# Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

Jun 3, 2023 – 03:07 PM EDT

| | | |
|---|---|---|
| PDB ID | : | 6PQE |
| BMRB ID | : | 30629 |
| Title | : | Structural Basis for Client Recognition and Activity of Hsp40 Chaperones |
| Authors | : | Jiang, Y.; Rossi, P.; Kalodimos, C.G. |
| Deposited on | : | 2019-07-09 |

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 (i) 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 (1)) were used in the production of this report:

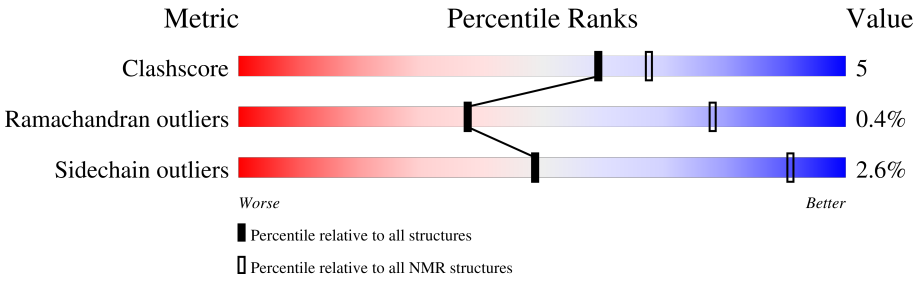
| | | |
|---|---|---|
| MolProbity | : | 4.02b-467 |
| Percentile statistics | : | 20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019) |
| wwPDB-RCI | : | v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005) |
| PANAV | : | Wang et al. (2010) |
| wwPDB-ShiftChecker | : | v1.2 |
| BMRB Restraints Analysis | : | 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 (i)

The following experimental techniques were used to determine the structure:
*SOLUTION NMR*

The overall completeness of chemical shifts assignment is 83%.

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 <=5%

| Mol | Chain | Length | Quality of chain |
|---|---|---|---|
| 1 | A | 89 | 70% 9% 21% |

# 2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 20 models. Model 6 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:172-A:176, A:192-A:256 (70) | 0.47 | 6 |

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 5 clusters and 6 single-model clusters were found.

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

# 3 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1280 atoms, of which 647 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Alkaline phosphatase,Chaperone protein DnaJ 2 fusion.

| Mol | Chain | Residues | Atoms | | | | | | Trace |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | Total | C | H | N | O | S | |
| 1 | A | 89 | 1280 | 394 | 647 | 116 | 121 | 2 | 0 |

There are 12 discrepancies between the modelled and reference sequences:

| Chain | Residue | Modelled | Actual | Comment | Reference |
|---|---|---|---|---|---|
| A | 168 | MET | - | initiating methionine | UNP P00634 |
| A | 180 | GLY | - | linker | UNP P00634 |
| A | 181 | SER | - | linker | UNP P00634 |
| A | 182 | GLY | - | linker | UNP P00634 |
| A | 183 | GLY | - | linker | UNP P00634 |
| A | 184 | SER | - | linker | UNP P00634 |
| A | 185 | GLY | - | linker | UNP P00634 |
| A | 186 | GLY | - | linker | UNP P00634 |
| A | 187 | SER | - | linker | UNP P00634 |
| A | 188 | GLY | - | linker | UNP P00634 |
| A | 189 | GLY | - | linker | UNP P00634 |
| A | 190 | SER | - | linker | UNP P00634 |

# 4 Residue-property plots (i)

## 4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

• Molecule 1: Alkaline phosphatase,Chaperone protein DnaJ 2 fusion

Chain A: 70% 9% 21%

M168 E169 T170 A171 W176 Q177 G178 K179 G180 S181 G182 G183 S184 G185 G186 S187 G188 G189 S190 Q191 A195 V199 V210 T214 L233 L251 E252 V253 T256

## 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: Alkaline phosphatase,Chaperone protein DnaJ 2 fusion

Chain A: 67% 11% 21%

M168 E169 T170 A171 G174 E175 W176 Q177 G178 K179 G180 S181 G182 G183 S184 G185 G186 S187 G188 G189 S190 Q191 V199 V210 T214 Q228 R231 K232 L233 L251 E252 V253 T256

### 4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: Alkaline phosphatase,Chaperone protein DnaJ 2 fusion

Chain A: 70% 9% 21%

M168 E169 T170 A171 W176 Q177 G178 K179 G180 S181 G182 G183 S184 G185 G186 S187 G188 G189 S190 Q191 A195 V199 V210 T214 L233 L251 E252 V253 T256

### 4.2.3 Score per residue for model 3

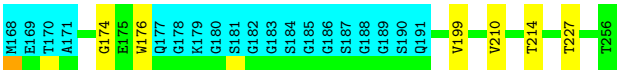
• Molecule 1: Alkaline phosphatase,Chaperone protein DnaJ 2 fusion

Chain A: 70% 9% 21%

### 4.2.4 Score per residue for model 4

• Molecule 1: Alkaline phosphatase,Chaperone protein DnaJ 2 fusion

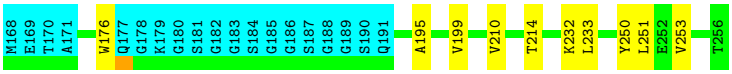
Chain A: 72% 7% 21%




### 4.2.5 Score per residue for model 5

• Molecule 1: Alkaline phosphatase,Chaperone protein DnaJ 2 fusion

Chain A: 67% 11% 21%




### 4.2.6 Score per residue for model 6 (medoid)

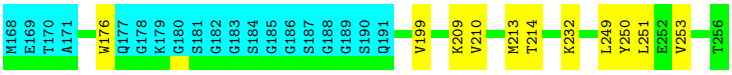
• Molecule 1: Alkaline phosphatase,Chaperone protein DnaJ 2 fusion

Chain A: 70% 9% 21%

### 4.2.7 Score per residue for model 7

• Molecule 1: Alkaline phosphatase,Chaperone protein DnaJ 2 fusion

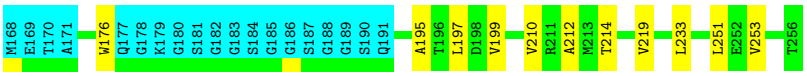
Chain A: 66% 12% 21%



### 4.2.8 Score per residue for model 8

• Molecule 1: Alkaline phosphatase,Chaperone protein DnaJ 2 fusion

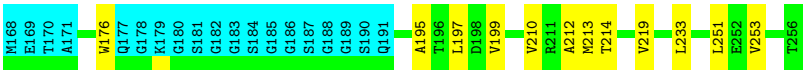
Chain A: 66% 12% 21%




### 4.2.9 Score per residue for model 9

• Molecule 1: Alkaline phosphatase,Chaperone protein DnaJ 2 fusion

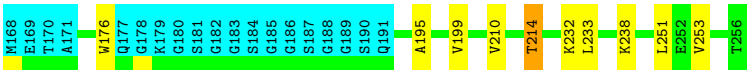
Chain A: 65% 13% 21%




### 4.2.10 Score per residue for model 10

• Molecule 1: Alkaline phosphatase,Chaperone protein DnaJ 2 fusion

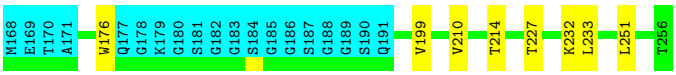
Chain A: 67% 10% • 21%




### 4.2.11 Score per residue for model 11

• Molecule 1: Alkaline phosphatase,Chaperone protein DnaJ 2 fusion

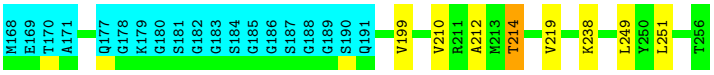
Chain A: 70% 9% 21%




### 4.2.12 Score per residue for model 12

• Molecule 1: Alkaline phosphatase,Chaperone protein DnaJ 2 fusion

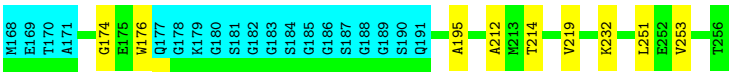
Chain A: 70% 8% • 21%



### 4.2.13 Score per residue for model 13

• Molecule 1: Alkaline phosphatase,Chaperone protein DnaJ 2 fusion

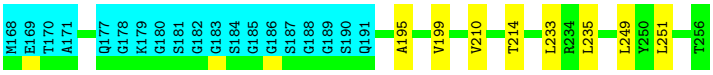
Chain A: 69% 10% 21%




### 4.2.14 Score per residue for model 14

• Molecule 1: Alkaline phosphatase,Chaperone protein DnaJ 2 fusion

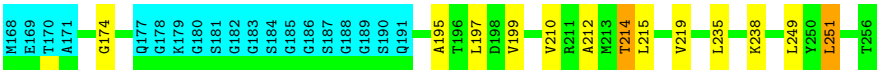
Chain A: 70% 9% 21%




### 4.2.15 Score per residue for model 15

• Molecule 1: Alkaline phosphatase,Chaperone protein DnaJ 2 fusion

Chain A: 64% 12% • 21%




### 4.2.16 Score per residue for model 16

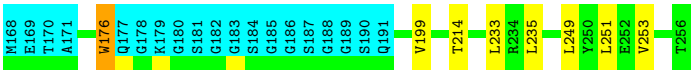
• Molecule 1: Alkaline phosphatase,Chaperone protein DnaJ 2 fusion

Chain A: 66% 11% • 21%

### 4.2.17 Score per residue for model 17

• Molecule 1: Alkaline phosphatase,Chaperone protein DnaJ 2 fusion

Chain A: 70% 8% • 21%



### 4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Alkaline phosphatase,Chaperone protein DnaJ 2 fusion

Chain A: 67% 11% 21%

M168 E169 T170 A171 W176 Q177 G178 K179 G180 S181 G182 G183 S184 G185 G186 S187 G188 G189 S190 Q191 A195 T196 L197 D198 V199 V210 R211 A212 M213 T214 V219 L251 E252 V253 T256

### 4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Alkaline phosphatase,Chaperone protein DnaJ 2 fusion

Chain A: 64% 13% • 21%

M168 E169 T170 A171 W176 Q177 G178 K179 G180 S181 G182 G183 S184 G185 G186 S187 G188 G189 S190 Q191 A195 V199 V210 R211 A212 M213 T214 V219 T227 K232 L233 R234 K238 Y250 L251 T256

### 4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Alkaline phosphatase,Chaperone protein DnaJ 2 fusion

Chain A: 70% 9% 21%

M168 E169 T170 A171 G174 E175 W176 Q177 G178 K179 G180 S181 G182 G183 S184 G185 G186 S187 G188 G189 S190 Q191 A195 T214 L233 L251 E252 V253 T256

# 5 Refinement protocol and experimental data overview (i)

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

Of the 100 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *target function*.

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

| Software name | Classification | Version |
|---|---|---|
| CNS | refinement | |
| CYANA | structure calculation | |
| TALOS | geometry optimization | |

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 | 853 |
| Number of shifts mapped to atoms | 853 |
| Number of unparsed shifts | 0 |
| Number of shifts with mapping errors | 0 |
| Number of shifts with mapping warnings | 0 |
| Assignment completeness (well-defined parts) | 83% |

# 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 | 521 | 545 | 545 | 5±2 |
| All | All | 10420 | 10900 | 10900 | 102 |

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The all-atom clashscore for this structure is 5.

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

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|---|---|---|---|---|---|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:251:LEU:HD11 | 0.55 | 1.79 | 8 | 11 |
| 1:A:176:TRP:CZ3 | 1:A:253:VAL:HG21 | 0.55 | 2.37 | 8 | 14 |
| 1:A:232:LYS:HD3 | 1:A:250:TYR:HB3 | 0.51 | 1.81 | 7 | 1 |
| 1:A:199:VAL:HA | 1:A:210:VAL:HG11 | 0.49 | 1.84 | 11 | 12 |
| 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG21 | 0.49 | 1.84 | 14 | 16 |
| 1:A:249:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD23 | 0.47 | 1.86 | 7 | 1 |
| 1:A:214:THR:HG21 | 1:A:238:LYS:HE3 | 0.47 | 1.86 | 19 | 2 |
| 1:A:214:THR:HG21 | 1:A:238:LYS:HD2 | 0.46 | 1.88 | 15 | 2 |
| 1:A:212:ALA:HB3 | 1:A:219:VAL:HB | 0.46 | 1.86 | 9 | 8 |
| 1:A:195:ALA:HB3 | 1:A:251:LEU:HB3 | 0.45 | 1.87 | 18 | 13 |
| 1:A:214:THR:HG23 | 1:A:249:LEU:HD22 | 0.44 | 1.88 | 12 | 2 |
| 1:A:214:THR:OG1 | 1:A:219:VAL:HG23 | 0.44 | 2.13 | 16 | 1 |
| 1:A:197:LEU:HD22 | 1:A:233:LEU:HG | 0.44 | 1.89 | 8 | 1 |
| 1:A:235:LEU:HB2 | 1:A:249:LEU:HB3 | 0.44 | 1.88 | 16 | 4 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|---|---|---|---|---|---|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:232:LYS:HE2 | 1:A:250:TYR:HB3 | 0.43 | 1.89 | 19 | 2 |
| 1:A:197:LEU:HD23 | 1:A:253:VAL:HG22 | 0.43 | 1.90 | 9 | 1 |
| 1:A:197:LEU:HB2 | 1:A:251:LEU:HD13 | 0.43 | 1.89 | 18 | 2 |
| 1:A:228:GLN:HB2 | 1:A:231:ARG:HH12 | 0.42 | 1.73 | 1 | 1 |
| 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD23 | 0.42 | 1.92 | 15 | 1 |
| 1:A:232:LYS:HA | 1:A:253:VAL:HG23 | 0.41 | 1.92 | 10 | 2 |
| 1:A:176:TRP:CZ3 | 1:A:227:THR:HG21 | 0.41 | 2.50 | 19 | 3 |
| 1:A:251:LEU:HD12 | 1:A:251:LEU:O | 0.41 | 2.16 | 12 | 1 |
| 1:A:214:THR:HG22 | 1:A:215:LEU:H | 0.41 | 1.75 | 15 | 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 | 69/89 (78%) | 63±1 (91±2%) | 6±1 (9±2%) | 0±0 (0±1%) | 38 | 78 |
| All | All | 1380/1780 (78%) | 1253 (91%) | 121 (9%) | 6 (0%) | 38 | 78 |

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

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|---|---|---|---|---|
| 1 | A | 174 | GLY | 5 |
| 1 | A | 176 | TRP | 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 | 52/62 (84%) | 51±1 (97±1%) | 1±1 (3±1%) | 49 | 91 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Mol | Chain | Analysed | Rotameric | Outliers | Percentiles |
|---|---|---|---|---|---|
| All | All | 1040/1240 (84%) | 1013 (97%) | 27 (3%) | 49 91 |

All 7 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 | 214 | THR | 20 |
| 1 | A | 213 | MET | 2 |
| 1 | A | 209 | LYS | 1 |
| 1 | A | 232 | LYS | 1 |
| 1 | A | 251 | LEU | 1 |
| 1 | A | 199 | VAL | 1 |
| 1 | A | 256 | THR | 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 83% for the well-defined parts and 76% for the entire structure.

## 7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *PhoA235-245_ CBD2_ 191-256.bmrb*

### 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 | 853 |
| Number of shifts mapped to atoms | 853 |
| Number of unparsed shifts | 0 |
| Number of shifts with mapping errors | 0 |
| Number of shifts with mapping warnings | 0 |
| Number of shift outliers (ShiftChecker) | 0 |

### 7.1.2 Chemical shift referencing (i)

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

| Nucleus | # values | Correction ± precision, *ppm* | Suggested action |
|---|---|---|---|
| $^{13}C_{\alpha}$ | 74 | 0.13 ± 0.11 | None needed (< 0.5 ppm) |
| $^{13}C_{\beta}$ | 66 | 0.17 ± 0.26 | None needed (< 0.5 ppm) |
| $^{13}C'$ | 59 | 0.09 ± 0.17 | None needed (< 0.5 ppm) |
| $^{15}N$ | 61 | -0.62 ± 0.44 | 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 83%, i.e. 777 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 940. 0 out of 15 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

| | Total | $^{1}H$ | $^{13}C$ | $^{15}N$ |
|---|---|---|---|---|
| Backbone | 302/346 (87%) | 127/143 (89%) | 120/140 (86%) | 55/63 (87%) |
| Sidechain | 439/554 (79%) | 294/364 (81%) | 144/167 (86%) | 1/23 (4%) |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| | Total | $^{1}$H | $^{13}$C | $^{15}$N |
|---|---|---|---|---|
| Aromatic | 36/40 (90%) | 18/19 (95%) | 17/20 (85%) | 1/1 (100%) |
| Overall | 777/940 (83%) | 439/526 (83%) | 281/327 (86%) | 57/87 (66%) |

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 76%, i.e. 852 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1115. 0 out of 15 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

| | Total | $^{1}$H | $^{13}$C | $^{15}$N |
|---|---|---|---|---|
| Backbone | 333/449 (74%) | 139/189 (74%) | 133/178 (75%) | 61/82 (74%) |
| Sidechain | 483/626 (77%) | 322/410 (79%) | 158/190 (83%) | 3/26 (12%) |
| Aromatic | 36/40 (90%) | 18/19 (95%) | 17/20 (85%) | 1/1 (100%) |
| Overall | 852/1115 (76%) | 479/618 (78%) | 308/388 (79%) | 65/109 (60%) |

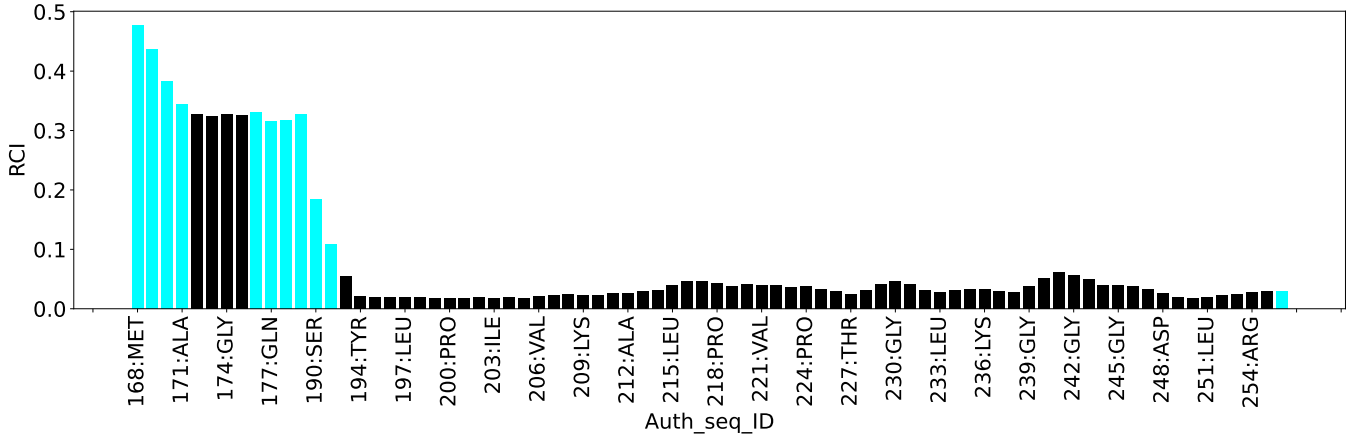
### 7.1.4 Statistically unusual chemical shifts (i)

There are no statistically unusual chemical shifts.

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

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

Random coil index (RCI) for chain A:



# 8 NMR restraints analysis (i)

## 8.1 Conformationally restricting restraints (i)

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 | 1780 |
| Intra-residue (\|i-j\|=0) | 337 |
| Sequential (\|i-j\|=1) | 440 |
| Medium range (\|i-j\|>1 and \|i-j\|<5) | 181 |
| Long range (\|i-j\|≥5) | 766 |
| Inter-chain | 0 |
| Hydrogen bond restraints | 56 |
| Disulfide bond restraints | 0 |
| Total dihedral-angle restraints | 128 |
| Number of unmapped restraints | 0 |
| Number of restraints per residue | 21.4 |
| Number of long range restraints per residue[1] | 9.1 |

[1]Long 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 (i)

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 (i)

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) | 36.4 | 0.2 |
| 0.2-0.5 (Medium) | 13.8 | 0.45 |
| >0.5 (Large) | 1.1 | 6.78 |

### 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) | 18.6 | 8.1 |
| 10.0-20.0 (Medium) | None | None |
| >20.0 (Large) | None | None |

# 9 Distance violation analysis (i)

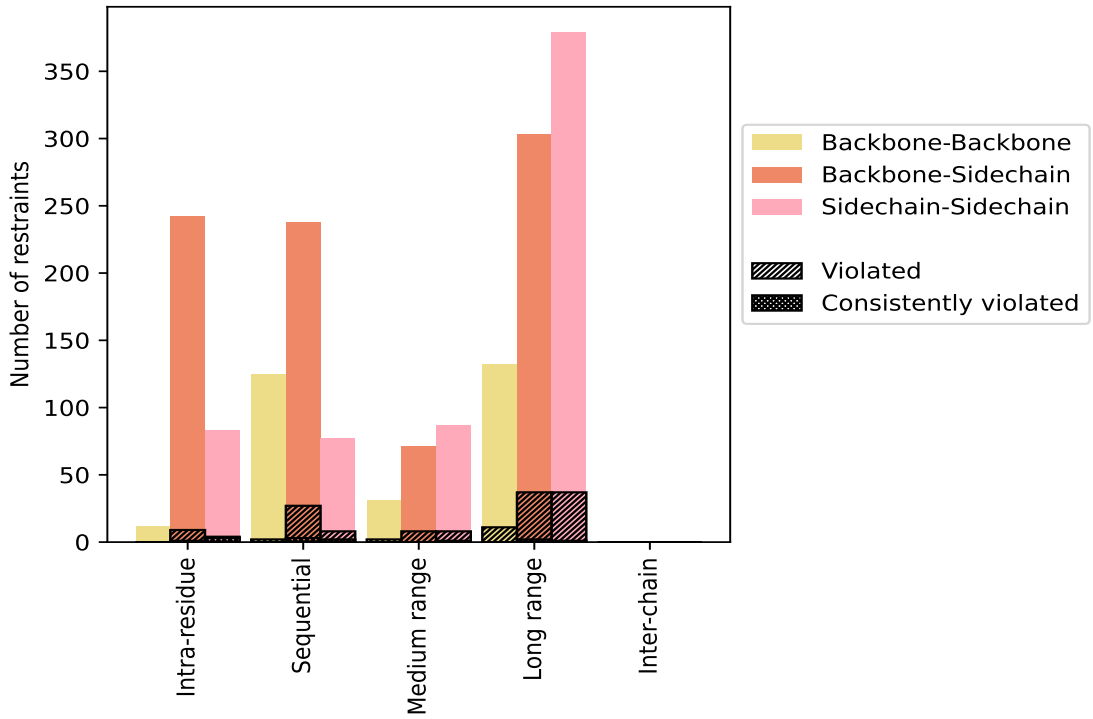
## 9.1 Summary of distance violations (i)

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.

| Restraints type | Count | %[1] | Violated[3] | | | Consistently Violated[4] | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | Count | %[2] | %[1] | Count | %[2] | %[1] |
| Intra-residue (\|i-j\|=0) | 337 | 18.9 | 13 | 3.9 | 0.7 | 4 | 1.2 | 0.2 |
| Backbone-Backbone | 12 | 0.7 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 242 | 13.6 | 9 | 3.7 | 0.5 | 1 | 0.4 | 0.1 |
| Sidechain-Sidechain | 83 | 4.7 | 4 | 4.8 | 0.2 | 3 | 3.6 | 0.2 |
| Sequential (\|i-j\|=1) | 440 | 24.7 | 37 | 8.4 | 2.1 | 5 | 1.1 | 0.3 |
| Backbone-Backbone | 125 | 7.0 | 2 | 1.6 | 0.1 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 238 | 13.4 | 27 | 11.3 | 1.5 | 3 | 1.3 | 0.2 |
| Sidechain-Sidechain | 77 | 4.3 | 8 | 10.4 | 0.4 | 2 | 2.6 | 0.1 |
| Medium range (\|i-j\|>1 & \|i-j\|<5) | 181 | 10.2 | 18 | 9.9 | 1.0 | 1 | 0.6 | 0.1 |
| Backbone-Backbone | 23 | 1.3 | 2 | 8.7 | 0.1 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 71 | 4.0 | 8 | 11.3 | 0.4 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Sidechain-Sidechain | 87 | 4.9 | 8 | 9.2 | 0.4 | 1 | 1.1 | 0.1 |
| Long range (\|i-j\|≥5) | 766 | 43.0 | 81 | 10.6 | 4.6 | 3 | 0.4 | 0.2 |
| Backbone-Backbone | 84 | 4.7 | 7 | 8.3 | 0.4 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 303 | 17.0 | 37 | 12.2 | 2.1 | 2 | 0.7 | 0.1 |
| Sidechain-Sidechain | 379 | 21.3 | 37 | 9.8 | 2.1 | 1 | 0.3 | 0.1 |
| Inter-chain | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Backbone | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Sidechain-Sidechain | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Hydrogen bond | 56 | 3.1 | 4 | 7.1 | 0.2 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Disulfide bond | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Total | 1780 | 100.0 | 153 | 8.6 | 8.6 | 13 | 0.7 | 0.7 |
| Backbone-Backbone | 300 | 16.9 | 15 | 5.0 | 0.8 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 854 | 48.0 | 81 | 9.5 | 4.6 | 6 | 0.7 | 0.3 |
| Sidechain-Sidechain | 626 | 35.2 | 57 | 9.1 | 3.2 | 7 | 1.1 | 0.4 |

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

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




Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories. The hydrogen bonds and disulfied 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 | 6 | 14 | 7 | 23 | 0 | 50 | 0.2 | 1.03 | 0.14 | 0.18 |
| 2 | 6 | 16 | 7 | 20 | 0 | 49 | 0.18 | 0.37 | 0.06 | 0.17 |
| 3 | 6 | 17 | 7 | 28 | 0 | 58 | 0.16 | 0.3 | 0.04 | 0.15 |
| 4 | 7 | 16 | 4 | 27 | 0 | 54 | 0.18 | 0.43 | 0.06 | 0.16 |
| 5 | 6 | 10 | 7 | 24 | 0 | 47 | 0.17 | 0.32 | 0.05 | 0.15 |
| 6 | 5 | 18 | 7 | 25 | 0 | 55 | 0.18 | 0.39 | 0.05 | 0.17 |
| 7 | 7 | 14 | 5 | 22 | 0 | 48 | 0.21 | 1.82 | 0.24 | 0.16 |
| 8 | 9 | 16 | 4 | 24 | 0 | 53 | 0.18 | 0.43 | 0.07 | 0.17 |
| 9 | 5 | 18 | 4 | 24 | 0 | 51 | 0.18 | 0.38 | 0.07 | 0.16 |
| 10 | 7 | 16 | 7 | 25 | 0 | 55 | 0.19 | 0.71 | 0.09 | 0.17 |
| 11 | 6 | 15 | 8 | 26 | 0 | 55 | 0.39 | 6.22 | 1.04 | 0.18 |

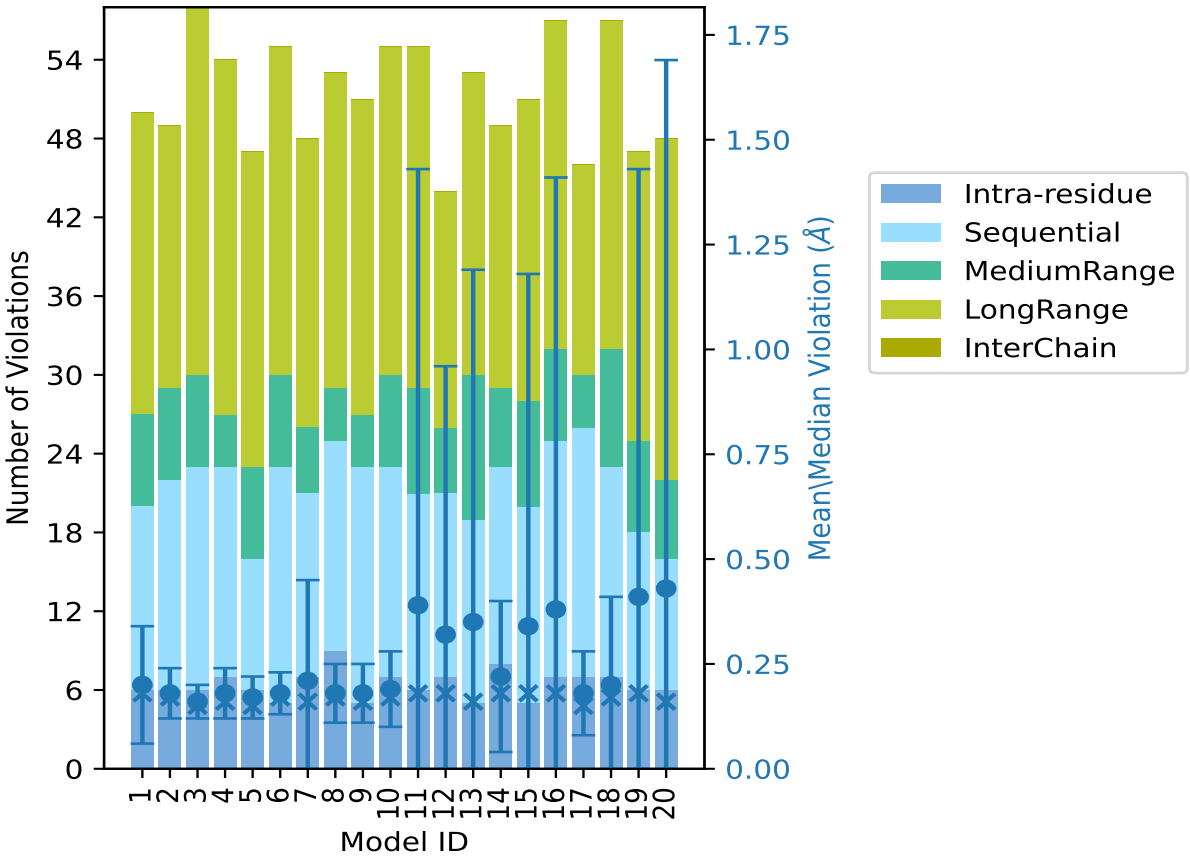
*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Model ID | Number of violations | | | | | | Mean (Å) | Max (Å) | SD[6] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | IR[1] | SQ[2] | MR[3] | LR[4] | IC[5] | Total | | | | |
| 12 | 7 | 14 | 5 | 18 | 0 | 44 | 0.32 | 3.75 | 0.64 | 0.18 |
| 13 | 5 | 14 | 11 | 23 | 0 | 53 | 0.35 | 5.44 | 0.84 | 0.16 |
| 14 | 8 | 15 | 6 | 20 | 0 | 49 | 0.22 | 1.41 | 0.18 | 0.18 |
| 15 | 5 | 15 | 8 | 23 | 0 | 51 | 0.34 | 5.17 | 0.84 | 0.18 |
| 16 | 7 | 18 | 7 | 25 | 0 | 57 | 0.38 | 6.26 | 1.03 | 0.18 |
| 17 | 7 | 19 | 4 | 16 | 0 | 46 | 0.18 | 0.71 | 0.1 | 0.15 |
| 18 | 7 | 16 | 9 | 25 | 0 | 57 | 0.2 | 1.7 | 0.21 | 0.17 |
| 19 | 6 | 12 | 7 | 22 | 0 | 47 | 0.41 | 5.5 | 1.02 | 0.18 |
| 20 | 6 | 10 | 6 | 26 | 0 | 48 | 0.43 | 6.78 | 1.26 | 0.16 |

