:N | 1:A:93:ALA:CA | 1:A:93:ALA:C | 13 | 2.0 |
| (1,103) | 1:A:58:ASP:C | 1:A:59:GLU:N | 1:A:59:GLU:CA | 1:A:59:GLU:C | 9 | 2.0 |
| (1,98) | 1:A:54:LYS:N | 1:A:54:LYS:CA | 1:A:54:LYS:C | 1:A:55:LEU:N | 4 | 1.9 |
| (1,98) | 1:A:54:LYS:N | 1:A:54:LYS:CA | 1:A:54:LYS:C | 1:A:55:LEU:N | 11 | 1.9 |
| (1,96) | 1:A:53:TYR:N | 1:A:53:TYR:CA | 1:A:53:TYR:C | 1:A:54:LYS:N | 12 | 1.9 |
| (1,86) | 1:A:48:PRO:N | 1:A:48:PRO:CA | 1:A:48:PRO:C | 1:A:49:GLN:N | 13 | 1.9 |
| (1,80) | 1:A:44:SER:N | 1:A:44:SER:CA | 1:A:44:SER:C | 1:A:45:GLU:N | 3 | 1.9 |
| (1,80) | 1:A:44:SER:N | 1:A:44:SER:CA | 1:A:44:SER:C | 1:A:45:GLU:N | 11 | 1.9 |
| (1,8) | 1:A:5:PHE:N | 1:A:5:PHE:CA | 1:A:5:PHE:C | 1:A:6:LYS:N | 15 | 1.9 |
| (1,79) | 1:A:43:PHE:C | 1:A:44:SER:N | 1:A:44:SER:CA | 1:A:44:SER:C | 3 | 1.9 |
| (1,63) | 1:A:35:MET:C | 1:A:36:ILE:N | 1:A:36:ILE:CA | 1:A:36:ILE:C | 19 | 1.9 |
| (1,52) | 1:A:28:THR:N | 1:A:28:THR:CA | 1:A:28:THR:C | 1:A:29:TRP:N | 10 | 1.9 |
| (1,4) | 1:A:3:THR:N | 1:A:3:THR:CA | 1:A:3:THR:C | 1:A:4:GLN:N | 8 | 1.9 |
| (1,165) | 1:A:99:ILE:C | 1:A:100:ALA:N | 1:A:100:ALA:CA | 1:A:100:ALA:C | 9 | 1.9 |
| (1,165) | 1:A:99:ILE:C | 1:A:100:ALA:N | 1:A:100:ALA:CA | 1:A:100:ALA:C | 12 | 1.9 |
| (1,122) | 1:A:69:VAL:N | 1:A:69:VAL:CA | 1:A:69:VAL:C | 1:A:70:SER:N | 7 | 1.9 |
| (1,98) | 1:A:54:LYS:N | 1:A:54:LYS:CA | 1:A:54:LYS:C | 1:A:55:LEU:N | 5 | 1.8 |
| (1,84) | 1:A:47:TYR:N | 1:A:47:TYR:CA | 1:A:47:TYR:C | 1:A:48:PRO:N | 10 | 1.8 |
| (1,53) | 1:A:30:CYS:C | 1:A:31:GLY:N | 1:A:31:GLY:CA | 1:A:31:GLY:C | 19 | 1.8 |
| (1,47) | 1:A:25:PHE:C | 1:A:26:TYR:N | 1:A:26:TYR:CA | 1:A:26:TYR:C | 5 | 1.8 |
| (1,151) | 1:A:92:PRO:C | 1:A:93:ALA:N | 1:A:93:ALA:CA | 1:A:93:ALA:C | 9 | 1.8 |
| (1,141) | 1:A:79:LYS:C | 1:A:80:ASN:N | 1:A:80:ASN:CA | 1:A:80:ASN:C | 14 | 1.8 |
| (1,130) | 1:A:74:THR:N | 1:A:74:THR:CA | 1:A:74:THR:C | 1:A:75:LEU:N | 7 | 1.8 |
| (1,1) | 1:A:1:MET:C | 1:A:2:VAL:N | 1:A:2:VAL:CA | 1:A:2:VAL:C | 19 | 1.8 |