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

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




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

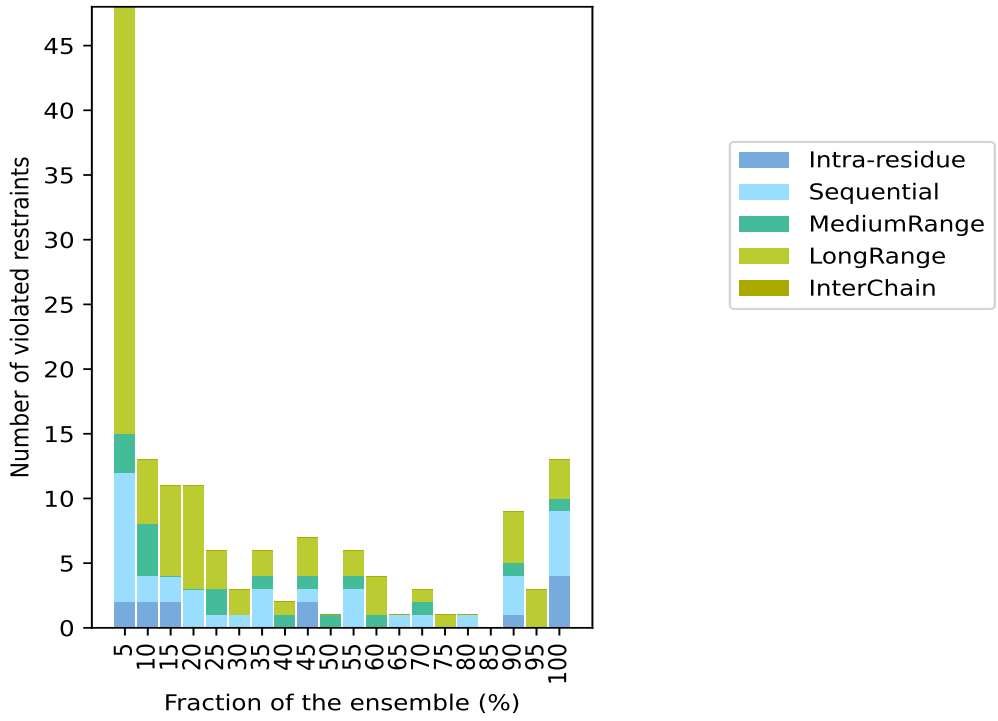
## 9.3 Distance violation statistics for the ensemble (i)

Violation analysis may find that some restraints are violated in few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of the ensemble. In total, 1575(IR:324, SQ:403, MR:163, LR:685, 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] | % |
| 2 | 10 | 3 | 33 | 0 | 48 | 1 | 5.0 |
| 2 | 2 | 4 | 5 | 0 | 13 | 2 | 10.0 |
| 2 | 2 | 0 | 7 | 0 | 11 | 3 | 15.0 |
| 0 | 3 | 0 | 8 | 0 | 11 | 4 | 20.0 |
| 0 | 1 | 2 | 3 | 0 | 6 | 5 | 25.0 |
| 0 | 1 | 0 | 2 | 0 | 3 | 6 | 30.0 |
| 0 | 3 | 1 | 2 | 0 | 6 | 7 | 35.0 |
| 0 | 0 | 1 | 1 | 0 | 2 | 8 | 40.0 |
| 2 | 1 | 1 | 3 | 0 | 7 | 9 | 45.0 |
| 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 1 | 10 | 50.0 |
| 0 | 3 | 1 | 2 | 0 | 6 | 11 | 55.0 |
| 0 | 0 | 1 | 3 | 0 | 4 | 12 | 60.0 |
| 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 1 | 13 | 65.0 |
| 0 | 1 | 1 | 1 | 0 | 3 | 14 | 70.0 |
| 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 1 | 15 | 75.0 |
| 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 1 | 16 | 80.0 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 17 | 85.0 |
| 1 | 3 | 1 | 4 | 0 | 9 | 18 | 90.0 |
| 0 | 0 | 0 | 3 | 0 | 3 | 19 | 95.0 |
| 4 | 5 | 1 | 3 | 0 | 13 | 20 | 100.0 |

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

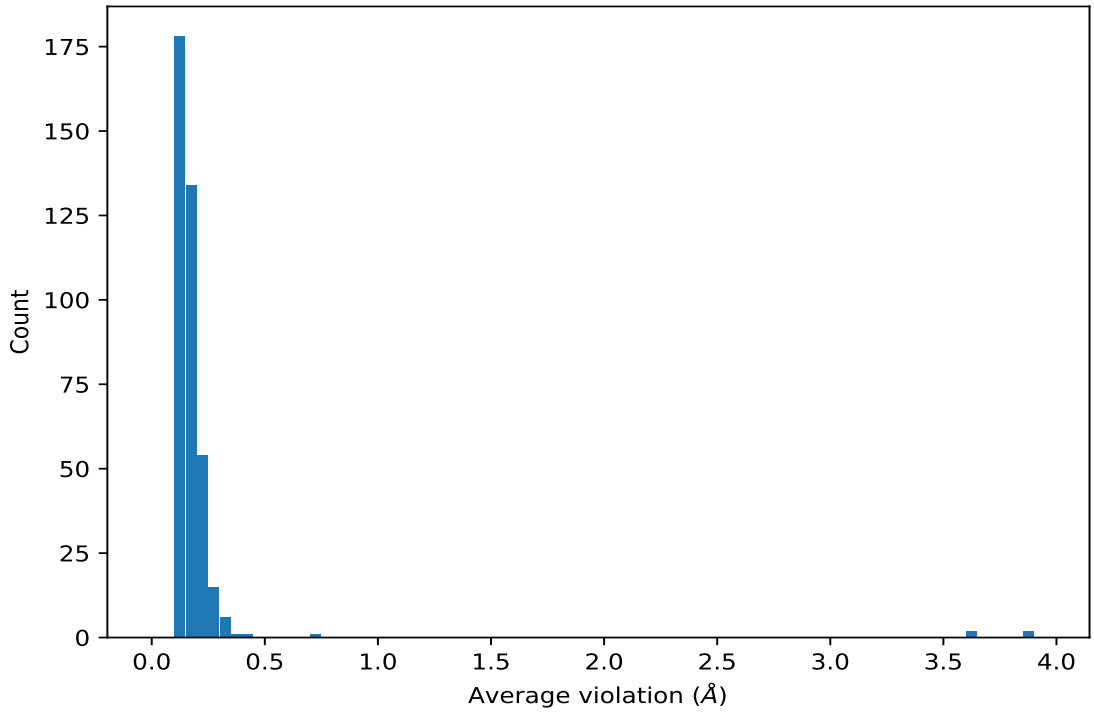
### 9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble (i)




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

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

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




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

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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,1711) | 1:A:176:TRP:HE1 | 1:A:197:LEU:HG | 20 | 0.36 | 0.32 | 0.28 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD11 | 20 | 0.35 | 0.09 | 0.36 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD12 | 20 | 0.35 | 0.09 | 0.36 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD13 | 20 | 0.35 | 0.09 | 0.36 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD21 | 20 | 0.35 | 0.09 | 0.36 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD22 | 20 | 0.35 | 0.09 | 0.36 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD23 | 20 | 0.35 | 0.09 | 0.36 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HB2 | 20 | 0.27 | 0.06 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HB3 | 20 | 0.27 | 0.06 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HB2 | 20 | 0.27 | 0.06 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HB3 | 20 | 0.27 | 0.06 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HB2 | 20 | 0.27 | 0.06 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HB3 | 20 | 0.27 | 0.06 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HB2 | 20 | 0.27 | 0.06 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HB3 | 20 | 0.27 | 0.06 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HB2 | 20 | 0.27 | 0.06 | 0.26 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HB3 | 20 | 0.27 | 0.06 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HB2 | 20 | 0.27 | 0.06 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HB3 | 20 | 0.27 | 0.06 | 0.26 |
| (1,1483) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:252:GLU:HG2 | 20 | 0.25 | 0.05 | 0.26 |
| (1,1483) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:252:GLU:HG3 | 20 | 0.25 | 0.05 | 0.26 |
| (1,1022) | 1:A:228:GLN:HB2 | 1:A:228:GLN:HE22 | 20 | 0.22 | 0.01 | 0.22 |
| (1,1072) | 1:A:228:GLN:HE21 | 1:A:229:ALA:H | 20 | 0.22 | 0.05 | 0.24 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG21 | 1:A:231:ARG:HG2 | 20 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG22 | 1:A:231:ARG:HG2 | 20 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG23 | 1:A:231:ARG:HG2 | 20 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (1,739) | 1:A:254:ARG:H | 1:A:254:ARG:HB3 | 20 | 0.22 | 0.04 | 0.23 |
| (1,335) | 1:A:219:VAL:HB | 1:A:220:GLU:H | 20 | 0.21 | 0.03 | 0.2 |
| (1,1039) | 1:A:232:LYS:HG3 | 1:A:252:GLU:H | 20 | 0.2 | 0.05 | 0.19 |
| (1,1021) | 1:A:228:GLN:HB3 | 1:A:228:GLN:HE22 | 20 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (1,1556) | 1:A:209:LYS:HB2 | 1:A:209:LYS:HD2 | 20 | 0.17 | 0.03 | 0.16 |
| (1,1556) | 1:A:209:LYS:HB2 | 1:A:209:LYS:HD3 | 20 | 0.17 | 0.03 | 0.16 |
| (1,1424) | 1:A:231:ARG:HD2 | 1:A:232:LYS:H | 20 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD11 | 19 | 0.21 | 0.06 | 0.2 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD12 | 19 | 0.21 | 0.06 | 0.2 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD13 | 19 | 0.21 | 0.06 | 0.2 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD11 | 19 | 0.21 | 0.06 | 0.2 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD12 | 19 | 0.21 | 0.06 | 0.2 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD13 | 19 | 0.21 | 0.06 | 0.2 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD11 | 19 | 0.21 | 0.06 | 0.2 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD12 | 19 | 0.21 | 0.06 | 0.2 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD13 | 19 | 0.21 | 0.06 | 0.2 |
| (1,258) | 1:A:232:LYS:HG3 | 1:A:251:LEU:HA | 19 | 0.17 | 0.04 | 0.18 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD11 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD12 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD13 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD21 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD22 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD23 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD11 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD12 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD13 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD21 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD22 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD23 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD11 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD12 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD13 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD21 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD22 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD23 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD11 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD12 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD13 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD21 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD22 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD23 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD11 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD12 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD13 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD21 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD22 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD23 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD11 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD12 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD13 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD21 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD22 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD23 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG21 | 18 | 0.23 | 0.04 | 0.22 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG22 | 18 | 0.23 | 0.04 | 0.22 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG23 | 18 | 0.23 | 0.04 | 0.22 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD11 | 1:A:251:LEU:HB2 | 18 | 0.2 | 0.04 | 0.2 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD12 | 1:A:251:LEU:HB2 | 18 | 0.2 | 0.04 | 0.2 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD13 | 1:A:251:LEU:HB2 | 18 | 0.2 | 0.04 | 0.2 |
| (1,1582) | 1:A:211:ARG:HD2 | 1:A:213:MET:H | 18 | 0.2 | 0.05 | 0.19 |
| (1,1582) | 1:A:211:ARG:HD3 | 1:A:213:MET:H | 18 | 0.2 | 0.05 | 0.19 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:H | 18 | 0.19 | 0.04 | 0.19 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:H | 18 | 0.19 | 0.04 | 0.19 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:H | 18 | 0.19 | 0.04 | 0.19 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:H | 18 | 0.19 | 0.04 | 0.19 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:H | 18 | 0.19 | 0.04 | 0.19 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:H | 18 | 0.19 | 0.04 | 0.19 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG11 | 18 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG12 | 18 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG13 | 18 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG21 | 18 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG22 | 18 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG23 | 18 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG11 | 18 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG12 | 18 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG13 | 18 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG21 | 18 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG22 | 18 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG23 | 18 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG11 | 18 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG12 | 18 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG13 | 18 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG21 | 18 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG22 | 18 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG23 | 18 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG11 | 18 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG12 | 18 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG13 | 18 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG21 | 18 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG22 | 18 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG23 | 18 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG11 | 18 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG12 | 18 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG13 | 18 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG21 | 18 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG22 | 18 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG23 | 18 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG11 | 18 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG12 | 18 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG13 | 18 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG21 | 18 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG22 | 18 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG23 | 18 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB1 | 18 | 0.17 | 0.03 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB2 | 18 | 0.17 | 0.03 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB3 | 18 | 0.17 | 0.03 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB1 | 18 | 0.17 | 0.03 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB2 | 18 | 0.17 | 0.03 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB3 | 18 | 0.17 | 0.03 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB1 | 18 | 0.17 | 0.03 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB2 | 18 | 0.17 | 0.03 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB3 | 18 | 0.17 | 0.03 | 0.18 |
| (1,1427) | 1:A:226:ARG:H | 1:A:226:ARG:HD3 | 18 | 0.16 | 0.04 | 0.15 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:236:LYS:H | 18 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:236:LYS:H | 18 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:236:LYS:H | 18 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:236:LYS:H | 18 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:236:LYS:H | 18 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:236:LYS:H | 18 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:236:LYS:HA | 18 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:236:LYS:HA | 18 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:236:LYS:HA | 18 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:236:LYS:HA | 18 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:236:LYS:HA | 18 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:236:LYS:HA | 18 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,788) | 1:A:235:LEU:HB3 | 1:A:236:LYS:H | 16 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG11 | 15 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG12 | 15 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG13 | 15 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG21 | 15 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG22 | 15 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG23 | 15 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (3,1) | 1:A:228:GLN:OE1 | 1:A:231:ARG:HH11 | 14 | 0.28 | 0.25 | 0.18 |
| (1,833) | 1:A:174:GLY:HA2 | 1:A:175:GLU:H | 14 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (1,898) | 1:A:191:GLN:HB3 | 1:A:248:ASP:H | 14 | 0.15 | 0.04 | 0.15 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HA | 13 | 0.21 | 0.05 | 0.22 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HA | 13 | 0.21 | 0.05 | 0.22 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HA | 13 | 0.21 | 0.05 | 0.22 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HA | 13 | 0.21 | 0.05 | 0.22 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HA | 13 | 0.21 | 0.05 | 0.22 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HA | 13 | 0.21 | 0.05 | 0.22 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE1 | 1:A:215:LEU:HD21 | 12 | 0.19 | 0.07 | 0.19 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE1 | 1:A:215:LEU:HD22 | 12 | 0.19 | 0.07 | 0.19 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE1 | 1:A:215:LEU:HD23 | 12 | 0.19 | 0.07 | 0.19 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE2 | 1:A:215:LEU:HD21 | 12 | 0.19 | 0.07 | 0.19 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE2 | 1:A:215:LEU:HD22 | 12 | 0.19 | 0.07 | 0.19 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE2 | 1:A:215:LEU:HD23 | 12 | 0.19 | 0.07 | 0.19 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE3 | 1:A:215:LEU:HD21 | 12 | 0.19 | 0.07 | 0.19 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE3 | 1:A:215:LEU:HD22 | 12 | 0.19 | 0.07 | 0.19 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE3 | 1:A:215:LEU:HD23 | 12 | 0.19 | 0.07 | 0.19 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD11 | 12 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD12 | 12 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD13 | 12 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD21 | 12 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD22 | 12 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD23 | 12 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD11 | 12 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD12 | 12 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD13 | 12 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD21 | 12 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD22 | 12 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD23 | 12 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD11 | 12 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD12 | 12 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD13 | 12 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD21 | 12 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD22 | 12 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD23 | 12 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD11 | 12 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD12 | 12 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD13 | 12 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD21 | 12 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD22 | 12 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD23 | 12 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD11 | 12 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD12 | 12 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD13 | 12 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD21 | 12 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD22 | 12 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD23 | 12 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD11 | 12 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD12 | 12 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD13 | 12 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD21 | 12 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD22 | 12 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD23 | 12 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD11 | 12 | 0.15 | 0.04 | 0.14 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD12 | 12 | 0.15 | 0.04 | 0.14 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD13 | 12 | 0.15 | 0.04 | 0.14 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD21 | 12 | 0.15 | 0.04 | 0.14 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD22 | 12 | 0.15 | 0.04 | 0.14 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD23 | 12 | 0.15 | 0.04 | 0.14 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:254:ARG:HB3 | 12 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:254:ARG:HB3 | 12 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:254:ARG:HB3 | 12 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:254:ARG:HB3 | 12 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:254:ARG:HB3 | 12 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:254:ARG:HB3 | 12 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (2,24) | 1:A:251:LEU:H | 1:A:233:LEU:O | 12 | 0.14 | 0.03 | 0.13 |
| (1,1105) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HB2 | 11 | 3.6 | 2.41 | 3.75 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,1105) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HB3 | 11 | 3.6 | 2.41 | 3.75 |
| (1,1308) | 1:A:236:LYS:HD2 | 1:A:237:GLY:H | 11 | 0.2 | 0.02 | 0.2 |
| (1,1308) | 1:A:236:LYS:HD3 | 1:A:237:GLY:H | 11 | 0.2 | 0.02 | 0.2 |
| (1,1716) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:234:ARG:HD2 | 11 | 0.17 | 0.05 | 0.17 |
| (1,1716) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:234:ARG:HD3 | 11 | 0.17 | 0.05 | 0.17 |
| (1,577) | 1:A:194:TYR:HD1 | 1:A:195:ALA:HA | 11 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG11 | 11 | 0.15 | 0.04 | 0.14 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG12 | 11 | 0.15 | 0.04 | 0.14 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG13 | 11 | 0.15 | 0.04 | 0.14 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG21 | 11 | 0.15 | 0.04 | 0.14 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG22 | 11 | 0.15 | 0.04 | 0.14 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG23 | 11 | 0.15 | 0.04 | 0.14 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG11 | 11 | 0.15 | 0.04 | 0.14 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG12 | 11 | 0.15 | 0.04 | 0.14 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG13 | 11 | 0.15 | 0.04 | 0.14 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG21 | 11 | 0.15 | 0.04 | 0.14 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG22 | 11 | 0.15 | 0.04 | 0.14 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG23 | 11 | 0.15 | 0.04 | 0.14 |
| (1,316) | 1:A:205:VAL:HA | 1:A:226:ARG:HD2 | 11 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:217:GLY:H | 10 | 0.21 | 0.05 | 0.2 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:217:GLY:H | 10 | 0.21 | 0.05 | 0.2 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:217:GLY:H | 10 | 0.21 | 0.05 | 0.2 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:217:GLY:H | 10 | 0.21 | 0.05 | 0.2 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:217:GLY:H | 10 | 0.21 | 0.05 | 0.2 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:217:GLY:H | 10 | 0.21 | 0.05 | 0.2 |
| (1,1106) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HG2 | 9 | 3.9 | 2.01 | 4.98 |
| (1,1106) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HG3 | 9 | 3.9 | 2.01 | 4.98 |
| (1,1098) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:175:GLU:HB2 | 9 | 0.15 | 0.04 | 0.12 |
| (1,1098) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:175:GLU:HB3 | 9 | 0.15 | 0.04 | 0.12 |
| (1,1383) | 1:A:253:VAL:HG11 | 1:A:254:ARG:HB3 | 9 | 0.14 | 0.03 | 0.13 |
| (1,1383) | 1:A:253:VAL:HG12 | 1:A:254:ARG:HB3 | 9 | 0.14 | 0.03 | 0.13 |
| (1,1383) | 1:A:253:VAL:HG13 | 1:A:254:ARG:HB3 | 9 | 0.14 | 0.03 | 0.13 |
| (1,1373) | 1:A:211:ARG:HB2 | 1:A:220:GLU:HG2 | 9 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD11 | 1:A:210:VAL:HG21 | 9 | 0.13 | 0.03 | 0.12 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD11 | 1:A:210:VAL:HG22 | 9 | 0.13 | 0.03 | 0.12 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD11 | 1:A:210:VAL:HG23 | 9 | 0.13 | 0.03 | 0.12 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD12 | 1:A:210:VAL:HG21 | 9 | 0.13 | 0.03 | 0.12 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD12 | 1:A:210:VAL:HG22 | 9 | 0.13 | 0.03 | 0.12 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD12 | 1:A:210:VAL:HG23 | 9 | 0.13 | 0.03 | 0.12 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD13 | 1:A:210:VAL:HG21 | 9 | 0.13 | 0.03 | 0.12 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD13 | 1:A:210:VAL:HG22 | 9 | 0.13 | 0.03 | 0.12 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD13 | 1:A:210:VAL:HG23 | 9 | 0.13 | 0.03 | 0.12 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,625) | 1:A:236:LYS:HG2 | 1:A:248:ASP:HB3 | 9 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1067) | 1:A:228:GLN:HB2 | 1:A:228:GLN:HE21 | 9 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,624) | 1:A:209:LYS:HD3 | 1:A:220:GLU:HB2 | 8 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1394) | 1:A:242:GLY:HA3 | 1:A:246:ARG:HG3 | 8 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (1,976) | 1:A:241:PRO:HB2 | 1:A:242:GLY:H | 7 | 0.19 | 0.05 | 0.22 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:238:LYS:H | 7 | 0.16 | 0.03 | 0.15 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:238:LYS:H | 7 | 0.16 | 0.03 | 0.15 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:238:LYS:H | 7 | 0.16 | 0.03 | 0.15 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:238:LYS:H | 7 | 0.16 | 0.03 | 0.15 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:238:LYS:H | 7 | 0.16 | 0.03 | 0.15 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:238:LYS:H | 7 | 0.16 | 0.03 | 0.15 |
| (1,663) | 1:A:205:VAL:HA | 1:A:226:ARG:HD3 | 7 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1003) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:198:ASP:H | 7 | 0.12 | 0.01 | 0.13 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG21 | 1:A:256:THR:HG21 | 7 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG21 | 1:A:256:THR:HG22 | 7 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG21 | 1:A:256:THR:HG23 | 7 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG22 | 1:A:256:THR:HG21 | 7 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG22 | 1:A:256:THR:HG22 | 7 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG22 | 1:A:256:THR:HG23 | 7 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG23 | 1:A:256:THR:HG21 | 7 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG23 | 1:A:256:THR:HG22 | 7 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG23 | 1:A:256:THR:HG23 | 7 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD11 | 7 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD12 | 7 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD13 | 7 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD21 | 7 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD22 | 7 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD23 | 7 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,320) | 1:A:196:THR:HG21 | 1:A:254:ARG:HD3 | 6 | 0.18 | 0.04 | 0.16 |
| (1,320) | 1:A:196:THR:HG22 | 1:A:254:ARG:HD3 | 6 | 0.18 | 0.04 | 0.16 |
| (1,320) | 1:A:196:THR:HG23 | 1:A:254:ARG:HD3 | 6 | 0.18 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1310) | 1:A:236:LYS:HE2 | 1:A:237:GLY:H | 6 | 0.16 | 0.03 | 0.15 |
| (1,1310) | 1:A:236:LYS:HE3 | 1:A:237:GLY:H | 6 | 0.16 | 0.03 | 0.15 |
| (1,689) | 1:A:215:LEU:HB2 | 1:A:240:PHE:HD1 | 6 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (1,471) | 1:A:201:ALA:HB1 | 1:A:202:PRO:HB3 | 5 | 0.24 | 0.01 | 0.24 |
| (1,471) | 1:A:201:ALA:HB2 | 1:A:202:PRO:HB3 | 5 | 0.24 | 0.01 | 0.24 |
| (1,471) | 1:A:201:ALA:HB3 | 1:A:202:PRO:HB3 | 5 | 0.24 | 0.01 | 0.24 |
| (1,1708) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:224:PRO:HB2 | 5 | 0.17 | 0.06 | 0.13 |
| (1,1708) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:224:PRO:HB3 | 5 | 0.17 | 0.06 | 0.13 |
| (1,729) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:216:GLU:H | 5 | 0.15 | 0.05 | 0.13 |
| (1,1063) | 1:A:191:GLN:HE21 | 1:A:242:GLY:HA2 | 5 | 0.14 | 0.01 | 0.13 |
| (1,1363) | 1:A:229:ALA:HA | 1:A:231:ARG:HD3 | 5 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,948) | 1:A:237:GLY:H | 1:A:248:ASP:HB2 | 5 | 0.13 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1712) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:177:GLN:HG2 | 4 | 0.18 | 0.04 | 0.17 |
| (1,1712) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:177:GLN:HG3 | 4 | 0.18 | 0.04 | 0.17 |
| (1,1717) | 1:A:172:THR:H | 1:A:219:VAL:HG21 | 4 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (1,1717) | 1:A:172:THR:H | 1:A:219:VAL:HG22 | 4 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (1,1717) | 1:A:172:THR:H | 1:A:219:VAL:HG23 | 4 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (1,1201) | 1:A:209:LYS:HE2 | 1:A:222:ALA:HA | 4 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (1,1201) | 1:A:209:LYS:HE3 | 1:A:222:ALA:HA | 4 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (1,889) | 1:A:211:ARG:HA | 1:A:219:VAL:H | 4 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (1,1095) | 1:A:174:GLY:HA2 | 1:A:234:ARG:HG2 | 4 | 0.14 | 0.01 | 0.15 |
| (1,1095) | 1:A:174:GLY:HA2 | 1:A:234:ARG:HG3 | 4 | 0.14 | 0.01 | 0.15 |
| (1,1095) | 1:A:174:GLY:HA3 | 1:A:234:ARG:HG2 | 4 | 0.14 | 0.01 | 0.15 |
| (1,1095) | 1:A:174:GLY:HA3 | 1:A:234:ARG:HG3 | 4 | 0.14 | 0.01 | 0.15 |
| (1,1397) | 1:A:211:ARG:HG2 | 1:A:220:GLU:HG3 | 4 | 0.14 | 0.04 | 0.12 |
| (1,907) | 1:A:209:LYS:HG3 | 1:A:210:VAL:H | 4 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,979) | 1:A:244:ALA:HA | 1:A:245:GLY:H | 4 | 0.13 | 0.01 | 0.14 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG11 | 1:A:253:VAL:HG11 | 4 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG11 | 1:A:253:VAL:HG12 | 4 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG11 | 1:A:253:VAL:HG13 | 4 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG12 | 1:A:253:VAL:HG11 | 4 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG12 | 1:A:253:VAL:HG12 | 4 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG12 | 1:A:253:VAL:HG13 | 4 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG13 | 1:A:253:VAL:HG11 | 4 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG13 | 1:A:253:VAL:HG12 | 4 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG13 | 1:A:253:VAL:HG13 | 4 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1670) | 1:A:236:LYS:HG2 | 1:A:248:ASP:HA | 4 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1670) | 1:A:236:LYS:HG3 | 1:A:248:ASP:HA | 4 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1151) | 1:A:199:VAL:HA | 1:A:210:VAL:HG11 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1151) | 1:A:199:VAL:HA | 1:A:210:VAL:HG12 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1151) | 1:A:199:VAL:HA | 1:A:210:VAL:HG13 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1151) | 1:A:199:VAL:HA | 1:A:210:VAL:HG21 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1151) | 1:A:199:VAL:HA | 1:A:210:VAL:HG22 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1151) | 1:A:199:VAL:HA | 1:A:210:VAL:HG23 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,10) | 1:A:210:VAL:H | 1:A:221:VAL:O | 4 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE21 | 1:A:253:VAL:HG11 | 3 | 0.2 | 0.05 | 0.19 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE21 | 1:A:253:VAL:HG12 | 3 | 0.2 | 0.05 | 0.19 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE21 | 1:A:253:VAL:HG13 | 3 | 0.2 | 0.05 | 0.19 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE21 | 1:A:253:VAL:HG21 | 3 | 0.2 | 0.05 | 0.19 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE21 | 1:A:253:VAL:HG22 | 3 | 0.2 | 0.05 | 0.19 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE21 | 1:A:253:VAL:HG23 | 3 | 0.2 | 0.05 | 0.19 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE22 | 1:A:253:VAL:HG11 | 3 | 0.2 | 0.05 | 0.19 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE22 | 1:A:253:VAL:HG12 | 3 | 0.2 | 0.05 | 0.19 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

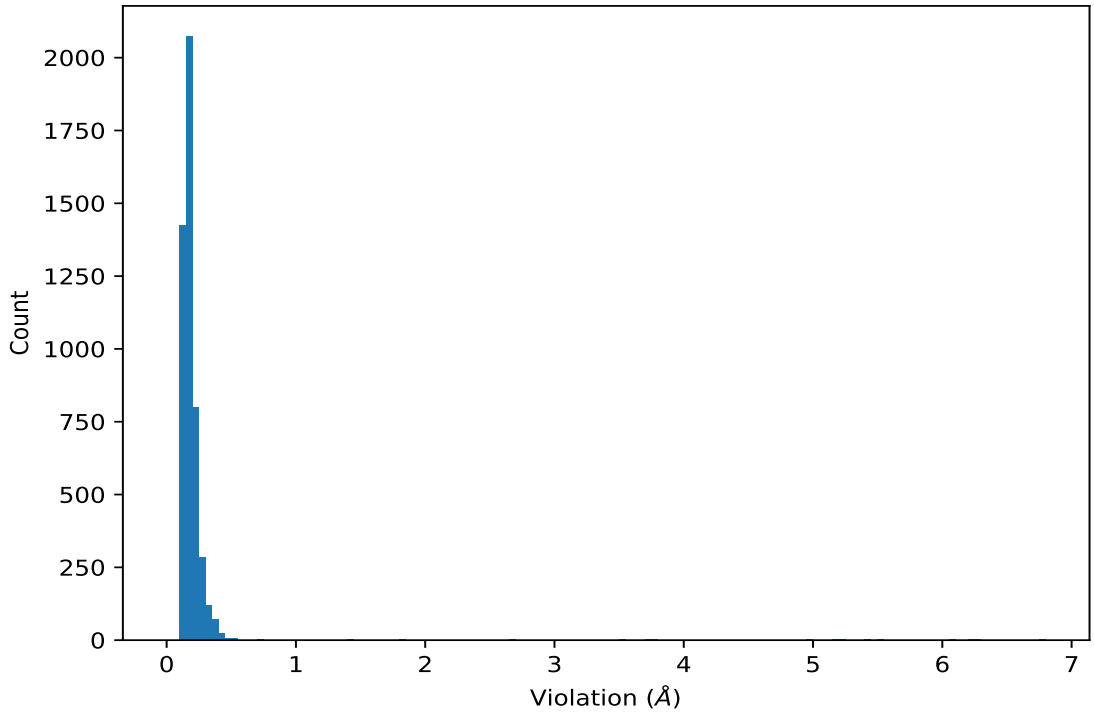
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE22 | 1:A:253:VAL:HG13 | 3 | 0.2 | 0.05 | 0.19 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE22 | 1:A:253:VAL:HG21 | 3 | 0.2 | 0.05 | 0.19 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE22 | 1:A:253:VAL:HG22 | 3 | 0.2 | 0.05 | 0.19 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE22 | 1:A:253:VAL:HG23 | 3 | 0.2 | 0.05 | 0.19 |
| (1,658) | 1:A:173:ALA:HB1 | 1:A:220:GLU:HB3 | 3 | 0.15 | 0.05 | 0.11 |
| (1,658) | 1:A:173:ALA:HB2 | 1:A:220:GLU:HB3 | 3 | 0.15 | 0.05 | 0.11 |
| (1,658) | 1:A:173:ALA:HB3 | 1:A:220:GLU:HB3 | 3 | 0.15 | 0.05 | 0.11 |
| (1,780) | 1:A:197:LEU:H | 1:A:252:GLU:H | 3 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1014) | 1:A:196:THR:HG21 | 1:A:252:GLU:H | 3 | 0.14 | 0.03 | 0.13 |
| (1,1014) | 1:A:196:THR:HG22 | 1:A:252:GLU:H | 3 | 0.14 | 0.03 | 0.13 |
| (1,1014) | 1:A:196:THR:HG23 | 1:A:252:GLU:H | 3 | 0.14 | 0.03 | 0.13 |
| (1,1077) | 1:A:169:GLU:HA | 1:A:169:GLU:HG2 | 3 | 0.14 | 0.01 | 0.13 |
| (1,1077) | 1:A:169:GLU:HA | 1:A:169:GLU:HG3 | 3 | 0.14 | 0.01 | 0.13 |
| (1,545) | 1:A:202:PRO:HD2 | 1:A:255:ILE:HG21 | 3 | 0.13 | 0.02 | 0.14 |
| (1,545) | 1:A:202:PRO:HD2 | 1:A:255:ILE:HG22 | 3 | 0.13 | 0.02 | 0.14 |
| (1,545) | 1:A:202:PRO:HD2 | 1:A:255:ILE:HG23 | 3 | 0.13 | 0.02 | 0.14 |
| (1,655) | 1:A:172:THR:HB | 1:A:219:VAL:HB | 3 | 0.13 | 0.0 | 0.13 |
| (1,1445) | 1:A:197:LEU:H | 1:A:213:MET:H | 3 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,1225) | 1:A:211:ARG:HD2 | 1:A:212:ALA:H | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1225) | 1:A:211:ARG:HD3 | 1:A:212:ALA:H | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1370) | 1:A:228:GLN:H | 1:A:228:GLN:HG2 | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,762) | 1:A:201:ALA:H | 1:A:202:PRO:HD3 | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,190) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:255:ILE:HA | 2 | 0.74 | 0.03 | 0.74 |
| (2,57) | 1:A:228:GLN:OE1 | 1:A:231:ARG:NH1 | 2 | 0.41 | 0.12 | 0.41 |
| (1,1079) | 1:A:169:GLU:HG2 | 1:A:170:THR:H | 2 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,1079) | 1:A:169:GLU:HG3 | 1:A:170:THR:H | 2 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,871) | 1:A:248:ASP:HB2 | 1:A:249:LEU:H | 2 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (1,1685) | 1:A:248:ASP:HB2 | 1:A:250:TYR:HE2 | 2 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (1,1685) | 1:A:248:ASP:HB3 | 1:A:250:TYR:HE2 | 2 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (1,1421) | 1:A:199:VAL:H | 1:A:254:ARG:HB3 | 2 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (1,695) | 1:A:194:TYR:HE1 | 1:A:232:LYS:HG3 | 2 | 0.14 | 0.03 | 0.14 |
| (1,1295) | 1:A:234:ARG:HD2 | 1:A:250:TYR:HD2 | 2 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,1295) | 1:A:234:ARG:HD3 | 1:A:250:TYR:HD2 | 2 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,932) | 1:A:236:LYS:H | 1:A:238:LYS:H | 2 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,538) | 1:A:254:ARG:HG3 | 1:A:256:THR:HG21 | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,538) | 1:A:254:ARG:HG3 | 1:A:256:THR:HG22 | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,538) | 1:A:254:ARG:HG3 | 1:A:256:THR:HG23 | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1126) | 1:A:194:TYR:HD1 | 1:A:232:LYS:HE2 | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1126) | 1:A:194:TYR:HD1 | 1:A:232:LYS:HE3 | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,838) | 1:A:209:LYS:H | 1:A:209:LYS:HB3 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1313) | 1:A:238:LYS:H | 1:A:238:LYS:HE2 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1313) | 1:A:238:LYS:H | 1:A:238:LYS:HE3 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |

[1]Number of violated models, [2]Standard deviation

## 9.5 All violated distance restraints (i)

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

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




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

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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1106) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HG2 | 20 | 6.78 |
| (1,1106) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HG3 | 20 | 6.78 |
| (1,1105) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HB2 | 16 | 6.26 |
| (1,1105) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HB3 | 16 | 6.26 |
| (1,1105) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HB2 | 11 | 6.22 |
| (1,1105) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HB3 | 11 | 6.22 |
| (1,1105) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HB2 | 20 | 6.09 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1105) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HB3 | 20 | 6.09 |
| (1,1105) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HB2 | 19 | 5.5 |
| (1,1105) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HB3 | 19 | 5.5 |
| (1,1105) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HB2 | 13 | 5.44 |
| (1,1105) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HB3 | 13 | 5.44 |
| (1,1106) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HG2 | 11 | 5.23 |
| (1,1106) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HG3 | 11 | 5.23 |
| (1,1106) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HG2 | 16 | 5.23 |
| (1,1106) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HG3 | 16 | 5.23 |
| (1,1106) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HG2 | 15 | 5.17 |
| (1,1106) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HG3 | 15 | 5.17 |
| (1,1106) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HG2 | 19 | 4.98 |
| (1,1106) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HG3 | 19 | 4.98 |
| (1,1105) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HB2 | 12 | 3.75 |
| (1,1105) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HB3 | 12 | 3.75 |
| (1,1105) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HB2 | 15 | 3.73 |
| (1,1105) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HB3 | 15 | 3.73 |
| (1,1106) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HG2 | 13 | 3.51 |
| (1,1106) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HG3 | 13 | 3.51 |
| (1,1106) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HG2 | 12 | 2.68 |
| (1,1106) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HG3 | 12 | 2.68 |
| (1,1105) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HB2 | 7 | 1.82 |
| (1,1105) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HB3 | 7 | 1.82 |
| (1,1711) | 1:A:176:TRP:HE1 | 1:A:197:LEU:HG | 18 | 1.7 |
| (1,1106) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HG2 | 14 | 1.41 |
| (1,1106) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HG3 | 14 | 1.41 |
| (3,1) | 1:A:228:GLN:OE1 | 1:A:231:ARG:HH11 | 1 | 1.03 |
| (1,190) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:255:ILE:HA | 13 | 0.77 |
| (3,1) | 1:A:228:GLN:OE1 | 1:A:231:ARG:HH11 | 10 | 0.71 |
| (1,190) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:255:ILE:HA | 17 | 0.71 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD11 | 15 | 0.54 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD12 | 15 | 0.54 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD13 | 15 | 0.54 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD21 | 15 | 0.54 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD22 | 15 | 0.54 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD23 | 15 | 0.54 |
| (2,57) | 1:A:228:GLN:OE1 | 1:A:231:ARG:NH1 | 1 | 0.53 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD11 | 12 | 0.45 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD12 | 12 | 0.45 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD13 | 12 | 0.45 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD21 | 12 | 0.45 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD22 | 12 | 0.45 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD23 | 12 | 0.45 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD11 | 4 | 0.43 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD12 | 4 | 0.43 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD13 | 4 | 0.43 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD21 | 4 | 0.43 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD22 | 4 | 0.43 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD23 | 4 | 0.43 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD11 | 8 | 0.43 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD12 | 8 | 0.43 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD13 | 8 | 0.43 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD21 | 8 | 0.43 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD22 | 8 | 0.43 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD23 | 8 | 0.43 |
| (1,1711) | 1:A:176:TRP:HE1 | 1:A:197:LEU:HG | 8 | 0.42 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD11 | 10 | 0.42 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD12 | 10 | 0.42 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD13 | 10 | 0.42 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD21 | 10 | 0.42 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD22 | 10 | 0.42 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD23 | 10 | 0.42 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD11 | 7 | 0.4 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD12 | 7 | 0.4 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD13 | 7 | 0.4 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD21 | 7 | 0.4 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD22 | 7 | 0.4 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD23 | 7 | 0.4 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD11 | 6 | 0.39 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD12 | 6 | 0.39 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD13 | 6 | 0.39 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD21 | 6 | 0.39 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD22 | 6 | 0.39 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD23 | 6 | 0.39 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD11 | 11 | 0.39 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD12 | 11 | 0.39 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD13 | 11 | 0.39 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD21 | 11 | 0.39 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD22 | 11 | 0.39 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD23 | 11 | 0.39 |
| (1,1711) | 1:A:176:TRP:HE1 | 1:A:197:LEU:HG | 17 | 0.38 |
| (1,1711) | 1:A:176:TRP:HE1 | 1:A:197:LEU:HG | 19 | 0.38 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HB2 | 11 | 0.38 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HB3 | 11 | 0.38 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HB2 | 11 | 0.38 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HB3 | 11 | 0.38 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HB2 | 11 | 0.38 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HB3 | 11 | 0.38 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HB2 | 11 | 0.38 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HB3 | 11 | 0.38 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HB2 | 11 | 0.38 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HB3 | 11 | 0.38 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HB2 | 11 | 0.38 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HB3 | 11 | 0.38 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD11 | 9 | 0.38 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD12 | 9 | 0.38 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD13 | 9 | 0.38 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD21 | 9 | 0.38 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD22 | 9 | 0.38 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD23 | 9 | 0.38 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD11 | 13 | 0.38 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD12 | 13 | 0.38 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD13 | 13 | 0.38 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD21 | 13 | 0.38 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD22 | 13 | 0.38 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD23 | 13 | 0.38 |
| (1,1105) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HB2 | 9 | 0.38 |
| (1,1105) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HB3 | 9 | 0.38 |
| (1,1711) | 1:A:176:TRP:HE1 | 1:A:197:LEU:HG | 9 | 0.37 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HB2 | 2 | 0.37 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HB3 | 2 | 0.37 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HB2 | 2 | 0.37 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HB3 | 2 | 0.37 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HB2 | 2 | 0.37 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HB3 | 2 | 0.37 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HB2 | 2 | 0.37 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HB3 | 2 | 0.37 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HB2 | 2 | 0.37 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HB3 | 2 | 0.37 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HB2 | 2 | 0.37 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HB3 | 2 | 0.37 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HB2 | 18 | 0.35 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HB3 | 18 | 0.35 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HB2 | 18 | 0.35 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HB3 | 18 | 0.35 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HB2 | 18 | 0.35 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HB3 | 18 | 0.35 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HB2 | 18 | 0.35 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HB3 | 18 | 0.35 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HB2 | 18 | 0.35 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HB3 | 18 | 0.35 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HB2 | 18 | 0.35 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HB3 | 18 | 0.35 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD11 | 17 | 0.35 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD12 | 17 | 0.35 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD13 | 17 | 0.35 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD21 | 17 | 0.35 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD22 | 17 | 0.35 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD23 | 17 | 0.35 |
| (1,1483) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:252:GLU:HG2 | 4 | 0.35 |
| (1,1483) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:252:GLU:HG3 | 4 | 0.35 |
| (1,1711) | 1:A:176:TRP:HE1 | 1:A:197:LEU:HG | 11 | 0.34 |
| (1,1711) | 1:A:176:TRP:HE1 | 1:A:197:LEU:HG | 12 | 0.34 |
| (1,1711) | 1:A:176:TRP:HE1 | 1:A:197:LEU:HG | 14 | 0.34 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE1 | 1:A:215:LEU:HD21 | 16 | 0.33 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE1 | 1:A:215:LEU:HD22 | 16 | 0.33 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE1 | 1:A:215:LEU:HD23 | 16 | 0.33 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE2 | 1:A:215:LEU:HD21 | 16 | 0.33 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE2 | 1:A:215:LEU:HD22 | 16 | 0.33 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE2 | 1:A:215:LEU:HD23 | 16 | 0.33 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE3 | 1:A:215:LEU:HD21 | 16 | 0.33 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE3 | 1:A:215:LEU:HD22 | 16 | 0.33 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE3 | 1:A:215:LEU:HD23 | 16 | 0.33 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG21 | 4 | 0.33 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG22 | 4 | 0.33 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG23 | 4 | 0.33 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG21 | 14 | 0.33 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG22 | 14 | 0.33 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG23 | 14 | 0.33 |
| (1,1711) | 1:A:176:TRP:HE1 | 1:A:197:LEU:HG | 2 | 0.33 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD11 | 18 | 0.33 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD12 | 18 | 0.33 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD13 | 18 | 0.33 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD21 | 18 | 0.33 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD22 | 18 | 0.33 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD23 | 18 | 0.33 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HB2 | 1 | 0.32 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HB3 | 1 | 0.32 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HB2 | 1 | 0.32 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HB3 | 1 | 0.32 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HB2 | 1 | 0.32 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HB3 | 1 | 0.32 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HB2 | 1 | 0.32 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HB3 | 1 | 0.32 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HB2 | 1 | 0.32 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HB3 | 1 | 0.32 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HB2 | 1 | 0.32 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HB3 | 1 | 0.32 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HB2 | 20 | 0.32 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HB3 | 20 | 0.32 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HB2 | 20 | 0.32 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HB3 | 20 | 0.32 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HB2 | 20 | 0.32 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HB3 | 20 | 0.32 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HB2 | 20 | 0.32 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HB3 | 20 | 0.32 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HB2 | 20 | 0.32 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HB3 | 20 | 0.32 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HB2 | 20 | 0.32 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HB3 | 20 | 0.32 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD11 | 1 | 0.32 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD12 | 1 | 0.32 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD13 | 1 | 0.32 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD21 | 1 | 0.32 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD22 | 1 | 0.32 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD23 | 1 | 0.32 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD11 | 5 | 0.32 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD12 | 5 | 0.32 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD13 | 5 | 0.32 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD21 | 5 | 0.32 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD22 | 5 | 0.32 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD23 | 5 | 0.32 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD11 | 20 | 0.32 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD12 | 20 | 0.32 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD13 | 20 | 0.32 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD21 | 20 | 0.32 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD22 | 20 | 0.32 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD23 | 20 | 0.32 |
| (1,1582) | 1:A:211:ARG:HD2 | 1:A:213:MET:H | 14 | 0.32 |
| (1,1582) | 1:A:211:ARG:HD3 | 1:A:213:MET:H | 14 | 0.32 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD11 | 4 | 0.31 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD12 | 4 | 0.31 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD13 | 4 | 0.31 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD11 | 4 | 0.31 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD12 | 4 | 0.31 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD13 | 4 | 0.31 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD11 | 4 | 0.31 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD12 | 4 | 0.31 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD13 | 4 | 0.31 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD11 | 7 | 0.31 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD12 | 7 | 0.31 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD13 | 7 | 0.31 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD11 | 7 | 0.31 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD12 | 7 | 0.31 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD13 | 7 | 0.31 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD11 | 7 | 0.31 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD12 | 7 | 0.31 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD13 | 7 | 0.31 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HB2 | 19 | 0.31 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HB3 | 19 | 0.31 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HB2 | 19 | 0.31 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HB3 | 19 | 0.31 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HB2 | 19 | 0.31 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HB3 | 19 | 0.31 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HB2 | 19 | 0.31 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HB3 | 19 | 0.31 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HB2 | 19 | 0.31 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HB3 | 19 | 0.31 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HB2 | 19 | 0.31 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HB3 | 19 | 0.31 |
| (1,1039) | 1:A:232:LYS:HG3 | 1:A:252:GLU:H | 7 | 0.31 |
| (1,335) | 1:A:219:VAL:HB | 1:A:220:GLU:H | 19 | 0.3 |
| (1,1711) | 1:A:176:TRP:HE1 | 1:A:197:LEU:HG | 6 | 0.3 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HB2 | 16 | 0.3 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HB3 | 16 | 0.3 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HB2 | 16 | 0.3 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HB3 | 16 | 0.3 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HB2 | 16 | 0.3 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HB3 | 16 | 0.3 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HB2 | 16 | 0.3 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HB3 | 16 | 0.3 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HB2 | 16 | 0.3 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HB3 | 16 | 0.3 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HB2 | 16 | 0.3 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HB3 | 16 | 0.3 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD11 | 16 | 0.3 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD12 | 16 | 0.3 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD13 | 16 | 0.3 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD21 | 16 | 0.3 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD22 | 16 | 0.3 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD23 | 16 | 0.3 |
| (1,1072) | 1:A:228:GLN:HE21 | 1:A:229:ALA:H | 3 | 0.3 |
| (2,57) | 1:A:228:GLN:OE1 | 1:A:231:ARG:NH1 | 10 | 0.29 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE1 | 1:A:215:LEU:HD21 | 1 | 0.29 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE1 | 1:A:215:LEU:HD22 | 1 | 0.29 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE1 | 1:A:215:LEU:HD23 | 1 | 0.29 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE2 | 1:A:215:LEU:HD21 | 1 | 0.29 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE2 | 1:A:215:LEU:HD22 | 1 | 0.29 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE2 | 1:A:215:LEU:HD23 | 1 | 0.29 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE3 | 1:A:215:LEU:HD21 | 1 | 0.29 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE3 | 1:A:215:LEU:HD22 | 1 | 0.29 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE3 | 1:A:215:LEU:HD23 | 1 | 0.29 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:217:GLY:H | 2 | 0.29 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:217:GLY:H | 2 | 0.29 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:217:GLY:H | 2 | 0.29 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:217:GLY:H | 2 | 0.29 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:217:GLY:H | 2 | 0.29 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:217:GLY:H | 2 | 0.29 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:217:GLY:H | 11 | 0.29 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:217:GLY:H | 11 | 0.29 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:217:GLY:H | 11 | 0.29 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:217:GLY:H | 11 | 0.29 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:217:GLY:H | 11 | 0.29 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:217:GLY:H | 11 | 0.29 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HA | 19 | 0.29 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HA | 19 | 0.29 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HA | 19 | 0.29 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HA | 19 | 0.29 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HA | 19 | 0.29 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HA | 19 | 0.29 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:H | 19 | 0.29 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:H | 19 | 0.29 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:H | 19 | 0.29 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:H | 19 | 0.29 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:H | 19 | 0.29 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:H | 19 | 0.29 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD11 | 14 | 0.29 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD12 | 14 | 0.29 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD13 | 14 | 0.29 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD21 | 14 | 0.29 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD22 | 14 | 0.29 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD23 | 14 | 0.29 |
| (1,1483) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:252:GLU:HG2 | 9 | 0.29 |
| (1,1483) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:252:GLU:HG3 | 9 | 0.29 |
| (1,1483) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:252:GLU:HG2 | 13 | 0.29 |
| (1,1483) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:252:GLU:HG3 | 13 | 0.29 |
| (1,1483) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:252:GLU:HG2 | 20 | 0.29 |
| (1,1483) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:252:GLU:HG3 | 20 | 0.29 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG21 | 1:A:231:ARG:HG2 | 20 | 0.29 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG22 | 1:A:231:ARG:HG2 | 20 | 0.29 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG23 | 1:A:231:ARG:HG2 | 20 | 0.29 |
| (1,1039) | 1:A:232:LYS:HG3 | 1:A:252:GLU:H | 6 | 0.29 |
| (1,788) | 1:A:235:LEU:HB3 | 1:A:236:LYS:H | 2 | 0.28 |
| (1,739) | 1:A:254:ARG:H | 1:A:254:ARG:HB3 | 7 | 0.28 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD11 | 5 | 0.28 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD12 | 5 | 0.28 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD13 | 5 | 0.28 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD11 | 5 | 0.28 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD12 | 5 | 0.28 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD13 | 5 | 0.28 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD11 | 5 | 0.28 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD12 | 5 | 0.28 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD13 | 5 | 0.28 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG21 | 11 | 0.28 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG22 | 11 | 0.28 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG23 | 11 | 0.28 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG21 | 19 | 0.28 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG22 | 19 | 0.28 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG23 | 19 | 0.28 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD11 | 1:A:251:LEU:HB2 | 7 | 0.28 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD12 | 1:A:251:LEU:HB2 | 7 | 0.28 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD13 | 1:A:251:LEU:HB2 | 7 | 0.28 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HB2 | 14 | 0.28 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HB3 | 14 | 0.28 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HB2 | 14 | 0.28 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HB3 | 14 | 0.28 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HB2 | 14 | 0.28 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HB3 | 14 | 0.28 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HB2 | 14 | 0.28 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HB3 | 14 | 0.28 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HB2 | 14 | 0.28 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HB3 | 14 | 0.28 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HB2 | 14 | 0.28 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HB3 | 14 | 0.28 |
| (1,1483) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:252:GLU:HG2 | 7 | 0.28 |
| (1,1483) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:252:GLU:HG3 | 7 | 0.28 |
| (1,1483) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:252:GLU:HG2 | 11 | 0.28 |
| (1,1483) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:252:GLU:HG3 | 11 | 0.28 |
| (1,1072) | 1:A:228:GLN:HE21 | 1:A:229:ALA:H | 17 | 0.28 |
| (3,1) | 1:A:228:GLN:OE1 | 1:A:231:ARG:HH11 | 14 | 0.27 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD11 | 10 | 0.27 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD12 | 10 | 0.27 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD13 | 10 | 0.27 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD11 | 10 | 0.27 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD12 | 10 | 0.27 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD13 | 10 | 0.27 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD11 | 10 | 0.27 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD12 | 10 | 0.27 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD13 | 10 | 0.27 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD11 | 13 | 0.27 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD12 | 13 | 0.27 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD13 | 13 | 0.27 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD11 | 13 | 0.27 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD12 | 13 | 0.27 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD13 | 13 | 0.27 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD11 | 13 | 0.27 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD12 | 13 | 0.27 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD13 | 13 | 0.27 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD11 | 14 | 0.27 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD12 | 14 | 0.27 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD13 | 14 | 0.27 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD11 | 14 | 0.27 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD12 | 14 | 0.27 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD13 | 14 | 0.27 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD11 | 14 | 0.27 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD12 | 14 | 0.27 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD13 | 14 | 0.27 |
| (1,1708) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:224:PRO:HB2 | 8 | 0.27 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1708) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:224:PRO:HB3 | 8 | 0.27 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HB2 | 12 | 0.27 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HB3 | 12 | 0.27 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HB2 | 12 | 0.27 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HB3 | 12 | 0.27 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HB2 | 12 | 0.27 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HB3 | 12 | 0.27 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HB2 | 12 | 0.27 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HB3 | 12 | 0.27 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HB2 | 12 | 0.27 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HB3 | 12 | 0.27 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HB2 | 12 | 0.27 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HB3 | 12 | 0.27 |
| (1,1483) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:252:GLU:HG2 | 10 | 0.27 |
| (1,1483) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:252:GLU:HG3 | 10 | 0.27 |
| (1,1072) | 1:A:228:GLN:HE21 | 1:A:229:ALA:H | 9 | 0.27 |
| (1,1072) | 1:A:228:GLN:HE21 | 1:A:229:ALA:H | 15 | 0.27 |
| (1,1072) | 1:A:228:GLN:HE21 | 1:A:229:ALA:H | 19 | 0.27 |
| (1,976) | 1:A:241:PRO:HB2 | 1:A:242:GLY:H | 2 | 0.26 |
| (1,739) | 1:A:254:ARG:H | 1:A:254:ARG:HB3 | 12 | 0.26 |
| (1,739) | 1:A:254:ARG:H | 1:A:254:ARG:HB3 | 14 | 0.26 |
| (1,471) | 1:A:201:ALA:HB1 | 1:A:202:PRO:HB3 | 13 | 0.26 |
| (1,471) | 1:A:201:ALA:HB2 | 1:A:202:PRO:HB3 | 13 | 0.26 |
| (1,471) | 1:A:201:ALA:HB3 | 1:A:202:PRO:HB3 | 13 | 0.26 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD11 | 1:A:251:LEU:HB2 | 13 | 0.26 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD12 | 1:A:251:LEU:HB2 | 13 | 0.26 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD13 | 1:A:251:LEU:HB2 | 13 | 0.26 |
| (1,320) | 1:A:196:THR:HG21 | 1:A:254:ARG:HD3 | 16 | 0.26 |
| (1,320) | 1:A:196:THR:HG22 | 1:A:254:ARG:HD3 | 16 | 0.26 |
| (1,320) | 1:A:196:THR:HG23 | 1:A:254:ARG:HD3 | 16 | 0.26 |
| (1,1716) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:234:ARG:HD2 | 6 | 0.26 |
| (1,1716) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:234:ARG:HD3 | 6 | 0.26 |
| (1,1711) | 1:A:176:TRP:HE1 | 1:A:197:LEU:HG | 4 | 0.26 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE21 | 1:A:253:VAL:HG11 | 20 | 0.26 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE21 | 1:A:253:VAL:HG12 | 20 | 0.26 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE21 | 1:A:253:VAL:HG13 | 20 | 0.26 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE21 | 1:A:253:VAL:HG21 | 20 | 0.26 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE21 | 1:A:253:VAL:HG22 | 20 | 0.26 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE21 | 1:A:253:VAL:HG23 | 20 | 0.26 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE22 | 1:A:253:VAL:HG11 | 20 | 0.26 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE22 | 1:A:253:VAL:HG12 | 20 | 0.26 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE22 | 1:A:253:VAL:HG13 | 20 | 0.26 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE22 | 1:A:253:VAL:HG21 | 20 | 0.26 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE22 | 1:A:253:VAL:HG22 | 20 | 0.26 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE22 | 1:A:253:VAL:HG23 | 20 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HB2 | 8 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HB3 | 8 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HB2 | 8 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HB3 | 8 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HB2 | 8 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HB3 | 8 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HB2 | 8 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HB3 | 8 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HB2 | 8 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HB3 | 8 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HB2 | 8 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HB3 | 8 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HB2 | 9 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HB3 | 9 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HB2 | 9 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HB3 | 9 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HB2 | 9 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HB3 | 9 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HB2 | 9 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HB3 | 9 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HB2 | 9 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HB3 | 9 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HB2 | 9 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HB3 | 9 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HB2 | 10 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HB3 | 10 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HB2 | 10 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HB3 | 10 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HB2 | 10 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HB3 | 10 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HB2 | 10 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HB3 | 10 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HB2 | 10 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HB3 | 10 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HB2 | 10 | 0.26 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HB3 | 10 | 0.26 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HA | 3 | 0.26 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HA | 3 | 0.26 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HA | 3 | 0.26 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HA | 3 | 0.26 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HA | 3 | 0.26 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HA | 3 | 0.26 |
| (1,1582) | 1:A:211:ARG:HD2 | 1:A:213:MET:H | 1 | 0.26 |
| (1,1582) | 1:A:211:ARG:HD3 | 1:A:213:MET:H | 1 | 0.26 |
| (1,1582) | 1:A:211:ARG:HD2 | 1:A:213:MET:H | 9 | 0.26 |
| (1,1582) | 1:A:211:ARG:HD3 | 1:A:213:MET:H | 9 | 0.26 |
| (1,1483) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:252:GLU:HG2 | 6 | 0.26 |
| (1,1483) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:252:GLU:HG3 | 6 | 0.26 |
| (1,1483) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:252:GLU:HG2 | 8 | 0.26 |
| (1,1483) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:252:GLU:HG3 | 8 | 0.26 |
| (1,1483) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:252:GLU:HG2 | 16 | 0.26 |
| (1,1483) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:252:GLU:HG3 | 16 | 0.26 |
| (1,1483) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:252:GLU:HG2 | 17 | 0.26 |
| (1,1483) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:252:GLU:HG3 | 17 | 0.26 |
| (1,1105) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HB2 | 18 | 0.26 |
| (1,1105) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HB3 | 18 | 0.26 |
| (1,1072) | 1:A:228:GLN:HE21 | 1:A:229:ALA:H | 11 | 0.26 |
| (1,788) | 1:A:235:LEU:HB3 | 1:A:236:LYS:H | 8 | 0.25 |
| (1,739) | 1:A:254:ARG:H | 1:A:254:ARG:HB3 | 2 | 0.25 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD11 | 1:A:251:LEU:HB2 | 1 | 0.25 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD12 | 1:A:251:LEU:HB2 | 1 | 0.25 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD13 | 1:A:251:LEU:HB2 | 1 | 0.25 |
| (1,258) | 1:A:232:LYS:HG3 | 1:A:251:LEU:HA | 7 | 0.25 |
| (1,1716) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:234:ARG:HD2 | 15 | 0.25 |
| (1,1716) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:234:ARG:HD3 | 15 | 0.25 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD11 | 14 | 0.25 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD12 | 14 | 0.25 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD13 | 14 | 0.25 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD21 | 14 | 0.25 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD22 | 14 | 0.25 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD23 | 14 | 0.25 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD11 | 14 | 0.25 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD12 | 14 | 0.25 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD13 | 14 | 0.25 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD21 | 14 | 0.25 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD22 | 14 | 0.25 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD23 | 14 | 0.25 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD11 | 14 | 0.25 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD12 | 14 | 0.25 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD13 | 14 | 0.25 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD21 | 14 | 0.25 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD22 | 14 | 0.25 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD23 | 14 | 0.25 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD11 | 14 | 0.25 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD12 | 14 | 0.25 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD13 | 14 | 0.25 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD21 | 14 | 0.25 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD22 | 14 | 0.25 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD23 | 14 | 0.25 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD11 | 14 | 0.25 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD12 | 14 | 0.25 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD13 | 14 | 0.25 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD21 | 14 | 0.25 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD22 | 14 | 0.25 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD23 | 14 | 0.25 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD11 | 14 | 0.25 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD12 | 14 | 0.25 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD13 | 14 | 0.25 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD21 | 14 | 0.25 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD22 | 14 | 0.25 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD23 | 14 | 0.25 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:217:GLY:H | 20 | 0.25 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:217:GLY:H | 20 | 0.25 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:217:GLY:H | 20 | 0.25 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:217:GLY:H | 20 | 0.25 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:217:GLY:H | 20 | 0.25 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:217:GLY:H | 20 | 0.25 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HA | 16 | 0.25 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HA | 16 | 0.25 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HA | 16 | 0.25 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HA | 16 | 0.25 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HA | 16 | 0.25 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HA | 16 | 0.25 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD11 | 2 | 0.25 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD12 | 2 | 0.25 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD13 | 2 | 0.25 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD21 | 2 | 0.25 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD22 | 2 | 0.25 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD23 | 2 | 0.25 |
| (1,1072) | 1:A:228:GLN:HE21 | 1:A:229:ALA:H | 1 | 0.25 |
| (1,1072) | 1:A:228:GLN:HE21 | 1:A:229:ALA:H | 14 | 0.25 |
| (1,1039) | 1:A:232:LYS:HG3 | 1:A:252:GLU:H | 11 | 0.25 |
| (1,1022) | 1:A:228:GLN:HB2 | 1:A:228:GLN:HE22 | 11 | 0.25 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1022) | 1:A:228:GLN:HB2 | 1:A:228:GLN:HE22 | 19 | 0.25 |
| (1,976) | 1:A:241:PRO:HB2 | 1:A:242:GLY:H | 1 | 0.24 |
| (1,739) | 1:A:254:ARG:H | 1:A:254:ARG:HB3 | 5 | 0.24 |
| (1,739) | 1:A:254:ARG:H | 1:A:254:ARG:HB3 | 8 | 0.24 |
| (1,739) | 1:A:254:ARG:H | 1:A:254:ARG:HB3 | 10 | 0.24 |
| (1,729) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:216:GLU:H | 19 | 0.24 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD11 | 1 | 0.24 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD12 | 1 | 0.24 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD13 | 1 | 0.24 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD11 | 1 | 0.24 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD12 | 1 | 0.24 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD13 | 1 | 0.24 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD11 | 1 | 0.24 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD12 | 1 | 0.24 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD13 | 1 | 0.24 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG21 | 5 | 0.24 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG22 | 5 | 0.24 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG23 | 5 | 0.24 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG21 | 10 | 0.24 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG22 | 10 | 0.24 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG23 | 10 | 0.24 |
| (1,471) | 1:A:201:ALA:HB1 | 1:A:202:PRO:HB3 | 17 | 0.24 |
| (1,471) | 1:A:201:ALA:HB2 | 1:A:202:PRO:HB3 | 17 | 0.24 |
| (1,471) | 1:A:201:ALA:HB3 | 1:A:202:PRO:HB3 | 17 | 0.24 |
| (1,471) | 1:A:201:ALA:HB1 | 1:A:202:PRO:HB3 | 18 | 0.24 |
| (1,471) | 1:A:201:ALA:HB2 | 1:A:202:PRO:HB3 | 18 | 0.24 |
| (1,471) | 1:A:201:ALA:HB3 | 1:A:202:PRO:HB3 | 18 | 0.24 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD11 | 1:A:251:LEU:HB2 | 20 | 0.24 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD12 | 1:A:251:LEU:HB2 | 20 | 0.24 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD13 | 1:A:251:LEU:HB2 | 20 | 0.24 |
| (1,335) | 1:A:219:VAL:HB | 1:A:220:GLU:H | 11 | 0.24 |
| (1,335) | 1:A:219:VAL:HB | 1:A:220:GLU:H | 14 | 0.24 |
| (1,1712) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:177:GLN:HG2 | 18 | 0.24 |
| (1,1712) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:177:GLN:HG3 | 18 | 0.24 |
| (1,1711) | 1:A:176:TRP:HE1 | 1:A:197:LEU:HG | 7 | 0.24 |
| (1,1711) | 1:A:176:TRP:HE1 | 1:A:197:LEU:HG | 16 | 0.24 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD11 | 19 | 0.24 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD12 | 19 | 0.24 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD13 | 19 | 0.24 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD21 | 19 | 0.24 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD22 | 19 | 0.24 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD23 | 19 | 0.24 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD11 | 19 | 0.24 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD12 | 19 | 0.24 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD13 | 19 | 0.24 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD21 | 19 | 0.24 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD22 | 19 | 0.24 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD23 | 19 | 0.24 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD11 | 19 | 0.24 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD12 | 19 | 0.24 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD13 | 19 | 0.24 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD21 | 19 | 0.24 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD22 | 19 | 0.24 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD23 | 19 | 0.24 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD11 | 19 | 0.24 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD12 | 19 | 0.24 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD13 | 19 | 0.24 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD21 | 19 | 0.24 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD22 | 19 | 0.24 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD23 | 19 | 0.24 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD11 | 19 | 0.24 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD12 | 19 | 0.24 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD13 | 19 | 0.24 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD21 | 19 | 0.24 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD22 | 19 | 0.24 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD23 | 19 | 0.24 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD11 | 19 | 0.24 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD12 | 19 | 0.24 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD13 | 19 | 0.24 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD21 | 19 | 0.24 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD22 | 19 | 0.24 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD23 | 19 | 0.24 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HB2 | 3 | 0.24 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HB3 | 3 | 0.24 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HB2 | 3 | 0.24 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HB3 | 3 | 0.24 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HB2 | 3 | 0.24 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HB3 | 3 | 0.24 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HB2 | 3 | 0.24 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HB3 | 3 | 0.24 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HB2 | 3 | 0.24 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HB3 | 3 | 0.24 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HB2 | 3 | 0.24 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HB3 | 3 | 0.24 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HA | 14 | 0.24 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HA | 14 | 0.24 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HA | 14 | 0.24 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HA | 14 | 0.24 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HA | 14 | 0.24 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HA | 14 | 0.24 |
| (1,1483) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:252:GLU:HG2 | 5 | 0.24 |
| (1,1483) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:252:GLU:HG3 | 5 | 0.24 |
| (1,1483) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:252:GLU:HG2 | 14 | 0.24 |
| (1,1483) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:252:GLU:HG3 | 14 | 0.24 |
| (1,1424) | 1:A:231:ARG:HD2 | 1:A:232:LYS:H | 12 | 0.24 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG21 | 1:A:231:ARG:HG2 | 14 | 0.24 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG22 | 1:A:231:ARG:HG2 | 14 | 0.24 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG23 | 1:A:231:ARG:HG2 | 14 | 0.24 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG21 | 1:A:231:ARG:HG2 | 16 | 0.24 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG22 | 1:A:231:ARG:HG2 | 16 | 0.24 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG23 | 1:A:231:ARG:HG2 | 16 | 0.24 |
| (1,1271) | 1:A:230:GLY:HA3 | 1:A:252:GLU:HG2 | 11 | 0.24 |
| (1,1271) | 1:A:230:GLY:HA3 | 1:A:252:GLU:HG3 | 11 | 0.24 |
| (1,1098) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:175:GLU:HB2 | 2 | 0.24 |
| (1,1098) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:175:GLU:HB3 | 2 | 0.24 |
| (1,1072) | 1:A:228:GLN:HE21 | 1:A:229:ALA:H | 5 | 0.24 |
| (1,1072) | 1:A:228:GLN:HE21 | 1:A:229:ALA:H | 16 | 0.24 |
| (1,1039) | 1:A:232:LYS:HG3 | 1:A:252:GLU:H | 8 | 0.24 |
| (1,1039) | 1:A:232:LYS:HG3 | 1:A:252:GLU:H | 13 | 0.24 |
| (1,1022) | 1:A:228:GLN:HB2 | 1:A:228:GLN:HE22 | 8 | 0.24 |
| (1,1022) | 1:A:228:GLN:HB2 | 1:A:228:GLN:HE22 | 16 | 0.24 |
| (3,1) | 1:A:228:GLN:OE1 | 1:A:231:ARG:HH11 | 17 | 0.23 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE1 | 1:A:215:LEU:HD21 | 6 | 0.23 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE1 | 1:A:215:LEU:HD22 | 6 | 0.23 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE1 | 1:A:215:LEU:HD23 | 6 | 0.23 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE2 | 1:A:215:LEU:HD21 | 6 | 0.23 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE2 | 1:A:215:LEU:HD22 | 6 | 0.23 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE2 | 1:A:215:LEU:HD23 | 6 | 0.23 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE3 | 1:A:215:LEU:HD21 | 6 | 0.23 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE3 | 1:A:215:LEU:HD22 | 6 | 0.23 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE3 | 1:A:215:LEU:HD23 | 6 | 0.23 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE1 | 1:A:215:LEU:HD21 | 10 | 0.23 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE1 | 1:A:215:LEU:HD22 | 10 | 0.23 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE1 | 1:A:215:LEU:HD23 | 10 | 0.23 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE2 | 1:A:215:LEU:HD21 | 10 | 0.23 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE2 | 1:A:215:LEU:HD22 | 10 | 0.23 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE2 | 1:A:215:LEU:HD23 | 10 | 0.23 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE3 | 1:A:215:LEU:HD21 | 10 | 0.23 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE3 | 1:A:215:LEU:HD22 | 10 | 0.23 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE3 | 1:A:215:LEU:HD23 | 10 | 0.23 |
| (1,788) | 1:A:235:LEU:HB3 | 1:A:236:LYS:H | 10 | 0.23 |
| (1,739) | 1:A:254:ARG:H | 1:A:254:ARG:HB3 | 1 | 0.23 |
| (1,739) | 1:A:254:ARG:H | 1:A:254:ARG:HB3 | 4 | 0.23 |
| (1,739) | 1:A:254:ARG:H | 1:A:254:ARG:HB3 | 9 | 0.23 |
| (1,739) | 1:A:254:ARG:H | 1:A:254:ARG:HB3 | 19 | 0.23 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD11 | 12 | 0.23 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD12 | 12 | 0.23 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD13 | 12 | 0.23 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD11 | 12 | 0.23 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD12 | 12 | 0.23 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD13 | 12 | 0.23 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD11 | 12 | 0.23 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD12 | 12 | 0.23 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD13 | 12 | 0.23 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG21 | 2 | 0.23 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG22 | 2 | 0.23 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG23 | 2 | 0.23 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG21 | 15 | 0.23 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG22 | 15 | 0.23 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG23 | 15 | 0.23 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB1 | 6 | 0.23 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB2 | 6 | 0.23 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB3 | 6 | 0.23 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB1 | 6 | 0.23 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB2 | 6 | 0.23 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB3 | 6 | 0.23 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB1 | 6 | 0.23 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB2 | 6 | 0.23 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB3 | 6 | 0.23 |
| (1,335) | 1:A:219:VAL:HB | 1:A:220:GLU:H | 2 | 0.23 |
| (1,258) | 1:A:232:LYS:HG3 | 1:A:251:LEU:HA | 13 | 0.23 |
| (1,1711) | 1:A:176:TRP:HE1 | 1:A:197:LEU:HG | 3 | 0.23 |
| (1,1711) | 1:A:176:TRP:HE1 | 1:A:197:LEU:HG | 5 | 0.23 |
| (1,1711) | 1:A:176:TRP:HE1 | 1:A:197:LEU:HG | 10 | 0.23 |
| (1,1711) | 1:A:176:TRP:HE1 | 1:A:197:LEU:HG | 15 | 0.23 |
| (1,1708) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:224:PRO:HB2 | 6 | 0.23 |