| (1,87) | 1:A:48:PRO:C | 1:A:49:GLN:N | 1:A:49:GLN:CA | 1:A:49:GLN:C | 8 | 1.7 |
| (1,87) | 1:A:48:PRO:C | 1:A:49:GLN:N | 1:A:49:GLN:CA | 1:A:49:GLN:C | 10 | 1.7 |
| (1,63) | 1:A:35:MET:C | 1:A:36:ILE:N | 1:A:36:ILE:CA | 1:A:36:ILE:C | 12 | 1.7 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|--------------|---------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,53) | 1:A:30:CYS:C | 1:A:31:GLY:N | 1:A:31:GLY:CA | 1:A:31:GLY:C | 1 | 1.7 |
| (1,52) | 1:A:28:THR:N | 1:A:28:THR:CA | 1:A:28:THR:C | 1:A:29:TRP:N | 12 | 1.7 |
| (1,50) | 1:A:27:ALA:N | 1:A:27:ALA:CA | 1:A:27:ALA:C | 1:A:28:THR:N | 6 | 1.7 |
| (1,47) | 1:A:25:PHE:C | 1:A:26:TYR:N | 1:A:26:TYR:CA | 1:A:26:TYR:C | 1 | 1.7 |
| (1,33) | 1:A:18:ASP:C | 1:A:19:LYS:N | 1:A:19:LYS:CA | 1:A:19:LYS:C | 4 | 1.7 |
| (1,165) | 1:A:99:ILE:C | 1:A:100:ALA:N | 1:A:100:ALA:CA | 1:A:100:ALA:C | 13 | 1.7 |
| (1,165) | 1:A:99:ILE:C | 1:A:100:ALA:N | 1:A:100:ALA:CA | 1:A:100:ALA:C | 15 | 1.7 |
| (1,154) | 1:A:94:ALA:N | 1:A:94:ALA:CA | 1:A:94:ALA:C | 1:A:95:ILE:N | 12 | 1.7 |
| (1,151) | 1:A:92:PRO:C | 1:A:93:ALA:N | 1:A:93:ALA:CA | 1:A:93:ALA:C | 3 | 1.7 |
| (1,128) | 1:A:73:PRO:N | 1:A:73:PRO:CA | 1:A:73:PRO:C | 1:A:74:THR:N | 9 | 1.7 |
| (1,103) | 1:A:58:ASP:C | 1:A:59:GLU:N | 1:A:59:GLU:CA | 1:A:59:GLU:C | 10 | 1.7 |
| (1,96) | 1:A:53:TYR:N | 1:A:53:TYR:CA | 1:A:53:TYR:C | 1:A:54:LYS:N | 19 | 1.6 |
| (1,88) | 1:A:49:GLN:N | 1:A:49:GLN:CA | 1:A:49:GLN:C | 1:A:50:ALA:N | 4 | 1.6 |
| (1,88) | 1:A:49:GLN:N | 1:A:49:GLN:CA | 1:A:49:GLN:C | 1:A:50:ALA:N | 14 | 1.6 |
| (1,87) | 1:A:48:PRO:C | 1:A:49:GLN:N | 1:A:49:GLN:CA | 1:A:49:GLN:C | 16 | 1.6 |
| (1,80) | 1:A:44:SER:N | 1:A:44:SER:CA | 1:A:44:SER:C | 1:A:45:GLU:N | 4 | 1.6 |
| (1,64) | 1:A:36:ILE:N | 1:A:36:ILE:CA | 1:A:36:ILE:C | 1:A:37:ALA:N | 19 | 1.6 |
| (1,63) | 1:A:35:MET:C | 1:A:36:ILE:N | 1:A:36:ILE:CA | 1:A:36:ILE:C | 15 | 1.6 |
| (1,63) | 1:A:35:MET:C | 1:A:36:ILE:N | 1:A:36:ILE:CA | 1:A:36:ILE:C | 20 | 1.6 |