| (1,1708) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:224:PRO:HB3 | 6 | 0.23 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD11 | 18 | 0.23 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD12 | 18 | 0.23 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD13 | 18 | 0.23 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD21 | 18 | 0.23 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD22 | 18 | 0.23 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD23 | 18 | 0.23 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HB2 | 6 | 0.23 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HB3 | 6 | 0.23 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HB2 | 6 | 0.23 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HB3 | 6 | 0.23 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HB2 | 6 | 0.23 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HB3 | 6 | 0.23 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HB2 | 6 | 0.23 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HB3 | 6 | 0.23 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HB2 | 6 | 0.23 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HB3 | 6 | 0.23 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HB2 | 6 | 0.23 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HB3 | 6 | 0.23 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HB2 | 13 | 0.23 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HB3 | 13 | 0.23 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HB2 | 13 | 0.23 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HB3 | 13 | 0.23 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HB2 | 13 | 0.23 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HB3 | 13 | 0.23 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HB2 | 13 | 0.23 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HB3 | 13 | 0.23 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HB2 | 13 | 0.23 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HB3 | 13 | 0.23 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HB2 | 13 | 0.23 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HB3 | 13 | 0.23 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HA | 9 | 0.23 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HA | 9 | 0.23 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HA | 9 | 0.23 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HA | 9 | 0.23 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HA | 9 | 0.23 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HA | 9 | 0.23 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HA | 17 | 0.23 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HA | 17 | 0.23 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HA | 17 | 0.23 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HA | 17 | 0.23 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HA | 17 | 0.23 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HA | 17 | 0.23 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:H | 2 | 0.23 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:H | 2 | 0.23 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:H | 2 | 0.23 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:H | 2 | 0.23 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:H | 2 | 0.23 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:H | 2 | 0.23 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:H | 5 | 0.23 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:H | 5 | 0.23 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:H | 5 | 0.23 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:H | 5 | 0.23 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:H | 5 | 0.23 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:H | 5 | 0.23 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:H | 10 | 0.23 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:H | 10 | 0.23 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:H | 10 | 0.23 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:H | 10 | 0.23 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:H | 10 | 0.23 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:H | 10 | 0.23 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:H | 16 | 0.23 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:H | 16 | 0.23 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:H | 16 | 0.23 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:H | 16 | 0.23 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:H | 16 | 0.23 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:H | 16 | 0.23 |
| (1,1582) | 1:A:211:ARG:HD2 | 1:A:213:MET:H | 7 | 0.23 |
| (1,1582) | 1:A:211:ARG:HD3 | 1:A:213:MET:H | 7 | 0.23 |
| (1,1582) | 1:A:211:ARG:HD2 | 1:A:213:MET:H | 8 | 0.23 |
| (1,1582) | 1:A:211:ARG:HD3 | 1:A:213:MET:H | 8 | 0.23 |
| (1,1582) | 1:A:211:ARG:HD2 | 1:A:213:MET:H | 19 | 0.23 |
| (1,1582) | 1:A:211:ARG:HD3 | 1:A:213:MET:H | 19 | 0.23 |
| (1,1556) | 1:A:209:LYS:HB2 | 1:A:209:LYS:HD2 | 12 | 0.23 |
| (1,1556) | 1:A:209:LYS:HB2 | 1:A:209:LYS:HD3 | 12 | 0.23 |
| (1,1427) | 1:A:226:ARG:H | 1:A:226:ARG:HD3 | 10 | 0.23 |
| (1,1424) | 1:A:231:ARG:HD2 | 1:A:232:LYS:H | 19 | 0.23 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG21 | 1:A:231:ARG:HG2 | 1 | 0.23 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG22 | 1:A:231:ARG:HG2 | 1 | 0.23 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG23 | 1:A:231:ARG:HG2 | 1 | 0.23 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG21 | 1:A:231:ARG:HG2 | 4 | 0.23 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG22 | 1:A:231:ARG:HG2 | 4 | 0.23 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG23 | 1:A:231:ARG:HG2 | 4 | 0.23 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG21 | 1:A:231:ARG:HG2 | 8 | 0.23 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG22 | 1:A:231:ARG:HG2 | 8 | 0.23 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG23 | 1:A:231:ARG:HG2 | 8 | 0.23 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG21 | 1:A:231:ARG:HG2 | 10 | 0.23 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG22 | 1:A:231:ARG:HG2 | 10 | 0.23 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG23 | 1:A:231:ARG:HG2 | 10 | 0.23 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG21 | 1:A:231:ARG:HG2 | 15 | 0.23 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG22 | 1:A:231:ARG:HG2 | 15 | 0.23 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG23 | 1:A:231:ARG:HG2 | 15 | 0.23 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG21 | 1:A:231:ARG:HG2 | 19 | 0.23 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG22 | 1:A:231:ARG:HG2 | 19 | 0.23 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG23 | 1:A:231:ARG:HG2 | 19 | 0.23 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG11 | 11 | 0.23 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG12 | 11 | 0.23 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG13 | 11 | 0.23 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG21 | 11 | 0.23 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG22 | 11 | 0.23 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG23 | 11 | 0.23 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG11 | 11 | 0.23 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG12 | 11 | 0.23 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG13 | 11 | 0.23 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG21 | 11 | 0.23 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG22 | 11 | 0.23 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG23 | 11 | 0.23 |
| (1,1072) | 1:A:228:GLN:HE21 | 1:A:229:ALA:H | 4 | 0.23 |
| (1,1072) | 1:A:228:GLN:HE21 | 1:A:229:ALA:H | 13 | 0.23 |
| (1,1022) | 1:A:228:GLN:HB2 | 1:A:228:GLN:HE22 | 4 | 0.23 |
| (1,1022) | 1:A:228:GLN:HB2 | 1:A:228:GLN:HE22 | 5 | 0.23 |
| (1,1022) | 1:A:228:GLN:HB2 | 1:A:228:GLN:HE22 | 6 | 0.23 |
| (1,1022) | 1:A:228:GLN:HB2 | 1:A:228:GLN:HE22 | 12 | 0.23 |
| (1,1022) | 1:A:228:GLN:HB2 | 1:A:228:GLN:HE22 | 14 | 0.23 |
| (1,976) | 1:A:241:PRO:HB2 | 1:A:242:GLY:H | 12 | 0.22 |
| (1,976) | 1:A:241:PRO:HB2 | 1:A:242:GLY:H | 18 | 0.22 |
| (1,898) | 1:A:191:GLN:HB3 | 1:A:248:ASP:H | 4 | 0.22 |
| (1,898) | 1:A:191:GLN:HB3 | 1:A:248:ASP:H | 14 | 0.22 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE1 | 1:A:215:LEU:HD21 | 13 | 0.22 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE1 | 1:A:215:LEU:HD22 | 13 | 0.22 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE1 | 1:A:215:LEU:HD23 | 13 | 0.22 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE2 | 1:A:215:LEU:HD21 | 13 | 0.22 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE2 | 1:A:215:LEU:HD22 | 13 | 0.22 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE2 | 1:A:215:LEU:HD23 | 13 | 0.22 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE3 | 1:A:215:LEU:HD21 | 13 | 0.22 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE3 | 1:A:215:LEU:HD22 | 13 | 0.22 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE3 | 1:A:215:LEU:HD23 | 13 | 0.22 |
| (1,788) | 1:A:235:LEU:HB3 | 1:A:236:LYS:H | 6 | 0.22 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,739) | 1:A:254:ARG:H | 1:A:254:ARG:HB3 | 3 | 0.22 |
| (1,739) | 1:A:254:ARG:H | 1:A:254:ARG:HB3 | 11 | 0.22 |
| (1,658) | 1:A:173:ALA:HB1 | 1:A:220:GLU:HB3 | 19 | 0.22 |
| (1,658) | 1:A:173:ALA:HB2 | 1:A:220:GLU:HB3 | 19 | 0.22 |
| (1,658) | 1:A:173:ALA:HB3 | 1:A:220:GLU:HB3 | 19 | 0.22 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD11 | 11 | 0.22 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD12 | 11 | 0.22 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD13 | 11 | 0.22 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD11 | 11 | 0.22 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD12 | 11 | 0.22 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD13 | 11 | 0.22 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD11 | 11 | 0.22 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD12 | 11 | 0.22 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD13 | 11 | 0.22 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG21 | 7 | 0.22 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG22 | 7 | 0.22 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG23 | 7 | 0.22 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG21 | 20 | 0.22 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG22 | 20 | 0.22 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG23 | 20 | 0.22 |
| (1,471) | 1:A:201:ALA:HB1 | 1:A:202:PRO:HB3 | 11 | 0.22 |
| (1,471) | 1:A:201:ALA:HB2 | 1:A:202:PRO:HB3 | 11 | 0.22 |
| (1,471) | 1:A:201:ALA:HB3 | 1:A:202:PRO:HB3 | 11 | 0.22 |
| (1,471) | 1:A:201:ALA:HB1 | 1:A:202:PRO:HB3 | 16 | 0.22 |
| (1,471) | 1:A:201:ALA:HB2 | 1:A:202:PRO:HB3 | 16 | 0.22 |
| (1,471) | 1:A:201:ALA:HB3 | 1:A:202:PRO:HB3 | 16 | 0.22 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD11 | 1:A:251:LEU:HB2 | 4 | 0.22 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD12 | 1:A:251:LEU:HB2 | 4 | 0.22 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD13 | 1:A:251:LEU:HB2 | 4 | 0.22 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD11 | 1:A:251:LEU:HB2 | 11 | 0.22 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD12 | 1:A:251:LEU:HB2 | 11 | 0.22 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD13 | 1:A:251:LEU:HB2 | 11 | 0.22 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD11 | 1:A:251:LEU:HB2 | 14 | 0.22 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD12 | 1:A:251:LEU:HB2 | 14 | 0.22 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD13 | 1:A:251:LEU:HB2 | 14 | 0.22 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD11 | 1:A:251:LEU:HB2 | 16 | 0.22 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD12 | 1:A:251:LEU:HB2 | 16 | 0.22 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD13 | 1:A:251:LEU:HB2 | 16 | 0.22 |
| (1,335) | 1:A:219:VAL:HB | 1:A:220:GLU:H | 1 | 0.22 |
| (1,1716) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:234:ARG:HD2 | 14 | 0.22 |
| (1,1716) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:234:ARG:HD3 | 14 | 0.22 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HB2 | 5 | 0.22 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HB3 | 5 | 0.22 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HB2 | 5 | 0.22 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HB3 | 5 | 0.22 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HB2 | 5 | 0.22 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HB3 | 5 | 0.22 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HB2 | 5 | 0.22 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HB3 | 5 | 0.22 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HB2 | 5 | 0.22 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HB3 | 5 | 0.22 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HB2 | 5 | 0.22 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HB3 | 5 | 0.22 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HB2 | 15 | 0.22 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HB3 | 15 | 0.22 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HB2 | 15 | 0.22 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HB3 | 15 | 0.22 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HB2 | 15 | 0.22 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HB3 | 15 | 0.22 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HB2 | 15 | 0.22 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HB3 | 15 | 0.22 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HB2 | 15 | 0.22 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HB3 | 15 | 0.22 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HB2 | 15 | 0.22 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HB3 | 15 | 0.22 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HB2 | 17 | 0.22 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HB3 | 17 | 0.22 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HB2 | 17 | 0.22 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HB3 | 17 | 0.22 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HB2 | 17 | 0.22 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HB3 | 17 | 0.22 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HB2 | 17 | 0.22 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HB3 | 17 | 0.22 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HB2 | 17 | 0.22 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HB3 | 17 | 0.22 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HB2 | 17 | 0.22 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HB3 | 17 | 0.22 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HA | 13 | 0.22 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HA | 13 | 0.22 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HA | 13 | 0.22 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HA | 13 | 0.22 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HA | 13 | 0.22 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HA | 13 | 0.22 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:H | 13 | 0.22 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:H | 13 | 0.22 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:H | 13 | 0.22 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:H | 13 | 0.22 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:H | 13 | 0.22 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:H | 13 | 0.22 |
| (1,1483) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:252:GLU:HG2 | 12 | 0.22 |
| (1,1483) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:252:GLU:HG3 | 12 | 0.22 |
| (1,1483) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:252:GLU:HG2 | 18 | 0.22 |
| (1,1483) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:252:GLU:HG3 | 18 | 0.22 |
| (1,1483) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:252:GLU:HG2 | 19 | 0.22 |
| (1,1483) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:252:GLU:HG3 | 19 | 0.22 |
| (1,1427) | 1:A:226:ARG:H | 1:A:226:ARG:HD3 | 8 | 0.22 |
| (1,1427) | 1:A:226:ARG:H | 1:A:226:ARG:HD3 | 14 | 0.22 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG21 | 1:A:231:ARG:HG2 | 12 | 0.22 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG22 | 1:A:231:ARG:HG2 | 12 | 0.22 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG23 | 1:A:231:ARG:HG2 | 12 | 0.22 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG21 | 1:A:231:ARG:HG2 | 13 | 0.22 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG22 | 1:A:231:ARG:HG2 | 13 | 0.22 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG23 | 1:A:231:ARG:HG2 | 13 | 0.22 |
| (1,1308) | 1:A:236:LYS:HD2 | 1:A:237:GLY:H | 2 | 0.22 |
| (1,1308) | 1:A:236:LYS:HD3 | 1:A:237:GLY:H | 2 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG11 | 5 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG12 | 5 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG13 | 5 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG21 | 5 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG22 | 5 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG23 | 5 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG11 | 5 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG12 | 5 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG13 | 5 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG21 | 5 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG22 | 5 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG23 | 5 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG11 | 5 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG12 | 5 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG13 | 5 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG21 | 5 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG22 | 5 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG23 | 5 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG11 | 5 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG12 | 5 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG13 | 5 | 0.22 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG21 | 5 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG22 | 5 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG23 | 5 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG11 | 5 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG12 | 5 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG13 | 5 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG21 | 5 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG22 | 5 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG23 | 5 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG11 | 5 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG12 | 5 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG13 | 5 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG21 | 5 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG22 | 5 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG23 | 5 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG11 | 14 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG12 | 14 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG13 | 14 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG21 | 14 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG22 | 14 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG23 | 14 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG11 | 14 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG12 | 14 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG13 | 14 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG21 | 14 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG22 | 14 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG23 | 14 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG11 | 14 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG12 | 14 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG13 | 14 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG21 | 14 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG22 | 14 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG23 | 14 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG11 | 14 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG12 | 14 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG13 | 14 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG21 | 14 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG22 | 14 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG23 | 14 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG11 | 14 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG12 | 14 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG13 | 14 | 0.22 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG21 | 14 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG22 | 14 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG23 | 14 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG11 | 14 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG12 | 14 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG13 | 14 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG21 | 14 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG22 | 14 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG23 | 14 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG11 | 18 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG12 | 18 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG13 | 18 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG21 | 18 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG22 | 18 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG23 | 18 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG11 | 18 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG12 | 18 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG13 | 18 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG21 | 18 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG22 | 18 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG23 | 18 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG11 | 18 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG12 | 18 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG13 | 18 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG21 | 18 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG22 | 18 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG23 | 18 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG11 | 18 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG12 | 18 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG13 | 18 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG21 | 18 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG22 | 18 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG23 | 18 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG11 | 18 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG12 | 18 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG13 | 18 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG21 | 18 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG22 | 18 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG23 | 18 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG11 | 18 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG12 | 18 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG13 | 18 | 0.22 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG21 | 18 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG22 | 18 | 0.22 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG23 | 18 | 0.22 |
| (1,1039) | 1:A:232:LYS:HG3 | 1:A:252:GLU:H | 20 | 0.22 |
| (1,1022) | 1:A:228:GLN:HB2 | 1:A:228:GLN:HE22 | 3 | 0.22 |
| (1,1022) | 1:A:228:GLN:HB2 | 1:A:228:GLN:HE22 | 7 | 0.22 |
| (1,1022) | 1:A:228:GLN:HB2 | 1:A:228:GLN:HE22 | 9 | 0.22 |
| (1,1022) | 1:A:228:GLN:HB2 | 1:A:228:GLN:HE22 | 13 | 0.22 |
| (1,1022) | 1:A:228:GLN:HB2 | 1:A:228:GLN:HE22 | 15 | 0.22 |
| (1,1022) | 1:A:228:GLN:HB2 | 1:A:228:GLN:HE22 | 17 | 0.22 |
| (1,833) | 1:A:174:GLY:HA2 | 1:A:175:GLU:H | 5 | 0.21 |
| (1,739) | 1:A:254:ARG:H | 1:A:254:ARG:HB3 | 6 | 0.21 |
| (1,739) | 1:A:254:ARG:H | 1:A:254:ARG:HB3 | 17 | 0.21 |
| (1,689) | 1:A:215:LEU:HB2 | 1:A:240:PHE:HD1 | 12 | 0.21 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG21 | 1 | 0.21 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG22 | 1 | 0.21 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG23 | 1 | 0.21 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG21 | 3 | 0.21 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG22 | 3 | 0.21 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG23 | 3 | 0.21 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG21 | 16 | 0.21 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG22 | 16 | 0.21 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG23 | 16 | 0.21 |
| (1,577) | 1:A:194:TYR:HD1 | 1:A:195:ALA:HA | 8 | 0.21 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD11 | 1:A:251:LEU:HB2 | 9 | 0.21 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD12 | 1:A:251:LEU:HB2 | 9 | 0.21 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD13 | 1:A:251:LEU:HB2 | 9 | 0.21 |
| (1,335) | 1:A:219:VAL:HB | 1:A:220:GLU:H | 4 | 0.21 |
| (1,335) | 1:A:219:VAL:HB | 1:A:220:GLU:H | 8 | 0.21 |
| (1,335) | 1:A:219:VAL:HB | 1:A:220:GLU:H | 9 | 0.21 |
| (1,335) | 1:A:219:VAL:HB | 1:A:220:GLU:H | 12 | 0.21 |
| (1,335) | 1:A:219:VAL:HB | 1:A:220:GLU:H | 15 | 0.21 |
| (1,258) | 1:A:232:LYS:HG3 | 1:A:251:LEU:HA | 19 | 0.21 |
| (1,1717) | 1:A:172:THR:H | 1:A:219:VAL:HG21 | 12 | 0.21 |
| (1,1717) | 1:A:172:THR:H | 1:A:219:VAL:HG22 | 12 | 0.21 |
| (1,1717) | 1:A:172:THR:H | 1:A:219:VAL:HG23 | 12 | 0.21 |
| (1,1711) | 1:A:176:TRP:HE1 | 1:A:197:LEU:HG | 20 | 0.21 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD11 | 16 | 0.21 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD12 | 16 | 0.21 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD13 | 16 | 0.21 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD21 | 16 | 0.21 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD22 | 16 | 0.21 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD23 | 16 | 0.21 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:238:LYS:H | 19 | 0.21 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:238:LYS:H | 19 | 0.21 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:238:LYS:H | 19 | 0.21 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:238:LYS:H | 19 | 0.21 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:238:LYS:H | 19 | 0.21 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:238:LYS:H | 19 | 0.21 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:236:LYS:H | 7 | 0.21 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:236:LYS:H | 7 | 0.21 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:236:LYS:H | 7 | 0.21 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:236:LYS:H | 7 | 0.21 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:236:LYS:H | 7 | 0.21 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:236:LYS:H | 7 | 0.21 |
| (1,1640) | 1:A:232:LYS:HE2 | 1:A:253:VAL:H | 11 | 0.21 |
| (1,1640) | 1:A:232:LYS:HE3 | 1:A:253:VAL:H | 11 | 0.21 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD11 | 5 | 0.21 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD12 | 5 | 0.21 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD13 | 5 | 0.21 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD21 | 5 | 0.21 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD22 | 5 | 0.21 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD23 | 5 | 0.21 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD11 | 5 | 0.21 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD12 | 5 | 0.21 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD13 | 5 | 0.21 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD21 | 5 | 0.21 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD22 | 5 | 0.21 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD23 | 5 | 0.21 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD11 | 5 | 0.21 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD12 | 5 | 0.21 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD13 | 5 | 0.21 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD21 | 5 | 0.21 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD22 | 5 | 0.21 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD23 | 5 | 0.21 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD11 | 5 | 0.21 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD12 | 5 | 0.21 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD13 | 5 | 0.21 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD21 | 5 | 0.21 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD22 | 5 | 0.21 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD23 | 5 | 0.21 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD11 | 5 | 0.21 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD12 | 5 | 0.21 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD13 | 5 | 0.21 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD21 | 5 | 0.21 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD22 | 5 | 0.21 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD23 | 5 | 0.21 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD11 | 5 | 0.21 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD12 | 5 | 0.21 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD13 | 5 | 0.21 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD21 | 5 | 0.21 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD22 | 5 | 0.21 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD23 | 5 | 0.21 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HA | 12 | 0.21 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HA | 12 | 0.21 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HA | 12 | 0.21 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HA | 12 | 0.21 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HA | 12 | 0.21 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HA | 12 | 0.21 |
| (1,1582) | 1:A:211:ARG:HD2 | 1:A:213:MET:H | 2 | 0.21 |
| (1,1582) | 1:A:211:ARG:HD3 | 1:A:213:MET:H | 2 | 0.21 |
| (1,1582) | 1:A:211:ARG:HD2 | 1:A:213:MET:H | 13 | 0.21 |
| (1,1582) | 1:A:211:ARG:HD3 | 1:A:213:MET:H | 13 | 0.21 |
| (1,1556) | 1:A:209:LYS:HB2 | 1:A:209:LYS:HD2 | 1 | 0.21 |
| (1,1556) | 1:A:209:LYS:HB2 | 1:A:209:LYS:HD3 | 1 | 0.21 |
| (1,1483) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:252:GLU:HG2 | 1 | 0.21 |
| (1,1483) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:252:GLU:HG3 | 1 | 0.21 |
| (1,1424) | 1:A:231:ARG:HD2 | 1:A:232:LYS:H | 16 | 0.21 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG21 | 1:A:231:ARG:HG2 | 2 | 0.21 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG22 | 1:A:231:ARG:HG2 | 2 | 0.21 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG23 | 1:A:231:ARG:HG2 | 2 | 0.21 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG21 | 1:A:231:ARG:HG2 | 7 | 0.21 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG22 | 1:A:231:ARG:HG2 | 7 | 0.21 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG23 | 1:A:231:ARG:HG2 | 7 | 0.21 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG21 | 1:A:231:ARG:HG2 | 18 | 0.21 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG22 | 1:A:231:ARG:HG2 | 18 | 0.21 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG23 | 1:A:231:ARG:HG2 | 18 | 0.21 |
| (1,1310) | 1:A:236:LYS:HE2 | 1:A:237:GLY:H | 13 | 0.21 |
| (1,1310) | 1:A:236:LYS:HE3 | 1:A:237:GLY:H | 13 | 0.21 |
| (1,1308) | 1:A:236:LYS:HD2 | 1:A:237:GLY:H | 8 | 0.21 |
| (1,1308) | 1:A:236:LYS:HD3 | 1:A:237:GLY:H | 8 | 0.21 |
| (1,1308) | 1:A:236:LYS:HD2 | 1:A:237:GLY:H | 11 | 0.21 |
| (1,1308) | 1:A:236:LYS:HD3 | 1:A:237:GLY:H | 11 | 0.21 |
| (1,1308) | 1:A:236:LYS:HD2 | 1:A:237:GLY:H | 17 | 0.21 |
| (1,1308) | 1:A:236:LYS:HD3 | 1:A:237:GLY:H | 17 | 0.21 |
| (1,1308) | 1:A:236:LYS:HD2 | 1:A:237:GLY:H | 18 | 0.21 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1308) | 1:A:236:LYS:HD3 | 1:A:237:GLY:H | 18 | 0.21 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG11 | 9 | 0.21 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG12 | 9 | 0.21 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG13 | 9 | 0.21 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG21 | 9 | 0.21 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG22 | 9 | 0.21 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG23 | 9 | 0.21 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG11 | 9 | 0.21 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG12 | 9 | 0.21 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG13 | 9 | 0.21 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG21 | 9 | 0.21 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG22 | 9 | 0.21 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG23 | 9 | 0.21 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG11 | 9 | 0.21 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG12 | 9 | 0.21 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG13 | 9 | 0.21 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG21 | 9 | 0.21 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG22 | 9 | 0.21 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG23 | 9 | 0.21 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG11 | 9 | 0.21 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG12 | 9 | 0.21 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG13 | 9 | 0.21 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG21 | 9 | 0.21 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG22 | 9 | 0.21 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG23 | 9 | 0.21 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG11 | 9 | 0.21 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG12 | 9 | 0.21 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG13 | 9 | 0.21 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG21 | 9 | 0.21 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG22 | 9 | 0.21 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG23 | 9 | 0.21 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG11 | 9 | 0.21 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG12 | 9 | 0.21 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG13 | 9 | 0.21 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG21 | 9 | 0.21 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG22 | 9 | 0.21 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG23 | 9 | 0.21 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG11 | 12 | 0.21 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG12 | 12 | 0.21 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG13 | 12 | 0.21 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG21 | 12 | 0.21 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG22 | 12 | 0.21 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG23 | 12 | 0.21 |
| (1,1072) | 1:A:228:GLN:HE21 | 1:A:229:ALA:H | 2 | 0.21 |
| (1,1072) | 1:A:228:GLN:HE21 | 1:A:229:ALA:H | 6 | 0.21 |
| (1,1072) | 1:A:228:GLN:HE21 | 1:A:229:ALA:H | 8 | 0.21 |
| (1,1022) | 1:A:228:GLN:HB2 | 1:A:228:GLN:HE22 | 1 | 0.21 |
| (1,1022) | 1:A:228:GLN:HB2 | 1:A:228:GLN:HE22 | 18 | 0.21 |
| (1,1022) | 1:A:228:GLN:HB2 | 1:A:228:GLN:HE22 | 20 | 0.21 |
| (3,1) | 1:A:228:GLN:OE1 | 1:A:231:ARG:HH11 | 3 | 0.2 |
| (1,889) | 1:A:211:ARG:HA | 1:A:219:VAL:H | 3 | 0.2 |
| (1,833) | 1:A:174:GLY:HA2 | 1:A:175:GLU:H | 2 | 0.2 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE1 | 1:A:215:LEU:HD21 | 3 | 0.2 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE1 | 1:A:215:LEU:HD22 | 3 | 0.2 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE1 | 1:A:215:LEU:HD23 | 3 | 0.2 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE2 | 1:A:215:LEU:HD21 | 3 | 0.2 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE2 | 1:A:215:LEU:HD22 | 3 | 0.2 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE2 | 1:A:215:LEU:HD23 | 3 | 0.2 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE3 | 1:A:215:LEU:HD21 | 3 | 0.2 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE3 | 1:A:215:LEU:HD22 | 3 | 0.2 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE3 | 1:A:215:LEU:HD23 | 3 | 0.2 |
| (1,788) | 1:A:235:LEU:HB3 | 1:A:236:LYS:H | 15 | 0.2 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD11 | 6 | 0.2 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD12 | 6 | 0.2 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD13 | 6 | 0.2 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD11 | 6 | 0.2 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD12 | 6 | 0.2 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD13 | 6 | 0.2 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD11 | 6 | 0.2 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD12 | 6 | 0.2 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD13 | 6 | 0.2 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG21 | 6 | 0.2 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG22 | 6 | 0.2 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG23 | 6 | 0.2 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG21 | 8 | 0.2 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG22 | 8 | 0.2 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG23 | 8 | 0.2 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG21 | 9 | 0.2 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG22 | 9 | 0.2 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG23 | 9 | 0.2 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD11 | 1:A:251:LEU:HB2 | 2 | 0.2 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD12 | 1:A:251:LEU:HB2 | 2 | 0.2 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD13 | 1:A:251:LEU:HB2 | 2 | 0.2 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD11 | 1:A:251:LEU:HB2 | 17 | 0.2 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD12 | 1:A:251:LEU:HB2 | 17 | 0.2 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD13 | 1:A:251:LEU:HB2 | 17 | 0.2 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB1 | 11 | 0.2 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB2 | 11 | 0.2 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB3 | 11 | 0.2 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB1 | 11 | 0.2 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB2 | 11 | 0.2 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB3 | 11 | 0.2 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB1 | 11 | 0.2 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB2 | 11 | 0.2 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB3 | 11 | 0.2 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB1 | 14 | 0.2 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB2 | 14 | 0.2 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB3 | 14 | 0.2 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB1 | 14 | 0.2 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB2 | 14 | 0.2 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB3 | 14 | 0.2 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB1 | 14 | 0.2 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB2 | 14 | 0.2 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB3 | 14 | 0.2 |
| (1,335) | 1:A:219:VAL:HB | 1:A:220:GLU:H | 3 | 0.2 |
| (1,335) | 1:A:219:VAL:HB | 1:A:220:GLU:H | 5 | 0.2 |
| (1,335) | 1:A:219:VAL:HB | 1:A:220:GLU:H | 16 | 0.2 |
| (1,258) | 1:A:232:LYS:HG3 | 1:A:251:LEU:HA | 8 | 0.2 |
| (1,258) | 1:A:232:LYS:HG3 | 1:A:251:LEU:HA | 9 | 0.2 |
| (1,1712) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:177:GLN:HG2 | 15 | 0.2 |
| (1,1712) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:177:GLN:HG3 | 15 | 0.2 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:236:LYS:H | 18 | 0.2 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:236:LYS:H | 18 | 0.2 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:236:LYS:H | 18 | 0.2 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:236:LYS:H | 18 | 0.2 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:236:LYS:H | 18 | 0.2 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:236:LYS:H | 18 | 0.2 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:217:GLY:H | 8 | 0.2 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:217:GLY:H | 8 | 0.2 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:217:GLY:H | 8 | 0.2 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:217:GLY:H | 8 | 0.2 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:217:GLY:H | 8 | 0.2 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:217:GLY:H | 8 | 0.2 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:217:GLY:H | 15 | 0.2 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:217:GLY:H | 15 | 0.2 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:217:GLY:H | 15 | 0.2 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:217:GLY:H | 15 | 0.2 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:217:GLY:H | 15 | 0.2 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:217:GLY:H | 15 | 0.2 |
| (1,1582) | 1:A:211:ARG:HD2 | 1:A:213:MET:H | 11 | 0.2 |
| (1,1582) | 1:A:211:ARG:HD3 | 1:A:213:MET:H | 11 | 0.2 |
| (1,1556) | 1:A:209:LYS:HB2 | 1:A:209:LYS:HD2 | 16 | 0.2 |
| (1,1556) | 1:A:209:LYS:HB2 | 1:A:209:LYS:HD3 | 16 | 0.2 |
| (1,1556) | 1:A:209:LYS:HB2 | 1:A:209:LYS:HD2 | 17 | 0.2 |
| (1,1556) | 1:A:209:LYS:HB2 | 1:A:209:LYS:HD3 | 17 | 0.2 |
| (1,1556) | 1:A:209:LYS:HB2 | 1:A:209:LYS:HD2 | 20 | 0.2 |
| (1,1556) | 1:A:209:LYS:HB2 | 1:A:209:LYS:HD3 | 20 | 0.2 |
| (1,1427) | 1:A:226:ARG:H | 1:A:226:ARG:HD3 | 12 | 0.2 |
| (1,1424) | 1:A:231:ARG:HD2 | 1:A:232:LYS:H | 14 | 0.2 |
| (1,1397) | 1:A:211:ARG:HG2 | 1:A:220:GLU:HG3 | 11 | 0.2 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG21 | 1:A:231:ARG:HG2 | 3 | 0.2 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG22 | 1:A:231:ARG:HG2 | 3 | 0.2 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG23 | 1:A:231:ARG:HG2 | 3 | 0.2 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG21 | 1:A:231:ARG:HG2 | 6 | 0.2 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG22 | 1:A:231:ARG:HG2 | 6 | 0.2 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG23 | 1:A:231:ARG:HG2 | 6 | 0.2 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG21 | 1:A:231:ARG:HG2 | 9 | 0.2 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG22 | 1:A:231:ARG:HG2 | 9 | 0.2 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG23 | 1:A:231:ARG:HG2 | 9 | 0.2 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG21 | 1:A:231:ARG:HG2 | 11 | 0.2 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG22 | 1:A:231:ARG:HG2 | 11 | 0.2 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG23 | 1:A:231:ARG:HG2 | 11 | 0.2 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG21 | 1:A:231:ARG:HG2 | 17 | 0.2 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG22 | 1:A:231:ARG:HG2 | 17 | 0.2 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG23 | 1:A:231:ARG:HG2 | 17 | 0.2 |
| (1,1308) | 1:A:236:LYS:HD2 | 1:A:237:GLY:H | 9 | 0.2 |
| (1,1308) | 1:A:236:LYS:HD3 | 1:A:237:GLY:H | 9 | 0.2 |
| (1,1308) | 1:A:236:LYS:HD2 | 1:A:237:GLY:H | 16 | 0.2 |
| (1,1308) | 1:A:236:LYS:HD3 | 1:A:237:GLY:H | 16 | 0.2 |
| (1,1201) | 1:A:209:LYS:HE2 | 1:A:222:ALA:HA | 1 | 0.2 |
| (1,1201) | 1:A:209:LYS:HE3 | 1:A:222:ALA:HA | 1 | 0.2 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG11 | 10 | 0.2 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG12 | 10 | 0.2 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG13 | 10 | 0.2 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG21 | 10 | 0.2 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG22 | 10 | 0.2 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG23 | 10 | 0.2 |
| (1,1070) | 1:A:227:THR:HA | 1:A:228:GLN:HE21 | 6 | 0.2 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1039) | 1:A:232:LYS:HG3 | 1:A:252:GLU:H | 2 | 0.2 |
| (1,1039) | 1:A:232:LYS:HG3 | 1:A:252:GLU:H | 4 | 0.2 |
| (1,1039) | 1:A:232:LYS:HG3 | 1:A:252:GLU:H | 16 | 0.2 |
| (1,1022) | 1:A:228:GLN:HB2 | 1:A:228:GLN:HE22 | 10 | 0.2 |
| (3,1) | 1:A:228:GLN:OE1 | 1:A:231:ARG:HH11 | 19 | 0.19 |
| (2,24) | 1:A:251:LEU:H | 1:A:233:LEU:O | 5 | 0.19 |
| (2,24) | 1:A:251:LEU:H | 1:A:233:LEU:O | 7 | 0.19 |
| (1,871) | 1:A:248:ASP:HB2 | 1:A:249:LEU:H | 2 | 0.19 |
| (1,833) | 1:A:174:GLY:HA2 | 1:A:175:GLU:H | 12 | 0.19 |
| (1,833) | 1:A:174:GLY:HA2 | 1:A:175:GLU:H | 14 | 0.19 |
| (1,833) | 1:A:174:GLY:HA2 | 1:A:175:GLU:H | 18 | 0.19 |
| (1,788) | 1:A:235:LEU:HB3 | 1:A:236:LYS:H | 11 | 0.19 |
| (1,788) | 1:A:235:LEU:HB3 | 1:A:236:LYS:H | 16 | 0.19 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD11 | 1:A:210:VAL:HG21 | 18 | 0.19 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD11 | 1:A:210:VAL:HG22 | 18 | 0.19 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD11 | 1:A:210:VAL:HG23 | 18 | 0.19 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD12 | 1:A:210:VAL:HG21 | 18 | 0.19 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD12 | 1:A:210:VAL:HG22 | 18 | 0.19 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD12 | 1:A:210:VAL:HG23 | 18 | 0.19 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD13 | 1:A:210:VAL:HG21 | 18 | 0.19 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD13 | 1:A:210:VAL:HG22 | 18 | 0.19 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD13 | 1:A:210:VAL:HG23 | 18 | 0.19 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD11 | 8 | 0.19 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD12 | 8 | 0.19 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD13 | 8 | 0.19 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD11 | 8 | 0.19 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD12 | 8 | 0.19 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD13 | 8 | 0.19 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD11 | 8 | 0.19 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD12 | 8 | 0.19 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD13 | 8 | 0.19 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG21 | 18 | 0.19 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG22 | 18 | 0.19 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG23 | 18 | 0.19 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD11 | 1:A:251:LEU:HB2 | 5 | 0.19 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD12 | 1:A:251:LEU:HB2 | 5 | 0.19 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD13 | 1:A:251:LEU:HB2 | 5 | 0.19 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB1 | 8 | 0.19 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB2 | 8 | 0.19 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB3 | 8 | 0.19 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB1 | 8 | 0.19 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB2 | 8 | 0.19 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB3 | 8 | 0.19 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB1 | 8 | 0.19 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB2 | 8 | 0.19 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB3 | 8 | 0.19 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB1 | 16 | 0.19 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB2 | 16 | 0.19 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB3 | 16 | 0.19 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB1 | 16 | 0.19 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB2 | 16 | 0.19 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB3 | 16 | 0.19 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB1 | 16 | 0.19 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB2 | 16 | 0.19 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB3 | 16 | 0.19 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB1 | 18 | 0.19 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB2 | 18 | 0.19 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB3 | 18 | 0.19 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB1 | 18 | 0.19 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB2 | 18 | 0.19 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB3 | 18 | 0.19 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB1 | 18 | 0.19 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB2 | 18 | 0.19 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB3 | 18 | 0.19 |
| (1,335) | 1:A:219:VAL:HB | 1:A:220:GLU:H | 7 | 0.19 |
| (1,335) | 1:A:219:VAL:HB | 1:A:220:GLU:H | 20 | 0.19 |
| (1,258) | 1:A:232:LYS:HG3 | 1:A:251:LEU:HA | 15 | 0.19 |
| (1,258) | 1:A:232:LYS:HG3 | 1:A:251:LEU:HA | 17 | 0.19 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE21 | 1:A:253:VAL:HG11 | 3 | 0.19 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE21 | 1:A:253:VAL:HG12 | 3 | 0.19 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE21 | 1:A:253:VAL:HG13 | 3 | 0.19 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE21 | 1:A:253:VAL:HG21 | 3 | 0.19 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE21 | 1:A:253:VAL:HG22 | 3 | 0.19 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE21 | 1:A:253:VAL:HG23 | 3 | 0.19 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE22 | 1:A:253:VAL:HG11 | 3 | 0.19 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE22 | 1:A:253:VAL:HG12 | 3 | 0.19 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE22 | 1:A:253:VAL:HG13 | 3 | 0.19 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE22 | 1:A:253:VAL:HG21 | 3 | 0.19 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE22 | 1:A:253:VAL:HG22 | 3 | 0.19 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE22 | 1:A:253:VAL:HG23 | 3 | 0.19 |
| (1,1685) | 1:A:248:ASP:HB2 | 1:A:250:TYR:HE2 | 13 | 0.19 |
| (1,1685) | 1:A:248:ASP:HB3 | 1:A:250:TYR:HE2 | 13 | 0.19 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:236:LYS:HA | 15 | 0.19 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:236:LYS:HA | 15 | 0.19 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:236:LYS:HA | 15 | 0.19 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:236:LYS:HA | 15 | 0.19 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:236:LYS:HA | 15 | 0.19 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:236:LYS:HA | 15 | 0.19 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:236:LYS:H | 3 | 0.19 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:236:LYS:H | 3 | 0.19 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:236:LYS:H | 3 | 0.19 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:236:LYS:H | 3 | 0.19 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:236:LYS:H | 3 | 0.19 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:236:LYS:H | 3 | 0.19 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:236:LYS:H | 6 | 0.19 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:236:LYS:H | 6 | 0.19 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:236:LYS:H | 6 | 0.19 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:236:LYS:H | 6 | 0.19 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:236:LYS:H | 6 | 0.19 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:236:LYS:H | 6 | 0.19 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD11 | 9 | 0.19 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD12 | 9 | 0.19 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD13 | 9 | 0.19 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD21 | 9 | 0.19 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD22 | 9 | 0.19 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD23 | 9 | 0.19 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD11 | 9 | 0.19 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD12 | 9 | 0.19 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD13 | 9 | 0.19 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD21 | 9 | 0.19 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD22 | 9 | 0.19 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD23 | 9 | 0.19 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD11 | 9 | 0.19 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD12 | 9 | 0.19 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD13 | 9 | 0.19 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD21 | 9 | 0.19 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD22 | 9 | 0.19 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD23 | 9 | 0.19 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD11 | 9 | 0.19 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD12 | 9 | 0.19 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD13 | 9 | 0.19 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD21 | 9 | 0.19 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD22 | 9 | 0.19 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD23 | 9 | 0.19 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD11 | 9 | 0.19 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD12 | 9 | 0.19 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD13 | 9 | 0.19 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD21 | 9 | 0.19 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD22 | 9 | 0.19 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD23 | 9 | 0.19 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD11 | 9 | 0.19 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD12 | 9 | 0.19 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD13 | 9 | 0.19 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD21 | 9 | 0.19 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD22 | 9 | 0.19 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD23 | 9 | 0.19 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD11 | 20 | 0.19 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD12 | 20 | 0.19 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD13 | 20 | 0.19 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD21 | 20 | 0.19 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD22 | 20 | 0.19 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD23 | 20 | 0.19 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD11 | 20 | 0.19 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD12 | 20 | 0.19 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD13 | 20 | 0.19 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD21 | 20 | 0.19 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD22 | 20 | 0.19 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD23 | 20 | 0.19 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD11 | 20 | 0.19 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD12 | 20 | 0.19 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD13 | 20 | 0.19 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD21 | 20 | 0.19 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD22 | 20 | 0.19 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD23 | 20 | 0.19 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD11 | 20 | 0.19 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD12 | 20 | 0.19 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD13 | 20 | 0.19 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD21 | 20 | 0.19 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD22 | 20 | 0.19 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD23 | 20 | 0.19 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD11 | 20 | 0.19 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD12 | 20 | 0.19 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD13 | 20 | 0.19 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD21 | 20 | 0.19 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD22 | 20 | 0.19 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD23 | 20 | 0.19 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD11 | 20 | 0.19 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD12 | 20 | 0.19 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD13 | 20 | 0.19 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD21 | 20 | 0.19 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD22 | 20 | 0.19 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD23 | 20 | 0.19 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:217:GLY:H | 1 | 0.19 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:217:GLY:H | 1 | 0.19 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:217:GLY:H | 1 | 0.19 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:217:GLY:H | 1 | 0.19 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:217:GLY:H | 1 | 0.19 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:217:GLY:H | 1 | 0.19 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:217:GLY:H | 18 | 0.19 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:217:GLY:H | 18 | 0.19 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:217:GLY:H | 18 | 0.19 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:217:GLY:H | 18 | 0.19 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:217:GLY:H | 18 | 0.19 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:217:GLY:H | 18 | 0.19 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HB2 | 4 | 0.19 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HB3 | 4 | 0.19 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HB2 | 4 | 0.19 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HB3 | 4 | 0.19 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HB2 | 4 | 0.19 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HB3 | 4 | 0.19 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HB2 | 4 | 0.19 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HB3 | 4 | 0.19 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HB2 | 4 | 0.19 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HB3 | 4 | 0.19 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HB2 | 4 | 0.19 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HB3 | 4 | 0.19 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:H | 1 | 0.19 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:H | 1 | 0.19 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:H | 1 | 0.19 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:H | 1 | 0.19 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:H | 1 | 0.19 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:H | 1 | 0.19 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:H | 4 | 0.19 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:H | 4 | 0.19 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:H | 4 | 0.19 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:H | 4 | 0.19 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:H | 4 | 0.19 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:H | 4 | 0.19 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:H | 6 | 0.19 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:H | 6 | 0.19 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:H | 6 | 0.19 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:H | 6 | 0.19 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:H | 6 | 0.19 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:H | 6 | 0.19 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:H | 12 | 0.19 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:H | 12 | 0.19 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:H | 12 | 0.19 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:H | 12 | 0.19 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:H | 12 | 0.19 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:H | 12 | 0.19 |
| (1,1483) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:252:GLU:HG2 | 15 | 0.19 |
| (1,1483) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:252:GLU:HG3 | 15 | 0.19 |
| (1,1427) | 1:A:226:ARG:H | 1:A:226:ARG:HD3 | 4 | 0.19 |
| (1,1427) | 1:A:226:ARG:H | 1:A:226:ARG:HD3 | 13 | 0.19 |
| (1,1424) | 1:A:231:ARG:HD2 | 1:A:232:LYS:H | 6 | 0.19 |
| (1,1424) | 1:A:231:ARG:HD2 | 1:A:232:LYS:H | 11 | 0.19 |
| (1,1424) | 1:A:231:ARG:HD2 | 1:A:232:LYS:H | 15 | 0.19 |
| (1,1383) | 1:A:253:VAL:HG11 | 1:A:254:ARG:HB3 | 18 | 0.19 |
| (1,1383) | 1:A:253:VAL:HG12 | 1:A:254:ARG:HB3 | 18 | 0.19 |
| (1,1383) | 1:A:253:VAL:HG13 | 1:A:254:ARG:HB3 | 18 | 0.19 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG21 | 1:A:231:ARG:HG2 | 5 | 0.19 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG22 | 1:A:231:ARG:HG2 | 5 | 0.19 |
| (1,1344) | 1:A:227:THR:HG23 | 1:A:231:ARG:HG2 | 5 | 0.19 |
| (1,1308) | 1:A:236:LYS:HD2 | 1:A:237:GLY:H | 6 | 0.19 |
| (1,1308) | 1:A:236:LYS:HD3 | 1:A:237:GLY:H | 6 | 0.19 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG11 | 4 | 0.19 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG12 | 4 | 0.19 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG13 | 4 | 0.19 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG21 | 4 | 0.19 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG22 | 4 | 0.19 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG23 | 4 | 0.19 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG11 | 4 | 0.19 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG12 | 4 | 0.19 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG13 | 4 | 0.19 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG21 | 4 | 0.19 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG22 | 4 | 0.19 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG23 | 4 | 0.19 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG11 | 1 | 0.19 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG12 | 1 | 0.19 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG13 | 1 | 0.19 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG21 | 1 | 0.19 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG22 | 1 | 0.19 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG23 | 1 | 0.19 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG11 | 1 | 0.19 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG12 | 1 | 0.19 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG13 | 1 | 0.19 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG21 | 1 | 0.19 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG22 | 1 | 0.19 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG23 | 1 | 0.19 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG11 | 1 | 0.19 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG12 | 1 | 0.19 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG13 | 1 | 0.19 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG21 | 1 | 0.19 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG22 | 1 | 0.19 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG23 | 1 | 0.19 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG11 | 1 | 0.19 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG12 | 1 | 0.19 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG13 | 1 | 0.19 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG21 | 1 | 0.19 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG22 | 1 | 0.19 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG23 | 1 | 0.19 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG11 | 1 | 0.19 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG12 | 1 | 0.19 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG13 | 1 | 0.19 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG21 | 1 | 0.19 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG22 | 1 | 0.19 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG23 | 1 | 0.19 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG11 | 1 | 0.19 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG12 | 1 | 0.19 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG13 | 1 | 0.19 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG21 | 1 | 0.19 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG22 | 1 | 0.19 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG23 | 1 | 0.19 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG11 | 7 | 0.19 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG12 | 7 | 0.19 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG13 | 7 | 0.19 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG21 | 7 | 0.19 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG22 | 7 | 0.19 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG23 | 7 | 0.19 |
| (1,1098) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:175:GLU:HB2 | 18 | 0.19 |
| (1,1098) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:175:GLU:HB3 | 18 | 0.19 |
| (1,1079) | 1:A:169:GLU:HG2 | 1:A:170:THR:H | 10 | 0.19 |
| (1,1079) | 1:A:169:GLU:HG3 | 1:A:170:THR:H | 10 | 0.19 |
| (1,1039) | 1:A:232:LYS:HG3 | 1:A:252:GLU:H | 10 | 0.19 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1039) | 1:A:232:LYS:HG3 | 1:A:252:GLU:H | 19 | 0.19 |
| (1,1022) | 1:A:228:GLN:HB2 | 1:A:228:GLN:HE22 | 2 | 0.19 |
| (1,1021) | 1:A:228:GLN:HB3 | 1:A:228:GLN:HE22 | 5 | 0.19 |
| (1,1021) | 1:A:228:GLN:HB3 | 1:A:228:GLN:HE22 | 11 | 0.19 |
| (1,1021) | 1:A:228:GLN:HB3 | 1:A:228:GLN:HE22 | 19 | 0.19 |
| (3,1) | 1:A:228:GLN:OE1 | 1:A:231:ARG:HH11 | 15 | 0.18 |
| (1,833) | 1:A:174:GLY:HA2 | 1:A:175:GLU:H | 7 | 0.18 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE1 | 1:A:215:LEU:HD21 | 4 | 0.18 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE1 | 1:A:215:LEU:HD22 | 4 | 0.18 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE1 | 1:A:215:LEU:HD23 | 4 | 0.18 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE2 | 1:A:215:LEU:HD21 | 4 | 0.18 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE2 | 1:A:215:LEU:HD22 | 4 | 0.18 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE2 | 1:A:215:LEU:HD23 | 4 | 0.18 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE3 | 1:A:215:LEU:HD21 | 4 | 0.18 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE3 | 1:A:215:LEU:HD22 | 4 | 0.18 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE3 | 1:A:215:LEU:HD23 | 4 | 0.18 |
| (1,788) | 1:A:235:LEU:HB3 | 1:A:236:LYS:H | 17 | 0.18 |
| (1,788) | 1:A:235:LEU:HB3 | 1:A:236:LYS:H | 18 | 0.18 |
| (1,739) | 1:A:254:ARG:H | 1:A:254:ARG:HB3 | 16 | 0.18 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD11 | 15 | 0.18 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD12 | 15 | 0.18 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD13 | 15 | 0.18 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD11 | 15 | 0.18 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD12 | 15 | 0.18 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD13 | 15 | 0.18 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD11 | 15 | 0.18 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD12 | 15 | 0.18 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD13 | 15 | 0.18 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD11 | 19 | 0.18 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD12 | 19 | 0.18 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD13 | 19 | 0.18 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD11 | 19 | 0.18 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD12 | 19 | 0.18 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD13 | 19 | 0.18 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD11 | 19 | 0.18 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD12 | 19 | 0.18 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD13 | 19 | 0.18 |
| (1,625) | 1:A:236:LYS:HG2 | 1:A:248:ASP:HB3 | 6 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG21 | 12 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG22 | 12 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:223:VAL:HG23 | 12 | 0.18 |
| (1,577) | 1:A:194:TYR:HD1 | 1:A:195:ALA:HA | 14 | 0.18 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD11 | 1:A:251:LEU:HB2 | 18 | 0.18 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD12 | 1:A:251:LEU:HB2 | 18 | 0.18 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD13 | 1:A:251:LEU:HB2 | 18 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB1 | 1 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB2 | 1 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB3 | 1 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB1 | 1 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB2 | 1 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB3 | 1 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB1 | 1 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB2 | 1 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB3 | 1 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB1 | 4 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB2 | 4 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB3 | 4 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB1 | 4 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB2 | 4 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB3 | 4 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB1 | 4 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB2 | 4 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB3 | 4 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB1 | 7 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB2 | 7 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB3 | 7 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB1 | 7 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB2 | 7 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB3 | 7 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB1 | 7 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB2 | 7 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB3 | 7 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB1 | 9 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB2 | 9 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB3 | 9 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB1 | 9 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB2 | 9 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB3 | 9 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB1 | 9 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB2 | 9 | 0.18 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB3 | 9 | 0.18 |
| (1,335) | 1:A:219:VAL:HB | 1:A:220:GLU:H | 6 | 0.18 |
| (1,335) | 1:A:219:VAL:HB | 1:A:220:GLU:H | 10 | 0.18 |
| (1,335) | 1:A:219:VAL:HB | 1:A:220:GLU:H | 18 | 0.18 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,258) | 1:A:232:LYS:HG3 | 1:A:251:LEU:HA | 1 | 0.18 |
| (1,258) | 1:A:232:LYS:HG3 | 1:A:251:LEU:HA | 10 | 0.18 |
| (1,258) | 1:A:232:LYS:HG3 | 1:A:251:LEU:HA | 16 | 0.18 |
| (1,1716) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:234:ARG:HD2 | 3 | 0.18 |
| (1,1716) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:234:ARG:HD3 | 3 | 0.18 |
| (1,1716) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:234:ARG:HD2 | 16 | 0.18 |
| (1,1716) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:234:ARG:HD3 | 16 | 0.18 |
| (1,1711) | 1:A:176:TRP:HE1 | 1:A:197:LEU:HG | 13 | 0.18 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD11 | 8 | 0.18 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD12 | 8 | 0.18 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD13 | 8 | 0.18 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD21 | 8 | 0.18 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD22 | 8 | 0.18 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD23 | 8 | 0.18 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD11 | 15 | 0.18 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD12 | 15 | 0.18 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD13 | 15 | 0.18 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD21 | 15 | 0.18 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD22 | 15 | 0.18 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD23 | 15 | 0.18 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:236:LYS:HA | 2 | 0.18 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:236:LYS:HA | 2 | 0.18 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:236:LYS:HA | 2 | 0.18 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:236:LYS:HA | 2 | 0.18 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:236:LYS:HA | 2 | 0.18 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:236:LYS:HA | 2 | 0.18 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:236:LYS:HA | 14 | 0.18 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:236:LYS:HA | 14 | 0.18 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:236:LYS:HA | 14 | 0.18 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:236:LYS:HA | 14 | 0.18 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:236:LYS:HA | 14 | 0.18 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:236:LYS:HA | 14 | 0.18 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:236:LYS:H | 13 | 0.18 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:236:LYS:H | 13 | 0.18 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:236:LYS:H | 13 | 0.18 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:236:LYS:H | 13 | 0.18 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:236:LYS:H | 13 | 0.18 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:236:LYS:H | 13 | 0.18 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:236:LYS:H | 17 | 0.18 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:236:LYS:H | 17 | 0.18 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:236:LYS:H | 17 | 0.18 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:236:LYS:H | 17 | 0.18 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:236:LYS:H | 17 | 0.18 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:236:LYS:H | 17 | 0.18 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:217:GLY:H | 4 | 0.18 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:217:GLY:H | 4 | 0.18 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:217:GLY:H | 4 | 0.18 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:217:GLY:H | 4 | 0.18 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:217:GLY:H | 4 | 0.18 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:217:GLY:H | 4 | 0.18 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HA | 5 | 0.18 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HA | 5 | 0.18 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HA | 5 | 0.18 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HA | 5 | 0.18 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HA | 5 | 0.18 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HA | 5 | 0.18 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HA | 10 | 0.18 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HA | 10 | 0.18 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HA | 10 | 0.18 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HA | 10 | 0.18 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HA | 10 | 0.18 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HA | 10 | 0.18 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:H | 7 | 0.18 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:H | 7 | 0.18 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:H | 7 | 0.18 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:H | 7 | 0.18 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:H | 7 | 0.18 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:H | 7 | 0.18 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:H | 9 | 0.18 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:H | 9 | 0.18 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:H | 9 | 0.18 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:H | 9 | 0.18 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:H | 9 | 0.18 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:H | 9 | 0.18 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD11 | 3 | 0.18 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD12 | 3 | 0.18 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD13 | 3 | 0.18 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD21 | 3 | 0.18 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD22 | 3 | 0.18 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD23 | 3 | 0.18 |
| (1,1582) | 1:A:211:ARG:HD2 | 1:A:213:MET:H | 3 | 0.18 |
| (1,1582) | 1:A:211:ARG:HD3 | 1:A:213:MET:H | 3 | 0.18 |
| (1,1582) | 1:A:211:ARG:HD2 | 1:A:213:MET:H | 16 | 0.18 |
| (1,1582) | 1:A:211:ARG:HD3 | 1:A:213:MET:H | 16 | 0.18 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1556) | 1:A:209:LYS:HB2 | 1:A:209:LYS:HD2 | 18 | 0.18 |
| (1,1556) | 1:A:209:LYS:HB2 | 1:A:209:LYS:HD3 | 18 | 0.18 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:254:ARG:HB3 | 8 | 0.18 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:254:ARG:HB3 | 8 | 0.18 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:254:ARG:HB3 | 8 | 0.18 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:254:ARG:HB3 | 8 | 0.18 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:254:ARG:HB3 | 8 | 0.18 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:254:ARG:HB3 | 8 | 0.18 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:254:ARG:HB3 | 10 | 0.18 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:254:ARG:HB3 | 10 | 0.18 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:254:ARG:HB3 | 10 | 0.18 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:254:ARG:HB3 | 10 | 0.18 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:254:ARG:HB3 | 10 | 0.18 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:254:ARG:HB3 | 10 | 0.18 |
| (1,1427) | 1:A:226:ARG:H | 1:A:226:ARG:HD3 | 3 | 0.18 |
| (1,1383) | 1:A:253:VAL:HG11 | 1:A:254:ARG:HB3 | 6 | 0.18 |
| (1,1383) | 1:A:253:VAL:HG12 | 1:A:254:ARG:HB3 | 6 | 0.18 |
| (1,1383) | 1:A:253:VAL:HG13 | 1:A:254:ARG:HB3 | 6 | 0.18 |
| (1,1373) | 1:A:211:ARG:HB2 | 1:A:220:GLU:HG2 | 15 | 0.18 |
| (1,1310) | 1:A:236:LYS:HE2 | 1:A:237:GLY:H | 1 | 0.18 |
| (1,1310) | 1:A:236:LYS:HE3 | 1:A:237:GLY:H | 1 | 0.18 |
| (1,1308) | 1:A:236:LYS:HD2 | 1:A:237:GLY:H | 15 | 0.18 |
| (1,1308) | 1:A:236:LYS:HD3 | 1:A:237:GLY:H | 15 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG11 | 3 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG12 | 3 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG13 | 3 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG21 | 3 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG22 | 3 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG23 | 3 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG11 | 3 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG12 | 3 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG13 | 3 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG21 | 3 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG22 | 3 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG23 | 3 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG11 | 3 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG12 | 3 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG13 | 3 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG21 | 3 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG22 | 3 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG23 | 3 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG11 | 3 | 0.18 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG12 | 3 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG13 | 3 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG21 | 3 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG22 | 3 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG23 | 3 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG11 | 3 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG12 | 3 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG13 | 3 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG21 | 3 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG22 | 3 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG23 | 3 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG11 | 3 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG12 | 3 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG13 | 3 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG21 | 3 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG22 | 3 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG23 | 3 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG11 | 4 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG12 | 4 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG13 | 4 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG21 | 4 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG22 | 4 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG23 | 4 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG11 | 4 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG12 | 4 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG13 | 4 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG21 | 4 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG22 | 4 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG23 | 4 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG11 | 4 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG12 | 4 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG13 | 4 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG21 | 4 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG22 | 4 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG23 | 4 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG11 | 4 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG12 | 4 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG13 | 4 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG21 | 4 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG22 | 4 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG23 | 4 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG11 | 4 | 0.18 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG12 | 4 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG13 | 4 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG21 | 4 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG22 | 4 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG23 | 4 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG11 | 4 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG12 | 4 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG13 | 4 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG21 | 4 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG22 | 4 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG23 | 4 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG11 | 8 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG12 | 8 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG13 | 8 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG21 | 8 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG22 | 8 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG23 | 8 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG11 | 8 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG12 | 8 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG13 | 8 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG21 | 8 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG22 | 8 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG23 | 8 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG11 | 8 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG12 | 8 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG13 | 8 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG21 | 8 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG22 | 8 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG23 | 8 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG11 | 8 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG12 | 8 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG13 | 8 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG21 | 8 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG22 | 8 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG23 | 8 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG11 | 8 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG12 | 8 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG13 | 8 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG21 | 8 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG22 | 8 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG23 | 8 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG11 | 8 | 0.18 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG12 | 8 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG13 | 8 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG21 | 8 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG22 | 8 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG23 | 8 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG11 | 11 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG12 | 11 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG13 | 11 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG21 | 11 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG22 | 11 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG23 | 11 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG11 | 11 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG12 | 11 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG13 | 11 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG21 | 11 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG22 | 11 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG23 | 11 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG11 | 11 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG12 | 11 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG13 | 11 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG21 | 11 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG22 | 11 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG23 | 11 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG11 | 11 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG12 | 11 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG13 | 11 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG21 | 11 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG22 | 11 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG23 | 11 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG11 | 11 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG12 | 11 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG13 | 11 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG21 | 11 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG22 | 11 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG23 | 11 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG11 | 11 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG12 | 11 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG13 | 11 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG21 | 11 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG22 | 11 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG23 | 11 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG11 | 15 | 0.18 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG12 | 15 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG13 | 15 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG21 | 15 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG22 | 15 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG23 | 15 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG11 | 15 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG12 | 15 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG13 | 15 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG21 | 15 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG22 | 15 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG23 | 15 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG11 | 15 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG12 | 15 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG13 | 15 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG21 | 15 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG22 | 15 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG23 | 15 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG11 | 15 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG12 | 15 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG13 | 15 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG21 | 15 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG22 | 15 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG23 | 15 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG11 | 15 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG12 | 15 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG13 | 15 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG21 | 15 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG22 | 15 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG23 | 15 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG11 | 15 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG12 | 15 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG13 | 15 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG21 | 15 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG22 | 15 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG23 | 15 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG11 | 16 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG12 | 16 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG13 | 16 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG21 | 16 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG22 | 16 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG23 | 16 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG11 | 16 | 0.18 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG12 | 16 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG13 | 16 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG21 | 16 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG22 | 16 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG23 | 16 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG11 | 16 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG12 | 16 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG13 | 16 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG21 | 16 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG22 | 16 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG23 | 16 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG11 | 16 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG12 | 16 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG13 | 16 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG21 | 16 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG22 | 16 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG23 | 16 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG11 | 16 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG12 | 16 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG13 | 16 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG21 | 16 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG22 | 16 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG23 | 16 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG11 | 16 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG12 | 16 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG13 | 16 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG21 | 16 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG22 | 16 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG23 | 16 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG11 | 19 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG12 | 19 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG13 | 19 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG21 | 19 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG22 | 19 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG23 | 19 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG11 | 19 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG12 | 19 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG13 | 19 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG21 | 19 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG22 | 19 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG23 | 19 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG11 | 19 | 0.18 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG12 | 19 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG13 | 19 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG21 | 19 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG22 | 19 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG23 | 19 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG11 | 19 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG12 | 19 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG13 | 19 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG21 | 19 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG22 | 19 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG23 | 19 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG11 | 19 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG12 | 19 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG13 | 19 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG21 | 19 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG22 | 19 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG23 | 19 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG11 | 19 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG12 | 19 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG13 | 19 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG21 | 19 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG22 | 19 | 0.18 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG23 | 19 | 0.18 |
| (1,1072) | 1:A:228:GLN:HE21 | 1:A:229:ALA:H | 10 | 0.18 |
| (1,1039) | 1:A:232:LYS:HG3 | 1:A:252:GLU:H | 1 | 0.18 |
| (1,1039) | 1:A:232:LYS:HG3 | 1:A:252:GLU:H | 15 | 0.18 |
| (1,1039) | 1:A:232:LYS:HG3 | 1:A:252:GLU:H | 17 | 0.18 |
| (1,1021) | 1:A:228:GLN:HB3 | 1:A:228:GLN:HE22 | 3 | 0.18 |
| (1,1021) | 1:A:228:GLN:HB3 | 1:A:228:GLN:HE22 | 4 | 0.18 |
| (1,1021) | 1:A:228:GLN:HB3 | 1:A:228:GLN:HE22 | 6 | 0.18 |
| (1,1021) | 1:A:228:GLN:HB3 | 1:A:228:GLN:HE22 | 8 | 0.18 |
| (1,1021) | 1:A:228:GLN:HB3 | 1:A:228:GLN:HE22 | 12 | 0.18 |
| (1,1021) | 1:A:228:GLN:HB3 | 1:A:228:GLN:HE22 | 13 | 0.18 |
| (1,1021) | 1:A:228:GLN:HB3 | 1:A:228:GLN:HE22 | 15 | 0.18 |
| (1,1021) | 1:A:228:GLN:HB3 | 1:A:228:GLN:HE22 | 16 | 0.18 |
| (1,1021) | 1:A:228:GLN:HB3 | 1:A:228:GLN:HE22 | 17 | 0.18 |
| (1,1014) | 1:A:196:THR:HG21 | 1:A:252:GLU:H | 6 | 0.18 |
| (1,1014) | 1:A:196:THR:HG22 | 1:A:252:GLU:H | 6 | 0.18 |
| (1,1014) | 1:A:196:THR:HG23 | 1:A:252:GLU:H | 6 | 0.18 |
| (3,1) | 1:A:228:GLN:OE1 | 1:A:231:ARG:HH11 | 6 | 0.17 |
| (3,1) | 1:A:228:GLN:OE1 | 1:A:231:ARG:HH11 | 11 | 0.17 |
| (2,24) | 1:A:251:LEU:H | 1:A:233:LEU:O | 12 | 0.17 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,898) | 1:A:191:GLN:HB3 | 1:A:248:ASP:H | 6 | 0.17 |
| (1,833) | 1:A:174:GLY:HA2 | 1:A:175:GLU:H | 4 | 0.17 |
| (1,833) | 1:A:174:GLY:HA2 | 1:A:175:GLU:H | 10 | 0.17 |
| (1,788) | 1:A:235:LEU:HB3 | 1:A:236:LYS:H | 4 | 0.17 |
| (1,788) | 1:A:235:LEU:HB3 | 1:A:236:LYS:H | 7 | 0.17 |
| (1,780) | 1:A:197:LEU:H | 1:A:252:GLU:H | 11 | 0.17 |
| (1,739) | 1:A:254:ARG:H | 1:A:254:ARG:HB3 | 13 | 0.17 |
| (1,739) | 1:A:254:ARG:H | 1:A:254:ARG:HB3 | 18 | 0.17 |
| (1,695) | 1:A:194:TYR:HE1 | 1:A:232:LYS:HG3 | 5 | 0.17 |
| (1,689) | 1:A:215:LEU:HB2 | 1:A:240:PHE:HD1 | 1 | 0.17 |
| (1,689) | 1:A:215:LEU:HB2 | 1:A:240:PHE:HD1 | 3 | 0.17 |
| (1,663) | 1:A:205:VAL:HA | 1:A:226:ARG:HD3 | 14 | 0.17 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD11 | 2 | 0.17 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD12 | 2 | 0.17 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD13 | 2 | 0.17 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD11 | 2 | 0.17 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD12 | 2 | 0.17 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD13 | 2 | 0.17 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD11 | 2 | 0.17 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD12 | 2 | 0.17 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD13 | 2 | 0.17 |
| (1,624) | 1:A:209:LYS:HD3 | 1:A:220:GLU:HB2 | 8 | 0.17 |
| (1,577) | 1:A:194:TYR:HD1 | 1:A:195:ALA:HA | 15 | 0.17 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD11 | 1:A:251:LEU:HB2 | 8 | 0.17 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD12 | 1:A:251:LEU:HB2 | 8 | 0.17 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD13 | 1:A:251:LEU:HB2 | 8 | 0.17 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB1 | 3 | 0.17 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB2 | 3 | 0.17 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB3 | 3 | 0.17 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB1 | 3 | 0.17 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB2 | 3 | 0.17 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB3 | 3 | 0.17 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB1 | 3 | 0.17 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB2 | 3 | 0.17 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB3 | 3 | 0.17 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB1 | 12 | 0.17 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB2 | 12 | 0.17 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB3 | 12 | 0.17 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB1 | 12 | 0.17 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB2 | 12 | 0.17 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB3 | 12 | 0.17 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB1 | 12 | 0.17 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB2 | 12 | 0.17 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB3 | 12 | 0.17 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB1 | 19 | 0.17 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB2 | 19 | 0.17 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB3 | 19 | 0.17 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB1 | 19 | 0.17 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB2 | 19 | 0.17 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB3 | 19 | 0.17 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB1 | 19 | 0.17 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB2 | 19 | 0.17 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB3 | 19 | 0.17 |
| (1,320) | 1:A:196:THR:HG21 | 1:A:254:ARG:HD3 | 3 | 0.17 |
| (1,320) | 1:A:196:THR:HG22 | 1:A:254:ARG:HD3 | 3 | 0.17 |
| (1,320) | 1:A:196:THR:HG23 | 1:A:254:ARG:HD3 | 3 | 0.17 |
| (1,320) | 1:A:196:THR:HG21 | 1:A:254:ARG:HD3 | 19 | 0.17 |
| (1,320) | 1:A:196:THR:HG22 | 1:A:254:ARG:HD3 | 19 | 0.17 |
| (1,320) | 1:A:196:THR:HG23 | 1:A:254:ARG:HD3 | 19 | 0.17 |
| (1,258) | 1:A:232:LYS:HG3 | 1:A:251:LEU:HA | 2 | 0.17 |
| (1,258) | 1:A:232:LYS:HG3 | 1:A:251:LEU:HA | 12 | 0.17 |
| (1,1716) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:234:ARG:HD2 | 20 | 0.17 |
| (1,1716) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:234:ARG:HD3 | 20 | 0.17 |