| (1,52) | 1:A:28:THR:N | 1:A:28:THR:CA | 1:A:28:THR:C | 1:A:29:TRP:N | 15 | 1.6 |
| (1,124) | 1:A:71:ALA:N | 1:A:71:ALA:CA | 1:A:71:ALA:C | 1:A:72:MET:N | 11 | 1.6 |
| (1,98) | 1:A:54:LYS:N | 1:A:54:LYS:CA | 1:A:54:LYS:C | 1:A:55:LEU:N | 17 | 1.5 |
| (1,83) | 1:A:46:GLN:C | 1:A:47:TYR:N | 1:A:47:TYR:CA | 1:A:47:TYR:C | 9 | 1.5 |
| (1,6) | 1:A:4:GLN:N | 1:A:4:GLN:CA | 1:A:4:GLN:C | 1:A:5:PHE:N | 7 | 1.5 |
| (1,52) | 1:A:28:THR:N | 1:A:28:THR:CA | 1:A:28:THR:C | 1:A:29:TRP:N | 5 | 1.5 |
| (1,51) | 1:A:27:ALA:C | 1:A:28:THR:N | 1:A:28:THR:CA | 1:A:28:THR:C | 4 | 1.5 |
| (1,51) | 1:A:27:ALA:C | 1:A:28:THR:N | 1:A:28:THR:CA | 1:A:28:THR:C | 14 | 1.5 |
| (1,45) | 1:A:24:ALA:C | 1:A:25:PHE:N | 1:A:25:PHE:CA | 1:A:25:PHE:C | 10 | 1.5 |
| (1,40) | 1:A:22:VAL:N | 1:A:22:VAL:CA | 1:A:22:VAL:C | 1:A:23:VAL:N | 4 | 1.5 |
| (1,165) | 1:A:99:ILE:C | 1:A:100:ALA:N | 1:A:100:ALA:CA | 1:A:100:ALA:C | 16 | 1.5 |
| (1,130) | 1:A:74:THR:N | 1:A:74:THR:CA | 1:A:74:THR:C | 1:A:75:LEU:N | 3 | 1.5 |
| (1,126) | 1:A:72:MET:N | 1:A:72:MET:CA | 1:A:72:MET:C | 1:A:73:PRO:N | 19 | 1.5 |
| (1,122) | 1:A:69:VAL:N | 1:A:69:VAL:CA | 1:A:69:VAL:C | 1:A:70:SER:N | 5 | 1.5 |
| (1,83) | 1:A:46:GLN:C | 1:A:47:TYR:N | 1:A:47:TYR:CA | 1:A:47:TYR:C | 12 | 1.4 |
| (1,80) | 1:A:44:SER:N | 1:A:44:SER:CA | 1:A:44:SER:C | 1:A:45:GLU:N | 8 | 1.4 |
| (1,79) | 1:A:43:PHE:C | 1:A:44:SER:N | 1:A:44:SER:CA | 1:A:44:SER:C | 17 | 1.4 |
| (1,64) | 1:A:36:ILE:N | 1:A:36:ILE:CA | 1:A:36:ILE:C | 1:A:37:ALA:N | 13 | 1.4 |
| (1,38) | 1:A:21:VAL:N | 1:A:21:VAL:CA | 1:A:21:VAL:C | 1:A:22:VAL:N | 13 | 1.4 |
| (1,38) | 1:A:21:VAL:N | 1:A:21:VAL:CA | 1:A:21:VAL:C | 1:A:22:VAL:N | 18 | 1.4 |
| (1,33) | 1:A:18:ASP:C | 1:A:19:LYS:N | 1:A:19:LYS:CA | 1:A:19:LYS:C | 15 | 1.4 |
| (1,154) | 1:A:94:ALA:N | 1:A:94:ALA:CA | 1:A:94:ALA:C | 1:A:95:ILE:N | 4 | 1.4 |
| (1,151) | 1:A:92:PRO:C | 1:A:93:ALA:N | 1:A:93:ALA:CA | 1:A:93:ALA:C | 11 | 1.4 |
| (1,151) | 1:A:92:PRO:C | 1:A:93:ALA:N | 1:A:93:ALA:CA | 1:A:93:ALA:C | 20 | 1.4 |
| (1,130) | 1:A:74:THR:N | 1:A:74:THR:CA | 1:A:74:THR:C | 1:A:75:LEU:N | 15 | 1.4 |
| (1,128) | 1:A:73:PRO:N | 1:A:73:PRO:CA | 1:A:73:PRO:C | 1:A:74:THR:N | 7 | 1.4 |
| (1,98) | 1:A:54:LYS:N | 1:A:54:LYS:CA | 1:A:54:LYS:C | 1:A:55:LEU:N | 1 | 1.3 |
| (1,96) | 1:A:53:TYR:N | 1:A:53:TYR:CA | 1:A:53:TYR:C | 1:A:54:LYS:N | 3 | 1.3 |
| (1,86) | 1:A:48:PRO:N | 1:A:48:PRO:CA | 1:A:48:PRO:C | 1:A:49:GLN:N | 6 | 1.3 |
| (1,79) | 1:A:43:PHE:C | 1:A:44:SER:N | 1:A:44:SER:CA | 1:A:44:SER:C | 19 | 1.3 |
| (1,63) | 1:A:35:MET:C | 1:A:36:ILE:N | 1:A:36:ILE:CA | 1:A:36:ILE:C | 4 | 1.3 |
| (1,53) | 1:A:30:CYS:C | 1:A:31:GLY:N | 1:A:31:GLY:CA | 1:A:31:GLY:C | 17 | 1.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|--------------|---------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,45) | 1:A:24:ALA:C | 1:A:25:PHE:N | 1:A:25:PHE:CA | 1:A:25:PHE:C | 19 | 1.3 |
| (1,42) | 1:A:23:VAL:N | 1:A:23:VAL:CA | 1:A:23:VAL:C | 1:A:24:ALA:N | 16 | 1.3 |
| (1,4) | 1:A:3:THR:N | 1:A:3:THR:CA | 1:A:3:THR:C | 1:A:4:GLN:N | 6 | 1.3 |
| (1,38) | 1:A:21:VAL:N | 1:A:21:VAL:CA | 1:A:21:VAL:C | 1:A:22:VAL:N | 19 | 1.3 |
| (1,165) | 1:A:99:ILE:C | 1:A:100:ALA:N | 1:A:100:ALA:CA | 1:A:100:ALA:C | 1 | 1.3 |
| (1,89) | 1:A:49:GLN:C | 1:A:50:ALA:N | 1:A:50:ALA:CA | 1:A:50:ALA:C | 14 | 1.2 |
| (1,88) | 1:A:49:GLN:N | 1:A:49:GLN:CA | 1:A:49:GLN:C | 1:A:50:ALA:N | 8 | 1.2 |
| (1,86) | 1:A:48:PRO:N | 1:A:48:PRO:CA | 1:A:48:PRO:C | 1:A:49:GLN:N | 10 | 1.2 |
| (1,85) | 1:A:47:TYR:C | 1:A:48:PRO:N | 1:A:48:PRO:CA | 1:A:48:PRO:C | 5 | 1.2 |
| (1,78) | 1:A:43:PHE:N | 1:A:43:PHE:CA | 1:A:43:PHE:C | 1:A:44:SER:N | 20 | 1.2 |
| (1,70) | 1:A:39:MET:N | 1:A:39:MET:CA | 1:A:39:MET:C | 1:A:40:ILE:N | 10 | 1.2 |
| (1,51) | 1:A:27:ALA:C | 1:A:28:THR:N | 1:A:28:THR:CA | 1:A:28:THR:C | 12 | 1.2 |
| (1,43) | 1:A:23:VAL:C | 1:A:24:ALA:N | 1:A:24:ALA:CA | 1:A:24:ALA:C | 16 | 1.2 |
| (1,42) | 1:A:23:VAL:N | 1:A:23:VAL:CA | 1:A:23:VAL:C | 1:A:24:ALA:N | 2 | 1.2 |