| (1,1711) | 1:A:176:TRP:HE1 | 1:A:197:LEU:HG | 1 | 0.17 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:236:LYS:HA | 6 | 0.17 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:236:LYS:HA | 6 | 0.17 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:236:LYS:HA | 6 | 0.17 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:236:LYS:HA | 6 | 0.17 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:236:LYS:HA | 6 | 0.17 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:236:LYS:HA | 6 | 0.17 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:236:LYS:HA | 10 | 0.17 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:236:LYS:HA | 10 | 0.17 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:236:LYS:HA | 10 | 0.17 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:236:LYS:HA | 10 | 0.17 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:236:LYS:HA | 10 | 0.17 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:236:LYS:HA | 10 | 0.17 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:236:LYS:HA | 18 | 0.17 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:236:LYS:HA | 18 | 0.17 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:236:LYS:HA | 18 | 0.17 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:236:LYS:HA | 18 | 0.17 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:236:LYS:HA | 18 | 0.17 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:236:LYS:HA | 18 | 0.17 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:236:LYS:H | 10 | 0.17 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:236:LYS:H | 10 | 0.17 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:236:LYS:H | 10 | 0.17 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:236:LYS:H | 10 | 0.17 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:236:LYS:H | 10 | 0.17 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:236:LYS:H | 10 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD11 | 2 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD12 | 2 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD13 | 2 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD21 | 2 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD22 | 2 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD23 | 2 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD11 | 2 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD12 | 2 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD13 | 2 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD21 | 2 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD22 | 2 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD23 | 2 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD11 | 2 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD12 | 2 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD13 | 2 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD21 | 2 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD22 | 2 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD23 | 2 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD11 | 2 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD12 | 2 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD13 | 2 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD21 | 2 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD22 | 2 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD23 | 2 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD11 | 2 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD12 | 2 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD13 | 2 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD21 | 2 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD22 | 2 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD23 | 2 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD11 | 2 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD12 | 2 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD13 | 2 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD21 | 2 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD22 | 2 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD23 | 2 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD11 | 8 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD12 | 8 | 0.17 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD13 | 8 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD21 | 8 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD22 | 8 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD23 | 8 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD11 | 8 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD12 | 8 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD13 | 8 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD21 | 8 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD22 | 8 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD23 | 8 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD11 | 8 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD12 | 8 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD13 | 8 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD21 | 8 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD22 | 8 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD23 | 8 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD11 | 8 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD12 | 8 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD13 | 8 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD21 | 8 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD22 | 8 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD23 | 8 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD11 | 8 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD12 | 8 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD13 | 8 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD21 | 8 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD22 | 8 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD23 | 8 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD11 | 8 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD12 | 8 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD13 | 8 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD21 | 8 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD22 | 8 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD23 | 8 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD11 | 10 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD12 | 10 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD13 | 10 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD21 | 10 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD22 | 10 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD23 | 10 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD11 | 10 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD12 | 10 | 0.17 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD13 | 10 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD21 | 10 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD22 | 10 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD23 | 10 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD11 | 10 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD12 | 10 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD13 | 10 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD21 | 10 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD22 | 10 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD23 | 10 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD11 | 10 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD12 | 10 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD13 | 10 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD21 | 10 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD22 | 10 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD23 | 10 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD11 | 10 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD12 | 10 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD13 | 10 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD21 | 10 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD22 | 10 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD23 | 10 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD11 | 10 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD12 | 10 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD13 | 10 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD21 | 10 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD22 | 10 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD23 | 10 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD11 | 11 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD12 | 11 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD13 | 11 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD21 | 11 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD22 | 11 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD23 | 11 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD11 | 11 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD12 | 11 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD13 | 11 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD21 | 11 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD22 | 11 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD23 | 11 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD11 | 11 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD12 | 11 | 0.17 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD13 | 11 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD21 | 11 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD22 | 11 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD23 | 11 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD11 | 11 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD12 | 11 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD13 | 11 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD21 | 11 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD22 | 11 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD23 | 11 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD11 | 11 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD12 | 11 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD13 | 11 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD21 | 11 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD22 | 11 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD23 | 11 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD11 | 11 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD12 | 11 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD13 | 11 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD21 | 11 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD22 | 11 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD23 | 11 | 0.17 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:H | 15 | 0.17 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:H | 15 | 0.17 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:H | 15 | 0.17 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:H | 15 | 0.17 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:H | 15 | 0.17 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:H | 15 | 0.17 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:H | 18 | 0.17 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:H | 18 | 0.17 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:H | 18 | 0.17 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:H | 18 | 0.17 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:H | 18 | 0.17 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:H | 18 | 0.17 |
| (1,1582) | 1:A:211:ARG:HD2 | 1:A:213:MET:H | 5 | 0.17 |
| (1,1582) | 1:A:211:ARG:HD3 | 1:A:213:MET:H | 5 | 0.17 |
| (1,1582) | 1:A:211:ARG:HD2 | 1:A:213:MET:H | 6 | 0.17 |
| (1,1582) | 1:A:211:ARG:HD3 | 1:A:213:MET:H | 6 | 0.17 |
| (1,1582) | 1:A:211:ARG:HD2 | 1:A:213:MET:H | 10 | 0.17 |
| (1,1582) | 1:A:211:ARG:HD3 | 1:A:213:MET:H | 10 | 0.17 |
| (1,1556) | 1:A:209:LYS:HB2 | 1:A:209:LYS:HD2 | 2 | 0.17 |
| (1,1556) | 1:A:209:LYS:HB2 | 1:A:209:LYS:HD3 | 2 | 0.17 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:254:ARG:HB3 | 15 | 0.17 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:254:ARG:HB3 | 15 | 0.17 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:254:ARG:HB3 | 15 | 0.17 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:254:ARG:HB3 | 15 | 0.17 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:254:ARG:HB3 | 15 | 0.17 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:254:ARG:HB3 | 15 | 0.17 |
| (1,1483) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:252:GLU:HG2 | 2 | 0.17 |
| (1,1483) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:252:GLU:HG3 | 2 | 0.17 |
| (1,1394) | 1:A:242:GLY:HA3 | 1:A:246:ARG:HG3 | 20 | 0.17 |
| (1,1383) | 1:A:253:VAL:HG11 | 1:A:254:ARG:HB3 | 15 | 0.17 |
| (1,1383) | 1:A:253:VAL:HG12 | 1:A:254:ARG:HB3 | 15 | 0.17 |
| (1,1383) | 1:A:253:VAL:HG13 | 1:A:254:ARG:HB3 | 15 | 0.17 |
| (1,1308) | 1:A:236:LYS:HD2 | 1:A:237:GLY:H | 10 | 0.17 |
| (1,1308) | 1:A:236:LYS:HD3 | 1:A:237:GLY:H | 10 | 0.17 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG11 | 16 | 0.17 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG12 | 16 | 0.17 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG13 | 16 | 0.17 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG21 | 16 | 0.17 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG22 | 16 | 0.17 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG23 | 16 | 0.17 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG11 | 16 | 0.17 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG12 | 16 | 0.17 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG13 | 16 | 0.17 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG21 | 16 | 0.17 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG22 | 16 | 0.17 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG23 | 16 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG11 | 6 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG12 | 6 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG13 | 6 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG21 | 6 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG22 | 6 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG23 | 6 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG11 | 6 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG12 | 6 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG13 | 6 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG21 | 6 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG22 | 6 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG23 | 6 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG11 | 6 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG12 | 6 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG13 | 6 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG21 | 6 | 0.17 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG22 | 6 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG23 | 6 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG11 | 6 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG12 | 6 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG13 | 6 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG21 | 6 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG22 | 6 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG23 | 6 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG11 | 6 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG12 | 6 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG13 | 6 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG21 | 6 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG22 | 6 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG23 | 6 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG11 | 6 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG12 | 6 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG13 | 6 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG21 | 6 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG22 | 6 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG23 | 6 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG11 | 7 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG12 | 7 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG13 | 7 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG21 | 7 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG22 | 7 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG23 | 7 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG11 | 7 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG12 | 7 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG13 | 7 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG21 | 7 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG22 | 7 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG23 | 7 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG11 | 7 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG12 | 7 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG13 | 7 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG21 | 7 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG22 | 7 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG23 | 7 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG11 | 7 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG12 | 7 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG13 | 7 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG21 | 7 | 0.17 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG22 | 7 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG23 | 7 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG11 | 7 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG12 | 7 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG13 | 7 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG21 | 7 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG22 | 7 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG23 | 7 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG11 | 7 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG12 | 7 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG13 | 7 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG21 | 7 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG22 | 7 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG23 | 7 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG11 | 10 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG12 | 10 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG13 | 10 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG21 | 10 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG22 | 10 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG23 | 10 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG11 | 10 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG12 | 10 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG13 | 10 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG21 | 10 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG22 | 10 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG23 | 10 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG11 | 10 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG12 | 10 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG13 | 10 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG21 | 10 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG22 | 10 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG23 | 10 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG11 | 10 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG12 | 10 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG13 | 10 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG21 | 10 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG22 | 10 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG23 | 10 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG11 | 10 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG12 | 10 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG13 | 10 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG21 | 10 | 0.17 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG22 | 10 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG23 | 10 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG11 | 10 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG12 | 10 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG13 | 10 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG21 | 10 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG22 | 10 | 0.17 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG23 | 10 | 0.17 |
| (1,1098) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:175:GLU:HB2 | 5 | 0.17 |
| (1,1098) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:175:GLU:HB3 | 5 | 0.17 |
| (1,1039) | 1:A:232:LYS:HG3 | 1:A:252:GLU:H | 3 | 0.17 |
| (1,1039) | 1:A:232:LYS:HG3 | 1:A:252:GLU:H | 9 | 0.17 |
| (1,1021) | 1:A:228:GLN:HB3 | 1:A:228:GLN:HE22 | 1 | 0.17 |
| (1,1021) | 1:A:228:GLN:HB3 | 1:A:228:GLN:HE22 | 9 | 0.17 |
| (1,1021) | 1:A:228:GLN:HB3 | 1:A:228:GLN:HE22 | 10 | 0.17 |
| (1,1021) | 1:A:228:GLN:HB3 | 1:A:228:GLN:HE22 | 14 | 0.17 |
| (1,1021) | 1:A:228:GLN:HB3 | 1:A:228:GLN:HE22 | 18 | 0.17 |
| (3,1) | 1:A:228:GLN:OE1 | 1:A:231:ARG:HH11 | 7 | 0.16 |
| (3,1) | 1:A:228:GLN:OE1 | 1:A:231:ARG:HH11 | 13 | 0.16 |
| (1,898) | 1:A:191:GLN:HB3 | 1:A:248:ASP:H | 8 | 0.16 |
| (1,833) | 1:A:174:GLY:HA2 | 1:A:175:GLU:H | 16 | 0.16 |
| (1,788) | 1:A:235:LEU:HB3 | 1:A:236:LYS:H | 9 | 0.16 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD11 | 1:A:210:VAL:HG21 | 16 | 0.16 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD11 | 1:A:210:VAL:HG22 | 16 | 0.16 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD11 | 1:A:210:VAL:HG23 | 16 | 0.16 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD12 | 1:A:210:VAL:HG21 | 16 | 0.16 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD12 | 1:A:210:VAL:HG22 | 16 | 0.16 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD12 | 1:A:210:VAL:HG23 | 16 | 0.16 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD13 | 1:A:210:VAL:HG21 | 16 | 0.16 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD13 | 1:A:210:VAL:HG22 | 16 | 0.16 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD13 | 1:A:210:VAL:HG23 | 16 | 0.16 |
| (1,689) | 1:A:215:LEU:HB2 | 1:A:240:PHE:HD1 | 7 | 0.16 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD11 | 9 | 0.16 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD12 | 9 | 0.16 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD13 | 9 | 0.16 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD11 | 9 | 0.16 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD12 | 9 | 0.16 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD13 | 9 | 0.16 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD11 | 9 | 0.16 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD12 | 9 | 0.16 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD13 | 9 | 0.16 |
| (1,624) | 1:A:209:LYS:HD3 | 1:A:220:GLU:HB2 | 3 | 0.16 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,624) | 1:A:209:LYS:HD3 | 1:A:220:GLU:HB2 | 6 | 0.16 |
| (1,577) | 1:A:194:TYR:HD1 | 1:A:195:ALA:HA | 7 | 0.16 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD11 | 1:A:251:LEU:HB2 | 6 | 0.16 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD12 | 1:A:251:LEU:HB2 | 6 | 0.16 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD13 | 1:A:251:LEU:HB2 | 6 | 0.16 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB1 | 10 | 0.16 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB2 | 10 | 0.16 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB3 | 10 | 0.16 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB1 | 10 | 0.16 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB2 | 10 | 0.16 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB3 | 10 | 0.16 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB1 | 10 | 0.16 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB2 | 10 | 0.16 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB3 | 10 | 0.16 |
| (1,335) | 1:A:219:VAL:HB | 1:A:220:GLU:H | 17 | 0.16 |
| (1,320) | 1:A:196:THR:HG21 | 1:A:254:ARG:HD3 | 1 | 0.16 |
| (1,320) | 1:A:196:THR:HG22 | 1:A:254:ARG:HD3 | 1 | 0.16 |
| (1,320) | 1:A:196:THR:HG23 | 1:A:254:ARG:HD3 | 1 | 0.16 |
| (1,320) | 1:A:196:THR:HG21 | 1:A:254:ARG:HD3 | 11 | 0.16 |
| (1,320) | 1:A:196:THR:HG22 | 1:A:254:ARG:HD3 | 11 | 0.16 |
| (1,320) | 1:A:196:THR:HG23 | 1:A:254:ARG:HD3 | 11 | 0.16 |
| (1,320) | 1:A:196:THR:HG21 | 1:A:254:ARG:HD3 | 13 | 0.16 |
| (1,320) | 1:A:196:THR:HG22 | 1:A:254:ARG:HD3 | 13 | 0.16 |
| (1,320) | 1:A:196:THR:HG23 | 1:A:254:ARG:HD3 | 13 | 0.16 |
| (1,316) | 1:A:205:VAL:HA | 1:A:226:ARG:HD2 | 20 | 0.16 |
| (1,258) | 1:A:232:LYS:HG3 | 1:A:251:LEU:HA | 20 | 0.16 |
| (1,1718) | 1:A:172:THR:HA | 1:A:219:VAL:HG21 | 18 | 0.16 |
| (1,1718) | 1:A:172:THR:HA | 1:A:219:VAL:HG22 | 18 | 0.16 |
| (1,1718) | 1:A:172:THR:HA | 1:A:219:VAL:HG23 | 18 | 0.16 |
| (1,1691) | 1:A:249:LEU:HD11 | 1:A:251:LEU:H | 15 | 0.16 |
| (1,1691) | 1:A:249:LEU:HD12 | 1:A:251:LEU:H | 15 | 0.16 |
| (1,1691) | 1:A:249:LEU:HD13 | 1:A:251:LEU:H | 15 | 0.16 |
| (1,1691) | 1:A:249:LEU:HD21 | 1:A:251:LEU:H | 15 | 0.16 |
| (1,1691) | 1:A:249:LEU:HD22 | 1:A:251:LEU:H | 15 | 0.16 |
| (1,1691) | 1:A:249:LEU:HD23 | 1:A:251:LEU:H | 15 | 0.16 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD11 | 9 | 0.16 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD12 | 9 | 0.16 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD13 | 9 | 0.16 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD21 | 9 | 0.16 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD22 | 9 | 0.16 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD23 | 9 | 0.16 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:238:LYS:H | 3 | 0.16 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:238:LYS:H | 3 | 0.16 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:238:LYS:H | 3 | 0.16 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:238:LYS:H | 3 | 0.16 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:238:LYS:H | 3 | 0.16 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:238:LYS:H | 3 | 0.16 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:238:LYS:H | 16 | 0.16 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:238:LYS:H | 16 | 0.16 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:238:LYS:H | 16 | 0.16 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:238:LYS:H | 16 | 0.16 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:238:LYS:H | 16 | 0.16 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:238:LYS:H | 16 | 0.16 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:236:LYS:HA | 4 | 0.16 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:236:LYS:HA | 4 | 0.16 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:236:LYS:HA | 4 | 0.16 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:236:LYS:HA | 4 | 0.16 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:236:LYS:HA | 4 | 0.16 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:236:LYS:HA | 4 | 0.16 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:236:LYS:HA | 9 | 0.16 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:236:LYS:HA | 9 | 0.16 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:236:LYS:HA | 9 | 0.16 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:236:LYS:HA | 9 | 0.16 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:236:LYS:HA | 9 | 0.16 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:236:LYS:HA | 9 | 0.16 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:236:LYS:H | 8 | 0.16 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:236:LYS:H | 8 | 0.16 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:236:LYS:H | 8 | 0.16 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:236:LYS:H | 8 | 0.16 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:236:LYS:H | 8 | 0.16 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:236:LYS:H | 8 | 0.16 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:236:LYS:H | 15 | 0.16 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:236:LYS:H | 15 | 0.16 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:236:LYS:H | 15 | 0.16 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:236:LYS:H | 15 | 0.16 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:236:LYS:H | 15 | 0.16 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:236:LYS:H | 15 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD11 | 7 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD12 | 7 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD13 | 7 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD21 | 7 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD22 | 7 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD23 | 7 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD11 | 7 | 0.16 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD12 | 7 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD13 | 7 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD21 | 7 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD22 | 7 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD23 | 7 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD11 | 7 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD12 | 7 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD13 | 7 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD21 | 7 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD22 | 7 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD23 | 7 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD11 | 7 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD12 | 7 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD13 | 7 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD21 | 7 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD22 | 7 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD23 | 7 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD11 | 7 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD12 | 7 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD13 | 7 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD21 | 7 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD22 | 7 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD23 | 7 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD11 | 7 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD12 | 7 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD13 | 7 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD21 | 7 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD22 | 7 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD23 | 7 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD11 | 11 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD12 | 11 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD13 | 11 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD21 | 11 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD22 | 11 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD23 | 11 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD11 | 11 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD12 | 11 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD13 | 11 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD21 | 11 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD22 | 11 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD23 | 11 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD11 | 11 | 0.16 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD12 | 11 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD13 | 11 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD21 | 11 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD22 | 11 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD23 | 11 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD11 | 11 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD12 | 11 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD13 | 11 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD21 | 11 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD22 | 11 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD23 | 11 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD11 | 11 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD12 | 11 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD13 | 11 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD21 | 11 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD22 | 11 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD23 | 11 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD11 | 11 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD12 | 11 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD13 | 11 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD21 | 11 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD22 | 11 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD23 | 11 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD11 | 15 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD12 | 15 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD13 | 15 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD21 | 15 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD22 | 15 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD23 | 15 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD11 | 15 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD12 | 15 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD13 | 15 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD21 | 15 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD22 | 15 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD23 | 15 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD11 | 15 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD12 | 15 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD13 | 15 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD21 | 15 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD22 | 15 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD23 | 15 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD11 | 15 | 0.16 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD12 | 15 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD13 | 15 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD21 | 15 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD22 | 15 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD23 | 15 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD11 | 15 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD12 | 15 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD13 | 15 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD21 | 15 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD22 | 15 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD23 | 15 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD11 | 15 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD12 | 15 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD13 | 15 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD21 | 15 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD22 | 15 | 0.16 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD23 | 15 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD11 | 13 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD12 | 13 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD13 | 13 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD21 | 13 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD22 | 13 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD23 | 13 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD11 | 13 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD12 | 13 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD13 | 13 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD21 | 13 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD22 | 13 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD23 | 13 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD11 | 13 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD12 | 13 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD13 | 13 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD21 | 13 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD22 | 13 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD23 | 13 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD11 | 13 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD12 | 13 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD13 | 13 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD21 | 13 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD22 | 13 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD23 | 13 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD11 | 13 | 0.16 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD12 | 13 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD13 | 13 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD21 | 13 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD22 | 13 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD23 | 13 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD11 | 13 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD12 | 13 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD13 | 13 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD21 | 13 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD22 | 13 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD23 | 13 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD11 | 16 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD12 | 16 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD13 | 16 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD21 | 16 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD22 | 16 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD23 | 16 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD11 | 16 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD12 | 16 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD13 | 16 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD21 | 16 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD22 | 16 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD23 | 16 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD11 | 16 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD12 | 16 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD13 | 16 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD21 | 16 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD22 | 16 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD23 | 16 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD11 | 16 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD12 | 16 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD13 | 16 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD21 | 16 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD22 | 16 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD23 | 16 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD11 | 16 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD12 | 16 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD13 | 16 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD21 | 16 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD22 | 16 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD23 | 16 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD11 | 16 | 0.16 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD12 | 16 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD13 | 16 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD21 | 16 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD22 | 16 | 0.16 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD23 | 16 | 0.16 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HB2 | 7 | 0.16 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HB3 | 7 | 0.16 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HB2 | 7 | 0.16 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HB3 | 7 | 0.16 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HB2 | 7 | 0.16 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HB3 | 7 | 0.16 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HB2 | 7 | 0.16 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HB3 | 7 | 0.16 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HB2 | 7 | 0.16 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HB3 | 7 | 0.16 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HB2 | 7 | 0.16 |
| (1,1597) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HB3 | 7 | 0.16 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:H | 20 | 0.16 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:H | 20 | 0.16 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:H | 20 | 0.16 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:H | 20 | 0.16 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:H | 20 | 0.16 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:H | 20 | 0.16 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD11 | 19 | 0.16 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD12 | 19 | 0.16 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD13 | 19 | 0.16 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD21 | 19 | 0.16 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD22 | 19 | 0.16 |
| (1,1590) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:215:LEU:HD23 | 19 | 0.16 |
| (1,1582) | 1:A:211:ARG:HD2 | 1:A:213:MET:H | 18 | 0.16 |
| (1,1582) | 1:A:211:ARG:HD3 | 1:A:213:MET:H | 18 | 0.16 |
| (1,1556) | 1:A:209:LYS:HB2 | 1:A:209:LYS:HD2 | 7 | 0.16 |
| (1,1556) | 1:A:209:LYS:HB2 | 1:A:209:LYS:HD3 | 7 | 0.16 |
| (1,1556) | 1:A:209:LYS:HB2 | 1:A:209:LYS:HD2 | 8 | 0.16 |
| (1,1556) | 1:A:209:LYS:HB2 | 1:A:209:LYS:HD3 | 8 | 0.16 |
| (1,1556) | 1:A:209:LYS:HB2 | 1:A:209:LYS:HD2 | 11 | 0.16 |
| (1,1556) | 1:A:209:LYS:HB2 | 1:A:209:LYS:HD3 | 11 | 0.16 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:254:ARG:HB3 | 16 | 0.16 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:254:ARG:HB3 | 16 | 0.16 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:254:ARG:HB3 | 16 | 0.16 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:254:ARG:HB3 | 16 | 0.16 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:254:ARG:HB3 | 16 | 0.16 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:254:ARG:HB3 | 16 | 0.16 |
| (1,1424) | 1:A:231:ARG:HD2 | 1:A:232:LYS:H | 2 | 0.16 |
| (1,1424) | 1:A:231:ARG:HD2 | 1:A:232:LYS:H | 4 | 0.16 |
| (1,1424) | 1:A:231:ARG:HD2 | 1:A:232:LYS:H | 5 | 0.16 |
| (1,1424) | 1:A:231:ARG:HD2 | 1:A:232:LYS:H | 18 | 0.16 |
| (1,1394) | 1:A:242:GLY:HA3 | 1:A:246:ARG:HG3 | 18 | 0.16 |
| (1,1373) | 1:A:211:ARG:HB2 | 1:A:220:GLU:HG2 | 4 | 0.16 |
| (1,1373) | 1:A:211:ARG:HB2 | 1:A:220:GLU:HG2 | 10 | 0.16 |
| (1,1331) | 1:A:246:ARG:HD2 | 1:A:247:GLY:H | 2 | 0.16 |
| (1,1331) | 1:A:246:ARG:HD3 | 1:A:247:GLY:H | 2 | 0.16 |
| (1,1310) | 1:A:236:LYS:HE2 | 1:A:237:GLY:H | 20 | 0.16 |
| (1,1310) | 1:A:236:LYS:HE3 | 1:A:237:GLY:H | 20 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG11 | 2 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG12 | 2 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG13 | 2 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG21 | 2 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG22 | 2 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG23 | 2 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG11 | 2 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG12 | 2 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG13 | 2 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG21 | 2 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG22 | 2 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG23 | 2 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG11 | 2 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG12 | 2 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG13 | 2 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG21 | 2 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG22 | 2 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG23 | 2 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG11 | 2 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG12 | 2 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG13 | 2 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG21 | 2 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG22 | 2 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG23 | 2 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG11 | 2 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG12 | 2 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG13 | 2 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG21 | 2 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG22 | 2 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG23 | 2 | 0.16 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG11 | 2 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG12 | 2 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG13 | 2 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG21 | 2 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG22 | 2 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG23 | 2 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG11 | 20 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG12 | 20 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG13 | 20 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG21 | 20 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG22 | 20 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG23 | 20 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG11 | 20 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG12 | 20 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG13 | 20 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG21 | 20 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG22 | 20 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG23 | 20 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG11 | 20 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG12 | 20 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG13 | 20 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG21 | 20 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG22 | 20 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG23 | 20 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG11 | 20 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG12 | 20 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG13 | 20 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG21 | 20 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG22 | 20 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG23 | 20 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG11 | 20 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG12 | 20 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG13 | 20 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG21 | 20 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG22 | 20 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG23 | 20 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG11 | 20 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG12 | 20 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG13 | 20 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG21 | 20 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG22 | 20 | 0.16 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG23 | 20 | 0.16 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG11 | 4 | 0.16 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG12 | 4 | 0.16 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG13 | 4 | 0.16 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG21 | 4 | 0.16 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG22 | 4 | 0.16 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG23 | 4 | 0.16 |
| (1,1079) | 1:A:169:GLU:HG2 | 1:A:170:THR:H | 4 | 0.16 |
| (1,1079) | 1:A:169:GLU:HG3 | 1:A:170:THR:H | 4 | 0.16 |
| (1,1072) | 1:A:228:GLN:HE21 | 1:A:229:ALA:H | 12 | 0.16 |
| (1,1063) | 1:A:191:GLN:HE21 | 1:A:242:GLY:HA2 | 17 | 0.16 |
| (1,1039) | 1:A:232:LYS:HG3 | 1:A:252:GLU:H | 12 | 0.16 |
| (1,1039) | 1:A:232:LYS:HG3 | 1:A:252:GLU:H | 18 | 0.16 |
| (1,1021) | 1:A:228:GLN:HB3 | 1:A:228:GLN:HE22 | 2 | 0.16 |
| (1,1021) | 1:A:228:GLN:HB3 | 1:A:228:GLN:HE22 | 7 | 0.16 |
| (1,1021) | 1:A:228:GLN:HB3 | 1:A:228:GLN:HE22 | 20 | 0.16 |
| (3,1) | 1:A:228:GLN:OE1 | 1:A:231:ARG:HH11 | 4 | 0.15 |
| (3,1) | 1:A:228:GLN:OE1 | 1:A:231:ARG:HH11 | 18 | 0.15 |
| (1,976) | 1:A:241:PRO:HB2 | 1:A:242:GLY:H | 9 | 0.15 |
| (1,907) | 1:A:209:LYS:HG3 | 1:A:210:VAL:H | 1 | 0.15 |
| (1,898) | 1:A:191:GLN:HB3 | 1:A:248:ASP:H | 7 | 0.15 |
| (1,898) | 1:A:191:GLN:HB3 | 1:A:248:ASP:H | 10 | 0.15 |
| (1,898) | 1:A:191:GLN:HB3 | 1:A:248:ASP:H | 13 | 0.15 |
| (1,892) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:H | 11 | 0.15 |
| (1,889) | 1:A:211:ARG:HA | 1:A:219:VAL:H | 5 | 0.15 |
| (1,856) | 1:A:205:VAL:HG21 | 1:A:226:ARG:H | 14 | 0.15 |
| (1,856) | 1:A:205:VAL:HG22 | 1:A:226:ARG:H | 14 | 0.15 |
| (1,856) | 1:A:205:VAL:HG23 | 1:A:226:ARG:H | 14 | 0.15 |
| (1,833) | 1:A:174:GLY:HA2 | 1:A:175:GLU:H | 3 | 0.15 |
| (1,833) | 1:A:174:GLY:HA2 | 1:A:175:GLU:H | 13 | 0.15 |
| (1,833) | 1:A:174:GLY:HA2 | 1:A:175:GLU:H | 17 | 0.15 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE1 | 1:A:215:LEU:HD21 | 8 | 0.15 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE1 | 1:A:215:LEU:HD22 | 8 | 0.15 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE1 | 1:A:215:LEU:HD23 | 8 | 0.15 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE2 | 1:A:215:LEU:HD21 | 8 | 0.15 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE2 | 1:A:215:LEU:HD22 | 8 | 0.15 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE2 | 1:A:215:LEU:HD23 | 8 | 0.15 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE3 | 1:A:215:LEU:HD21 | 8 | 0.15 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE3 | 1:A:215:LEU:HD22 | 8 | 0.15 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE3 | 1:A:215:LEU:HD23 | 8 | 0.15 |
| (1,788) | 1:A:235:LEU:HB3 | 1:A:236:LYS:H | 14 | 0.15 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD11 | 1:A:210:VAL:HG21 | 1 | 0.15 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD11 | 1:A:210:VAL:HG22 | 1 | 0.15 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD11 | 1:A:210:VAL:HG23 | 1 | 0.15 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD12 | 1:A:210:VAL:HG21 | 1 | 0.15 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD12 | 1:A:210:VAL:HG22 | 1 | 0.15 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD12 | 1:A:210:VAL:HG23 | 1 | 0.15 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD13 | 1:A:210:VAL:HG21 | 1 | 0.15 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD13 | 1:A:210:VAL:HG22 | 1 | 0.15 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD13 | 1:A:210:VAL:HG23 | 1 | 0.15 |
| (1,739) | 1:A:254:ARG:H | 1:A:254:ARG:HB3 | 15 | 0.15 |
| (1,663) | 1:A:205:VAL:HA | 1:A:226:ARG:HD3 | 10 | 0.15 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG11 | 1:A:253:VAL:HG11 | 4 | 0.15 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG11 | 1:A:253:VAL:HG12 | 4 | 0.15 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG11 | 1:A:253:VAL:HG13 | 4 | 0.15 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG12 | 1:A:253:VAL:HG11 | 4 | 0.15 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG12 | 1:A:253:VAL:HG12 | 4 | 0.15 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG12 | 1:A:253:VAL:HG13 | 4 | 0.15 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG13 | 1:A:253:VAL:HG11 | 4 | 0.15 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG13 | 1:A:253:VAL:HG12 | 4 | 0.15 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG13 | 1:A:253:VAL:HG13 | 4 | 0.15 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD11 | 3 | 0.15 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD12 | 3 | 0.15 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD13 | 3 | 0.15 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD11 | 3 | 0.15 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD12 | 3 | 0.15 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD13 | 3 | 0.15 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD11 | 3 | 0.15 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD12 | 3 | 0.15 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD13 | 3 | 0.15 |
| (1,625) | 1:A:236:LYS:HG2 | 1:A:248:ASP:HB3 | 9 | 0.15 |
| (1,625) | 1:A:236:LYS:HG2 | 1:A:248:ASP:HB3 | 14 | 0.15 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG21 | 1:A:256:THR:HG21 | 17 | 0.15 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG21 | 1:A:256:THR:HG22 | 17 | 0.15 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG21 | 1:A:256:THR:HG23 | 17 | 0.15 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG22 | 1:A:256:THR:HG21 | 17 | 0.15 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG22 | 1:A:256:THR:HG22 | 17 | 0.15 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG22 | 1:A:256:THR:HG23 | 17 | 0.15 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG23 | 1:A:256:THR:HG21 | 17 | 0.15 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG23 | 1:A:256:THR:HG22 | 17 | 0.15 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG23 | 1:A:256:THR:HG23 | 17 | 0.15 |
| (1,577) | 1:A:194:TYR:HD1 | 1:A:195:ALA:HA | 1 | 0.15 |
| (1,545) | 1:A:202:PRO:HD2 | 1:A:255:ILE:HG21 | 16 | 0.15 |
| (1,545) | 1:A:202:PRO:HD2 | 1:A:255:ILE:HG22 | 16 | 0.15 |
| (1,545) | 1:A:202:PRO:HD2 | 1:A:255:ILE:HG23 | 16 | 0.15 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,335) | 1:A:219:VAL:HB | 1:A:220:GLU:H | 13 | 0.15 |
| (1,258) | 1:A:232:LYS:HG3 | 1:A:251:LEU:HA | 3 | 0.15 |
| (1,229) | 1:A:215:LEU:HA | 1:A:240:PHE:HD1 | 19 | 0.15 |
| (1,1716) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:234:ARG:HD2 | 1 | 0.15 |
| (1,1716) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:234:ARG:HD3 | 1 | 0.15 |
| (1,1716) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:234:ARG:HD2 | 10 | 0.15 |
| (1,1716) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:234:ARG:HD3 | 10 | 0.15 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE21 | 1:A:253:VAL:HG11 | 10 | 0.15 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE21 | 1:A:253:VAL:HG12 | 10 | 0.15 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE21 | 1:A:253:VAL:HG13 | 10 | 0.15 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE21 | 1:A:253:VAL:HG21 | 10 | 0.15 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE21 | 1:A:253:VAL:HG22 | 10 | 0.15 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE21 | 1:A:253:VAL:HG23 | 10 | 0.15 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE22 | 1:A:253:VAL:HG11 | 10 | 0.15 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE22 | 1:A:253:VAL:HG12 | 10 | 0.15 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE22 | 1:A:253:VAL:HG13 | 10 | 0.15 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE22 | 1:A:253:VAL:HG21 | 10 | 0.15 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE22 | 1:A:253:VAL:HG22 | 10 | 0.15 |