| (1,151) | 1:A:92:PRO:C | 1:A:93:ALA:N | 1:A:93:ALA:CA | 1:A:93:ALA:C | 17 | 1.2 |
| (1,141) | 1:A:79:LYS:C | 1:A:80:ASN:N | 1:A:80:ASN:CA | 1:A:80:ASN:C | 7 | 1.2 |
| (1,132) | 1:A:75:LEU:N | 1:A:75:LEU:CA | 1:A:75:LEU:C | 1:A:76:LEU:N | 18 | 1.2 |
| (1,128) | 1:A:73:PRO:N | 1:A:73:PRO:CA | 1:A:73:PRO:C | 1:A:74:THR:N | 5 | 1.2 |
| (1,128) | 1:A:73:PRO:N | 1:A:73:PRO:CA | 1:A:73:PRO:C | 1:A:74:THR:N | 18 | 1.2 |
| (1,1) | 1:A:1:MET:C | 1:A:2:VAL:N | 1:A:2:VAL:CA | 1:A:2:VAL:C | 17 | 1.2 |
| (1,90) | 1:A:50:ALA:N | 1:A:50:ALA:CA | 1:A:50:ALA:C | 1:A:51:ASP:N | 18 | 1.1 |
| (1,89) | 1:A:49:GLN:C | 1:A:50:ALA:N | 1:A:50:ALA:CA | 1:A:50:ALA:C | 12 | 1.1 |
| (1,87) | 1:A:48:PRO:C | 1:A:49:GLN:N | 1:A:49:GLN:CA | 1:A:49:GLN:C | 3 | 1.1 |
| (1,84) | 1:A:47:TYR:N | 1:A:47:TYR:CA | 1:A:47:TYR:C | 1:A:48:PRO:N | 6 | 1.1 |
| (1,80) | 1:A:44:SER:N | 1:A:44:SER:CA | 1:A:44:SER:C | 1:A:45:GLU:N | 1 | 1.1 |
| (1,64) | 1:A:36:ILE:N | 1:A:36:ILE:CA | 1:A:36:ILE:C | 1:A:37:ALA:N | 12 | 1.1 |
| (1,6) | 1:A:4:GLN:N | 1:A:4:GLN:CA | 1:A:4:GLN:C | 1:A:5:PHE:N | 6 | 1.1 |
| (1,53) | 1:A:30:CYS:C | 1:A:31:GLY:N | 1:A:31:GLY:CA | 1:A:31:GLY:C | 9 | 1.1 |
| (1,52) | 1:A:28:THR:N | 1:A:28:THR:CA | 1:A:28:THR:C | 1:A:29:TRP:N | 14 | 1.1 |
| (1,51) | 1:A:27:ALA:C | 1:A:28:THR:N | 1:A:28:THR:CA | 1:A:28:THR:C | 2 | 1.1 |
| (1,51) | 1:A:27:ALA:C | 1:A:28:THR:N | 1:A:28:THR:CA | 1:A:28:THR:C | 10 | 1.1 |
| (1,51) | 1:A:27:ALA:C | 1:A:28:THR:N | 1:A:28:THR:CA | 1:A:28:THR:C | 16 | 1.1 |
| (1,43) | 1:A:23:VAL:C | 1:A:24:ALA:N | 1:A:24:ALA:CA | 1:A:24:ALA:C | 5 | 1.1 |
| (1,4) | 1:A:3:THR:N | 1:A:3:THR:CA | 1:A:3:THR:C | 1:A:4:GLN:N | 9 | 1.1 |
| (1,4) | 1:A:3:THR:N | 1:A:3:THR:CA | 1:A:3:THR:C | 1:A:4:GLN:N | 19 | 1.1 |
| (1,38) | 1:A:21:VAL:N | 1:A:21:VAL:CA | 1:A:21:VAL:C | 1:A:22:VAL:N | 8 | 1.1 |
| (1,38) | 1:A:21:VAL:N | 1:A:21:VAL:CA | 1:A:21:VAL:C | 1:A:22:VAL:N | 17 | 1.1 |
| (1,151) | 1:A:92:PRO:C | 1:A:93:ALA:N | 1:A:93:ALA:CA | 1:A:93:ALA:C | 14 | 1.1 |