| (1,1707) | 1:A:177:GLN:HE22 | 1:A:253:VAL:HG23 | 10 | 0.15 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD11 | 2 | 0.15 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD12 | 2 | 0.15 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD13 | 2 | 0.15 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD21 | 2 | 0.15 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD22 | 2 | 0.15 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD23 | 2 | 0.15 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:238:LYS:H | 5 | 0.15 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:238:LYS:H | 5 | 0.15 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:238:LYS:H | 5 | 0.15 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:238:LYS:H | 5 | 0.15 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:238:LYS:H | 5 | 0.15 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:238:LYS:H | 5 | 0.15 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:238:LYS:H | 12 | 0.15 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:238:LYS:H | 12 | 0.15 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:238:LYS:H | 12 | 0.15 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:238:LYS:H | 12 | 0.15 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:238:LYS:H | 12 | 0.15 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:238:LYS:H | 12 | 0.15 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:238:LYS:H | 13 | 0.15 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:238:LYS:H | 13 | 0.15 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:238:LYS:H | 13 | 0.15 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:238:LYS:H | 13 | 0.15 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:238:LYS:H | 13 | 0.15 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:238:LYS:H | 13 | 0.15 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:236:LYS:HA | 8 | 0.15 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:236:LYS:HA | 8 | 0.15 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:236:LYS:HA | 8 | 0.15 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:236:LYS:HA | 8 | 0.15 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:236:LYS:HA | 8 | 0.15 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:236:LYS:HA | 8 | 0.15 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:236:LYS:HA | 13 | 0.15 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:236:LYS:HA | 13 | 0.15 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:236:LYS:HA | 13 | 0.15 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:236:LYS:HA | 13 | 0.15 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:236:LYS:HA | 13 | 0.15 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:236:LYS:HA | 13 | 0.15 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:236:LYS:HA | 17 | 0.15 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:236:LYS:HA | 17 | 0.15 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:236:LYS:HA | 17 | 0.15 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:236:LYS:HA | 17 | 0.15 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:236:LYS:HA | 17 | 0.15 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:236:LYS:HA | 17 | 0.15 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:236:LYS:H | 1 | 0.15 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:236:LYS:H | 1 | 0.15 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:236:LYS:H | 1 | 0.15 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:236:LYS:H | 1 | 0.15 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:236:LYS:H | 1 | 0.15 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:236:LYS:H | 1 | 0.15 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:236:LYS:H | 5 | 0.15 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:236:LYS:H | 5 | 0.15 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:236:LYS:H | 5 | 0.15 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:236:LYS:H | 5 | 0.15 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:236:LYS:H | 5 | 0.15 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:236:LYS:H | 5 | 0.15 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:236:LYS:H | 9 | 0.15 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:236:LYS:H | 9 | 0.15 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:236:LYS:H | 9 | 0.15 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:236:LYS:H | 9 | 0.15 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:236:LYS:H | 9 | 0.15 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:236:LYS:H | 9 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD11 | 2 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD12 | 2 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD13 | 2 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD21 | 2 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD22 | 2 | 0.15 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD23 | 2 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD11 | 2 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD12 | 2 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD13 | 2 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD21 | 2 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD22 | 2 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD23 | 2 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD11 | 2 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD12 | 2 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD13 | 2 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD21 | 2 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD22 | 2 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD23 | 2 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD11 | 2 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD12 | 2 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD13 | 2 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD21 | 2 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD22 | 2 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD23 | 2 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD11 | 2 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD12 | 2 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD13 | 2 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD21 | 2 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD22 | 2 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD23 | 2 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD11 | 2 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD12 | 2 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD13 | 2 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD21 | 2 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD22 | 2 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD23 | 2 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD11 | 3 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD12 | 3 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD13 | 3 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD21 | 3 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD22 | 3 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD23 | 3 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD11 | 3 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD12 | 3 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD13 | 3 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD21 | 3 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD22 | 3 | 0.15 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD23 | 3 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD11 | 3 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD12 | 3 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD13 | 3 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD21 | 3 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD22 | 3 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD23 | 3 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD11 | 3 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD12 | 3 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD13 | 3 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD21 | 3 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD22 | 3 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD23 | 3 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD11 | 3 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD12 | 3 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD13 | 3 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD21 | 3 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD22 | 3 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD23 | 3 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD11 | 3 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD12 | 3 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD13 | 3 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD21 | 3 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD22 | 3 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD23 | 3 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD11 | 16 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD12 | 16 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD13 | 16 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD21 | 16 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD22 | 16 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD23 | 16 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD11 | 16 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD12 | 16 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD13 | 16 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD21 | 16 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD22 | 16 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD23 | 16 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD11 | 16 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD12 | 16 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD13 | 16 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD21 | 16 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD22 | 16 | 0.15 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD23 | 16 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD11 | 16 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD12 | 16 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD13 | 16 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD21 | 16 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD22 | 16 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD23 | 16 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD11 | 16 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD12 | 16 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD13 | 16 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD21 | 16 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD22 | 16 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD23 | 16 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD11 | 16 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD12 | 16 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD13 | 16 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD21 | 16 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD22 | 16 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD23 | 16 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD11 | 20 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD12 | 20 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD13 | 20 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD21 | 20 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD22 | 20 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD23 | 20 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD11 | 20 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD12 | 20 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD13 | 20 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD21 | 20 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD22 | 20 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD23 | 20 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD11 | 20 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD12 | 20 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD13 | 20 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD21 | 20 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD22 | 20 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD23 | 20 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD11 | 20 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD12 | 20 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD13 | 20 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD21 | 20 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD22 | 20 | 0.15 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD23 | 20 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD11 | 20 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD12 | 20 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD13 | 20 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD21 | 20 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD22 | 20 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD23 | 20 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD11 | 20 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD12 | 20 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD13 | 20 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD21 | 20 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD22 | 20 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD23 | 20 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD11 | 6 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD12 | 6 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD13 | 6 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD21 | 6 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD22 | 6 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD23 | 6 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD11 | 6 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD12 | 6 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD13 | 6 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD21 | 6 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD22 | 6 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD23 | 6 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD11 | 6 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD12 | 6 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD13 | 6 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD21 | 6 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD22 | 6 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD23 | 6 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD11 | 6 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD12 | 6 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD13 | 6 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD21 | 6 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD22 | 6 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD23 | 6 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD11 | 6 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD12 | 6 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD13 | 6 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD21 | 6 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD22 | 6 | 0.15 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD23 | 6 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD11 | 6 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD12 | 6 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD13 | 6 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD21 | 6 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD22 | 6 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD23 | 6 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD11 | 9 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD12 | 9 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD13 | 9 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD21 | 9 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD22 | 9 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD23 | 9 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD11 | 9 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD12 | 9 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD13 | 9 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD21 | 9 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD22 | 9 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD23 | 9 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD11 | 9 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD12 | 9 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD13 | 9 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD21 | 9 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD22 | 9 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD23 | 9 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD11 | 9 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD12 | 9 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD13 | 9 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD21 | 9 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD22 | 9 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD23 | 9 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD11 | 9 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD12 | 9 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD13 | 9 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD21 | 9 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD22 | 9 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD23 | 9 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD11 | 9 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD12 | 9 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD13 | 9 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD21 | 9 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD22 | 9 | 0.15 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD23 | 9 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD11 | 12 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD12 | 12 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD13 | 12 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD21 | 12 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD22 | 12 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD23 | 12 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD11 | 12 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD12 | 12 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD13 | 12 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD21 | 12 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD22 | 12 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD23 | 12 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD11 | 12 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD12 | 12 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD13 | 12 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD21 | 12 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD22 | 12 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD23 | 12 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD11 | 12 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD12 | 12 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD13 | 12 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD21 | 12 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD22 | 12 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD23 | 12 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD11 | 12 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD12 | 12 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD13 | 12 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD21 | 12 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD22 | 12 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD23 | 12 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD11 | 12 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD12 | 12 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD13 | 12 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD21 | 12 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD22 | 12 | 0.15 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD23 | 12 | 0.15 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:217:GLY:H | 10 | 0.15 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:217:GLY:H | 10 | 0.15 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:217:GLY:H | 10 | 0.15 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:217:GLY:H | 10 | 0.15 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:217:GLY:H | 10 | 0.15 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:217:GLY:H | 10 | 0.15 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HA | 4 | 0.15 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HA | 4 | 0.15 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HA | 4 | 0.15 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HA | 4 | 0.15 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HA | 4 | 0.15 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HA | 4 | 0.15 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:H | 3 | 0.15 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:H | 3 | 0.15 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:H | 3 | 0.15 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:H | 3 | 0.15 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:H | 3 | 0.15 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:H | 3 | 0.15 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:H | 14 | 0.15 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:H | 14 | 0.15 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:H | 14 | 0.15 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:H | 14 | 0.15 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:H | 14 | 0.15 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:H | 14 | 0.15 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:H | 17 | 0.15 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:H | 17 | 0.15 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:H | 17 | 0.15 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:H | 17 | 0.15 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:H | 17 | 0.15 |
| (1,1595) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:H | 17 | 0.15 |
| (1,1582) | 1:A:211:ARG:HD2 | 1:A:213:MET:H | 15 | 0.15 |
| (1,1582) | 1:A:211:ARG:HD3 | 1:A:213:MET:H | 15 | 0.15 |
| (1,1556) | 1:A:209:LYS:HB2 | 1:A:209:LYS:HD2 | 3 | 0.15 |
| (1,1556) | 1:A:209:LYS:HB2 | 1:A:209:LYS:HD3 | 3 | 0.15 |
| (1,1556) | 1:A:209:LYS:HB2 | 1:A:209:LYS:HD2 | 9 | 0.15 |
| (1,1556) | 1:A:209:LYS:HB2 | 1:A:209:LYS:HD3 | 9 | 0.15 |
| (1,1556) | 1:A:209:LYS:HB2 | 1:A:209:LYS:HD2 | 10 | 0.15 |
| (1,1556) | 1:A:209:LYS:HB2 | 1:A:209:LYS:HD3 | 10 | 0.15 |
| (1,1556) | 1:A:209:LYS:HB2 | 1:A:209:LYS:HD2 | 14 | 0.15 |
| (1,1556) | 1:A:209:LYS:HB2 | 1:A:209:LYS:HD3 | 14 | 0.15 |
| (1,1556) | 1:A:209:LYS:HB2 | 1:A:209:LYS:HD2 | 19 | 0.15 |
| (1,1556) | 1:A:209:LYS:HB2 | 1:A:209:LYS:HD3 | 19 | 0.15 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:254:ARG:HB3 | 6 | 0.15 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:254:ARG:HB3 | 6 | 0.15 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:254:ARG:HB3 | 6 | 0.15 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:254:ARG:HB3 | 6 | 0.15 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:254:ARG:HB3 | 6 | 0.15 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:254:ARG:HB3 | 6 | 0.15 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:254:ARG:HB3 | 19 | 0.15 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:254:ARG:HB3 | 19 | 0.15 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:254:ARG:HB3 | 19 | 0.15 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:254:ARG:HB3 | 19 | 0.15 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:254:ARG:HB3 | 19 | 0.15 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:254:ARG:HB3 | 19 | 0.15 |
| (1,1427) | 1:A:226:ARG:H | 1:A:226:ARG:HD3 | 7 | 0.15 |
| (1,1427) | 1:A:226:ARG:H | 1:A:226:ARG:HD3 | 11 | 0.15 |
| (1,1427) | 1:A:226:ARG:H | 1:A:226:ARG:HD3 | 19 | 0.15 |
| (1,1427) | 1:A:226:ARG:H | 1:A:226:ARG:HD3 | 20 | 0.15 |
| (1,1421) | 1:A:199:VAL:H | 1:A:254:ARG:HB3 | 9 | 0.15 |
| (1,1363) | 1:A:229:ALA:HA | 1:A:231:ARG:HD3 | 9 | 0.15 |
| (1,1363) | 1:A:229:ALA:HA | 1:A:231:ARG:HD3 | 14 | 0.15 |
| (1,1308) | 1:A:236:LYS:HD2 | 1:A:237:GLY:H | 4 | 0.15 |
| (1,1308) | 1:A:236:LYS:HD3 | 1:A:237:GLY:H | 4 | 0.15 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG11 | 6 | 0.15 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG12 | 6 | 0.15 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG13 | 6 | 0.15 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG21 | 6 | 0.15 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG22 | 6 | 0.15 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG23 | 6 | 0.15 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG11 | 6 | 0.15 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG12 | 6 | 0.15 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG13 | 6 | 0.15 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG21 | 6 | 0.15 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG22 | 6 | 0.15 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG23 | 6 | 0.15 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG11 | 2 | 0.15 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG12 | 2 | 0.15 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG13 | 2 | 0.15 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG21 | 2 | 0.15 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG22 | 2 | 0.15 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG23 | 2 | 0.15 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG11 | 3 | 0.15 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG12 | 3 | 0.15 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG13 | 3 | 0.15 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG21 | 3 | 0.15 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG22 | 3 | 0.15 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG23 | 3 | 0.15 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG11 | 6 | 0.15 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG12 | 6 | 0.15 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG13 | 6 | 0.15 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG21 | 6 | 0.15 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG22 | 6 | 0.15 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG23 | 6 | 0.15 |
| (1,1116) | 1:A:190:SER:HB2 | 1:A:191:GLN:H | 19 | 0.15 |
| (1,1116) | 1:A:190:SER:HB3 | 1:A:191:GLN:H | 19 | 0.15 |
| (1,1106) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HG2 | 2 | 0.15 |
| (1,1106) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HG3 | 2 | 0.15 |
| (1,1095) | 1:A:174:GLY:HA2 | 1:A:234:ARG:HG2 | 1 | 0.15 |
| (1,1095) | 1:A:174:GLY:HA2 | 1:A:234:ARG:HG3 | 1 | 0.15 |
| (1,1095) | 1:A:174:GLY:HA3 | 1:A:234:ARG:HG2 | 1 | 0.15 |
| (1,1095) | 1:A:174:GLY:HA3 | 1:A:234:ARG:HG3 | 1 | 0.15 |
| (1,1095) | 1:A:174:GLY:HA2 | 1:A:234:ARG:HG2 | 8 | 0.15 |
| (1,1095) | 1:A:174:GLY:HA2 | 1:A:234:ARG:HG3 | 8 | 0.15 |
| (1,1095) | 1:A:174:GLY:HA3 | 1:A:234:ARG:HG2 | 8 | 0.15 |
| (1,1095) | 1:A:174:GLY:HA3 | 1:A:234:ARG:HG3 | 8 | 0.15 |
| (1,1077) | 1:A:169:GLU:HA | 1:A:169:GLU:HG2 | 16 | 0.15 |
| (1,1077) | 1:A:169:GLU:HA | 1:A:169:GLU:HG3 | 16 | 0.15 |
| (1,1072) | 1:A:228:GLN:HE21 | 1:A:229:ALA:H | 7 | 0.15 |
| (1,1063) | 1:A:191:GLN:HE21 | 1:A:242:GLY:HA2 | 16 | 0.15 |
| (2,24) | 1:A:251:LEU:H | 1:A:233:LEU:O | 1 | 0.14 |
| (2,24) | 1:A:251:LEU:H | 1:A:233:LEU:O | 16 | 0.14 |
| (2,17) | 1:A:230:GLY:H | 1:A:253:VAL:O | 6 | 0.14 |
| (1,979) | 1:A:244:ALA:HA | 1:A:245:GLY:H | 8 | 0.14 |
| (1,979) | 1:A:244:ALA:HA | 1:A:245:GLY:H | 17 | 0.14 |
| (1,976) | 1:A:241:PRO:HB2 | 1:A:242:GLY:H | 3 | 0.14 |
| (1,948) | 1:A:237:GLY:H | 1:A:248:ASP:HB2 | 14 | 0.14 |
| (1,932) | 1:A:236:LYS:H | 1:A:238:LYS:H | 3 | 0.14 |
| (1,907) | 1:A:209:LYS:HG3 | 1:A:210:VAL:H | 8 | 0.14 |
| (1,907) | 1:A:209:LYS:HG3 | 1:A:210:VAL:H | 11 | 0.14 |
| (1,898) | 1:A:191:GLN:HB3 | 1:A:248:ASP:H | 1 | 0.14 |
| (1,833) | 1:A:174:GLY:HA2 | 1:A:175:GLU:H | 8 | 0.14 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE1 | 1:A:215:LEU:HD21 | 11 | 0.14 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE1 | 1:A:215:LEU:HD22 | 11 | 0.14 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE1 | 1:A:215:LEU:HD23 | 11 | 0.14 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE2 | 1:A:215:LEU:HD21 | 11 | 0.14 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE2 | 1:A:215:LEU:HD22 | 11 | 0.14 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE2 | 1:A:215:LEU:HD23 | 11 | 0.14 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE3 | 1:A:215:LEU:HD21 | 11 | 0.14 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE3 | 1:A:215:LEU:HD22 | 11 | 0.14 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE3 | 1:A:215:LEU:HD23 | 11 | 0.14 |
| (1,788) | 1:A:235:LEU:HB3 | 1:A:236:LYS:H | 20 | 0.14 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD11 | 1:A:210:VAL:HG21 | 6 | 0.14 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD11 | 1:A:210:VAL:HG22 | 6 | 0.14 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD11 | 1:A:210:VAL:HG23 | 6 | 0.14 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD12 | 1:A:210:VAL:HG21 | 6 | 0.14 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD12 | 1:A:210:VAL:HG22 | 6 | 0.14 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD12 | 1:A:210:VAL:HG23 | 6 | 0.14 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD13 | 1:A:210:VAL:HG21 | 6 | 0.14 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD13 | 1:A:210:VAL:HG22 | 6 | 0.14 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD13 | 1:A:210:VAL:HG23 | 6 | 0.14 |
| (1,739) | 1:A:254:ARG:H | 1:A:254:ARG:HB3 | 20 | 0.14 |
| (1,729) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:216:GLU:H | 18 | 0.14 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD11 | 17 | 0.14 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD12 | 17 | 0.14 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD13 | 17 | 0.14 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD11 | 17 | 0.14 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD12 | 17 | 0.14 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD13 | 17 | 0.14 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD11 | 17 | 0.14 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD12 | 17 | 0.14 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD13 | 17 | 0.14 |
| (1,625) | 1:A:236:LYS:HG2 | 1:A:248:ASP:HB3 | 10 | 0.14 |
| (1,624) | 1:A:209:LYS:HD3 | 1:A:220:GLU:HB2 | 18 | 0.14 |
| (1,577) | 1:A:194:TYR:HD1 | 1:A:195:ALA:HA | 6 | 0.14 |
| (1,577) | 1:A:194:TYR:HD1 | 1:A:195:ALA:HA | 9 | 0.14 |
| (1,577) | 1:A:194:TYR:HD1 | 1:A:195:ALA:HA | 16 | 0.14 |
| (1,545) | 1:A:202:PRO:HD2 | 1:A:255:ILE:HG21 | 18 | 0.14 |
| (1,545) | 1:A:202:PRO:HD2 | 1:A:255:ILE:HG22 | 18 | 0.14 |
| (1,545) | 1:A:202:PRO:HD2 | 1:A:255:ILE:HG23 | 18 | 0.14 |
| (1,458) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:255:ILE:HD11 | 13 | 0.14 |
| (1,458) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:255:ILE:HD12 | 13 | 0.14 |
| (1,458) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:255:ILE:HD13 | 13 | 0.14 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD11 | 1:A:251:LEU:HB2 | 10 | 0.14 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD12 | 1:A:251:LEU:HB2 | 10 | 0.14 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD13 | 1:A:251:LEU:HB2 | 10 | 0.14 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB1 | 2 | 0.14 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB2 | 2 | 0.14 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB3 | 2 | 0.14 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB1 | 2 | 0.14 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB2 | 2 | 0.14 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB3 | 2 | 0.14 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB1 | 2 | 0.14 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB2 | 2 | 0.14 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB3 | 2 | 0.14 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB1 | 5 | 0.14 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB2 | 5 | 0.14 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB3 | 5 | 0.14 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB1 | 5 | 0.14 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB2 | 5 | 0.14 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB3 | 5 | 0.14 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB1 | 5 | 0.14 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB2 | 5 | 0.14 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB3 | 5 | 0.14 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB1 | 15 | 0.14 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB2 | 15 | 0.14 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB3 | 15 | 0.14 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB1 | 15 | 0.14 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB2 | 15 | 0.14 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB3 | 15 | 0.14 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB1 | 15 | 0.14 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB2 | 15 | 0.14 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB3 | 15 | 0.14 |
| (1,316) | 1:A:205:VAL:HA | 1:A:226:ARG:HD2 | 12 | 0.14 |
| (1,316) | 1:A:205:VAL:HA | 1:A:226:ARG:HD2 | 17 | 0.14 |
| (1,316) | 1:A:205:VAL:HA | 1:A:226:ARG:HD2 | 19 | 0.14 |
| (1,258) | 1:A:232:LYS:HG3 | 1:A:251:LEU:HA | 6 | 0.14 |
| (1,239) | 1:A:201:ALA:HA | 1:A:255:ILE:HD11 | 7 | 0.14 |
| (1,239) | 1:A:201:ALA:HA | 1:A:255:ILE:HD12 | 7 | 0.14 |
| (1,239) | 1:A:201:ALA:HA | 1:A:255:ILE:HD13 | 7 | 0.14 |
| (1,1717) | 1:A:172:THR:H | 1:A:219:VAL:HG21 | 4 | 0.14 |
| (1,1717) | 1:A:172:THR:H | 1:A:219:VAL:HG22 | 4 | 0.14 |
| (1,1717) | 1:A:172:THR:H | 1:A:219:VAL:HG23 | 4 | 0.14 |
| (1,1717) | 1:A:172:THR:H | 1:A:219:VAL:HG21 | 17 | 0.14 |
| (1,1717) | 1:A:172:THR:H | 1:A:219:VAL:HG22 | 17 | 0.14 |
| (1,1717) | 1:A:172:THR:H | 1:A:219:VAL:HG23 | 17 | 0.14 |
| (1,1712) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:177:GLN:HG2 | 12 | 0.14 |
| (1,1712) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:177:GLN:HG3 | 12 | 0.14 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:236:LYS:HA | 7 | 0.14 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:236:LYS:HA | 7 | 0.14 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:236:LYS:HA | 7 | 0.14 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:236:LYS:HA | 7 | 0.14 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:236:LYS:HA | 7 | 0.14 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:236:LYS:HA | 7 | 0.14 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:236:LYS:HA | 11 | 0.14 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:236:LYS:HA | 11 | 0.14 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:236:LYS:HA | 11 | 0.14 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:236:LYS:HA | 11 | 0.14 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:236:LYS:HA | 11 | 0.14 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:236:LYS:HA | 11 | 0.14 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:236:LYS:HA | 19 | 0.14 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:236:LYS:HA | 19 | 0.14 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:236:LYS:HA | 19 | 0.14 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:236:LYS:HA | 19 | 0.14 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:236:LYS:HA | 19 | 0.14 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:236:LYS:HA | 19 | 0.14 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:236:LYS:H | 14 | 0.14 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:236:LYS:H | 14 | 0.14 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:236:LYS:H | 14 | 0.14 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:236:LYS:H | 14 | 0.14 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:236:LYS:H | 14 | 0.14 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:236:LYS:H | 14 | 0.14 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD11 | 18 | 0.14 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD12 | 18 | 0.14 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD13 | 18 | 0.14 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD21 | 18 | 0.14 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD22 | 18 | 0.14 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD23 | 18 | 0.14 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD11 | 18 | 0.14 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD12 | 18 | 0.14 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD13 | 18 | 0.14 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD21 | 18 | 0.14 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD22 | 18 | 0.14 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD23 | 18 | 0.14 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD11 | 18 | 0.14 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD12 | 18 | 0.14 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD13 | 18 | 0.14 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD21 | 18 | 0.14 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD22 | 18 | 0.14 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD23 | 18 | 0.14 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD11 | 18 | 0.14 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD12 | 18 | 0.14 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD13 | 18 | 0.14 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD21 | 18 | 0.14 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD22 | 18 | 0.14 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD23 | 18 | 0.14 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD11 | 18 | 0.14 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD12 | 18 | 0.14 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD13 | 18 | 0.14 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD21 | 18 | 0.14 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD22 | 18 | 0.14 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD23 | 18 | 0.14 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD11 | 18 | 0.14 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD12 | 18 | 0.14 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD13 | 18 | 0.14 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD21 | 18 | 0.14 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD22 | 18 | 0.14 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD23 | 18 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD11 | 7 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD12 | 7 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD13 | 7 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD21 | 7 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD22 | 7 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD23 | 7 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD11 | 7 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD12 | 7 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD13 | 7 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD21 | 7 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD22 | 7 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD23 | 7 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD11 | 7 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD12 | 7 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD13 | 7 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD21 | 7 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD22 | 7 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD23 | 7 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD11 | 7 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD12 | 7 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD13 | 7 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD21 | 7 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD22 | 7 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD23 | 7 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD11 | 7 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD12 | 7 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD13 | 7 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD21 | 7 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD22 | 7 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD23 | 7 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD11 | 7 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD12 | 7 | 0.14 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD13 | 7 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD21 | 7 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD22 | 7 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD23 | 7 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD11 | 17 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD12 | 17 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD13 | 17 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD21 | 17 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD22 | 17 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD23 | 17 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD11 | 17 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD12 | 17 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD13 | 17 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD21 | 17 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD22 | 17 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD23 | 17 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD11 | 17 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD12 | 17 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD13 | 17 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD21 | 17 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD22 | 17 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD23 | 17 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD11 | 17 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD12 | 17 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD13 | 17 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD21 | 17 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD22 | 17 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD23 | 17 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD11 | 17 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD12 | 17 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD13 | 17 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD21 | 17 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD22 | 17 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD23 | 17 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD11 | 17 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD12 | 17 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD13 | 17 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD21 | 17 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD22 | 17 | 0.14 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD23 | 17 | 0.14 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HA | 6 | 0.14 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HA | 6 | 0.14 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HA | 6 | 0.14 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HA | 6 | 0.14 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HA | 6 | 0.14 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HA | 6 | 0.14 |
| (1,1582) | 1:A:211:ARG:HD2 | 1:A:213:MET:H | 20 | 0.14 |
| (1,1582) | 1:A:211:ARG:HD3 | 1:A:213:MET:H | 20 | 0.14 |
| (1,1556) | 1:A:209:LYS:HB2 | 1:A:209:LYS:HD2 | 4 | 0.14 |
| (1,1556) | 1:A:209:LYS:HB2 | 1:A:209:LYS:HD3 | 4 | 0.14 |
| (1,1556) | 1:A:209:LYS:HB2 | 1:A:209:LYS:HD2 | 5 | 0.14 |
| (1,1556) | 1:A:209:LYS:HB2 | 1:A:209:LYS:HD3 | 5 | 0.14 |
| (1,1556) | 1:A:209:LYS:HB2 | 1:A:209:LYS:HD2 | 6 | 0.14 |
| (1,1556) | 1:A:209:LYS:HB2 | 1:A:209:LYS:HD3 | 6 | 0.14 |
| (1,1556) | 1:A:209:LYS:HB2 | 1:A:209:LYS:HD2 | 13 | 0.14 |
| (1,1556) | 1:A:209:LYS:HB2 | 1:A:209:LYS:HD3 | 13 | 0.14 |
| (1,1556) | 1:A:209:LYS:HB2 | 1:A:209:LYS:HD2 | 15 | 0.14 |
| (1,1556) | 1:A:209:LYS:HB2 | 1:A:209:LYS:HD3 | 15 | 0.14 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:254:ARG:HB3 | 4 | 0.14 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:254:ARG:HB3 | 4 | 0.14 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:254:ARG:HB3 | 4 | 0.14 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:254:ARG:HB3 | 4 | 0.14 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:254:ARG:HB3 | 4 | 0.14 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:254:ARG:HB3 | 4 | 0.14 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:254:ARG:HB3 | 5 | 0.14 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:254:ARG:HB3 | 5 | 0.14 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:254:ARG:HB3 | 5 | 0.14 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:254:ARG:HB3 | 5 | 0.14 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:254:ARG:HB3 | 5 | 0.14 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:254:ARG:HB3 | 5 | 0.14 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:254:ARG:HB3 | 9 | 0.14 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:254:ARG:HB3 | 9 | 0.14 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:254:ARG:HB3 | 9 | 0.14 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:254:ARG:HB3 | 9 | 0.14 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:254:ARG:HB3 | 9 | 0.14 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:254:ARG:HB3 | 9 | 0.14 |
| (1,1483) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:252:GLU:HG2 | 3 | 0.14 |
| (1,1483) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:252:GLU:HG3 | 3 | 0.14 |
| (1,1445) | 1:A:197:LEU:H | 1:A:213:MET:H | 19 | 0.14 |
| (1,1435) | 1:A:208:GLY:H | 1:A:223:VAL:H | 3 | 0.14 |
| (1,1427) | 1:A:226:ARG:H | 1:A:226:ARG:HD3 | 5 | 0.14 |
| (1,1427) | 1:A:226:ARG:H | 1:A:226:ARG:HD3 | 9 | 0.14 |
| (1,1424) | 1:A:231:ARG:HD2 | 1:A:232:LYS:H | 17 | 0.14 |
| (1,1421) | 1:A:199:VAL:H | 1:A:254:ARG:HB3 | 13 | 0.14 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1394) | 1:A:242:GLY:HA3 | 1:A:246:ARG:HG3 | 2 | 0.14 |
| (1,1383) | 1:A:253:VAL:HG11 | 1:A:254:ARG:HB3 | 8 | 0.14 |
| (1,1383) | 1:A:253:VAL:HG12 | 1:A:254:ARG:HB3 | 8 | 0.14 |
| (1,1383) | 1:A:253:VAL:HG13 | 1:A:254:ARG:HB3 | 8 | 0.14 |
| (1,1373) | 1:A:211:ARG:HB2 | 1:A:220:GLU:HG2 | 8 | 0.14 |
| (1,1373) | 1:A:211:ARG:HB2 | 1:A:220:GLU:HG2 | 16 | 0.14 |
| (1,1363) | 1:A:229:ALA:HA | 1:A:231:ARG:HD3 | 10 | 0.14 |
| (1,1310) | 1:A:236:LYS:HE2 | 1:A:237:GLY:H | 12 | 0.14 |
| (1,1310) | 1:A:236:LYS:HE3 | 1:A:237:GLY:H | 12 | 0.14 |
| (1,1310) | 1:A:236:LYS:HE2 | 1:A:237:GLY:H | 14 | 0.14 |
| (1,1310) | 1:A:236:LYS:HE3 | 1:A:237:GLY:H | 14 | 0.14 |
| (1,1295) | 1:A:234:ARG:HD2 | 1:A:250:TYR:HD2 | 7 | 0.14 |
| (1,1295) | 1:A:234:ARG:HD3 | 1:A:250:TYR:HD2 | 7 | 0.14 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG11 | 1 | 0.14 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG12 | 1 | 0.14 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG13 | 1 | 0.14 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG21 | 1 | 0.14 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG22 | 1 | 0.14 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG23 | 1 | 0.14 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG11 | 1 | 0.14 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG12 | 1 | 0.14 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG13 | 1 | 0.14 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG21 | 1 | 0.14 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG22 | 1 | 0.14 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG23 | 1 | 0.14 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG11 | 15 | 0.14 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG12 | 15 | 0.14 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG13 | 15 | 0.14 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG21 | 15 | 0.14 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG22 | 15 | 0.14 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG23 | 15 | 0.14 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG11 | 15 | 0.14 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG12 | 15 | 0.14 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG13 | 15 | 0.14 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG21 | 15 | 0.14 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG22 | 15 | 0.14 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG23 | 15 | 0.14 |
| (1,1226) | 1:A:211:ARG:HD2 | 1:A:218:PRO:HA | 19 | 0.14 |
| (1,1226) | 1:A:211:ARG:HD3 | 1:A:218:PRO:HA | 19 | 0.14 |
| (1,1225) | 1:A:211:ARG:HD2 | 1:A:212:ALA:H | 19 | 0.14 |
| (1,1225) | 1:A:211:ARG:HD3 | 1:A:212:ALA:H | 19 | 0.14 |
| (1,1201) | 1:A:209:LYS:HE2 | 1:A:222:ALA:HA | 11 | 0.14 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1201) | 1:A:209:LYS:HE3 | 1:A:222:ALA:HA | 11 | 0.14 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG11 | 5 | 0.14 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG12 | 5 | 0.14 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG13 | 5 | 0.14 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG21 | 5 | 0.14 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG22 | 5 | 0.14 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG23 | 5 | 0.14 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG11 | 20 | 0.14 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG12 | 20 | 0.14 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG13 | 20 | 0.14 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG21 | 20 | 0.14 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG22 | 20 | 0.14 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG23 | 20 | 0.14 |
| (1,1151) | 1:A:199:VAL:HA | 1:A:210:VAL:HG11 | 11 | 0.14 |
| (1,1151) | 1:A:199:VAL:HA | 1:A:210:VAL:HG12 | 11 | 0.14 |
| (1,1151) | 1:A:199:VAL:HA | 1:A:210:VAL:HG13 | 11 | 0.14 |
| (1,1151) | 1:A:199:VAL:HA | 1:A:210:VAL:HG21 | 11 | 0.14 |
| (1,1151) | 1:A:199:VAL:HA | 1:A:210:VAL:HG22 | 11 | 0.14 |
| (1,1151) | 1:A:199:VAL:HA | 1:A:210:VAL:HG23 | 11 | 0.14 |
| (1,1095) | 1:A:174:GLY:HA2 | 1:A:234:ARG:HG2 | 11 | 0.14 |
| (1,1095) | 1:A:174:GLY:HA2 | 1:A:234:ARG:HG3 | 11 | 0.14 |
| (1,1095) | 1:A:174:GLY:HA3 | 1:A:234:ARG:HG2 | 11 | 0.14 |
| (1,1095) | 1:A:174:GLY:HA3 | 1:A:234:ARG:HG3 | 11 | 0.14 |
| (1,1072) | 1:A:228:GLN:HE21 | 1:A:229:ALA:H | 18 | 0.14 |
| (1,1039) | 1:A:232:LYS:HG3 | 1:A:252:GLU:H | 5 | 0.14 |
| (1,1003) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:198:ASP:H | 12 | 0.14 |
| (1,1003) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:198:ASP:H | 17 | 0.14 |
| (2,24) | 1:A:251:LEU:H | 1:A:233:LEU:O | 3 | 0.13 |
| (2,24) | 1:A:251:LEU:H | 1:A:233:LEU:O | 4 | 0.13 |
| (2,24) | 1:A:251:LEU:H | 1:A:233:LEU:O | 10 | 0.13 |
| (2,24) | 1:A:251:LEU:H | 1:A:233:LEU:O | 20 | 0.13 |
| (1,995) | 1:A:246:ARG:HG3 | 1:A:247:GLY:H | 9 | 0.13 |
| (1,979) | 1:A:244:ALA:HA | 1:A:245:GLY:H | 14 | 0.13 |
| (1,970) | 1:A:242:GLY:H | 1:A:246:ARG:H | 16 | 0.13 |
| (1,948) | 1:A:237:GLY:H | 1:A:248:ASP:HB2 | 16 | 0.13 |
| (1,898) | 1:A:191:GLN:HB3 | 1:A:248:ASP:H | 15 | 0.13 |
| (1,889) | 1:A:211:ARG:HA | 1:A:219:VAL:H | 4 | 0.13 |
| (1,871) | 1:A:248:ASP:HB2 | 1:A:249:LEU:H | 16 | 0.13 |
| (1,833) | 1:A:174:GLY:HA2 | 1:A:175:GLU:H | 9 | 0.13 |
| (1,814) | 1:A:250:TYR:HD2 | 1:A:251:LEU:H | 8 | 0.13 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE1 | 1:A:215:LEU:HD21 | 14 | 0.13 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE1 | 1:A:215:LEU:HD22 | 14 | 0.13 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE1 | 1:A:215:LEU:HD23 | 14 | 0.13 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE2 | 1:A:215:LEU:HD21 | 14 | 0.13 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE2 | 1:A:215:LEU:HD22 | 14 | 0.13 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE2 | 1:A:215:LEU:HD23 | 14 | 0.13 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE3 | 1:A:215:LEU:HD21 | 14 | 0.13 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE3 | 1:A:215:LEU:HD22 | 14 | 0.13 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE3 | 1:A:215:LEU:HD23 | 14 | 0.13 |
| (1,792) | 1:A:172:THR:HG21 | 1:A:173:ALA:H | 1 | 0.13 |
| (1,792) | 1:A:172:THR:HG22 | 1:A:173:ALA:H | 1 | 0.13 |
| (1,792) | 1:A:172:THR:HG23 | 1:A:173:ALA:H | 1 | 0.13 |
| (1,780) | 1:A:197:LEU:H | 1:A:252:GLU:H | 12 | 0.13 |
| (1,780) | 1:A:197:LEU:H | 1:A:252:GLU:H | 20 | 0.13 |
| (1,731) | 1:A:176:TRP:HE1 | 1:A:223:VAL:HG21 | 18 | 0.13 |
| (1,731) | 1:A:176:TRP:HE1 | 1:A:223:VAL:HG22 | 18 | 0.13 |
| (1,731) | 1:A:176:TRP:HE1 | 1:A:223:VAL:HG23 | 18 | 0.13 |
| (1,729) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:216:GLU:H | 1 | 0.13 |
| (1,689) | 1:A:215:LEU:HB2 | 1:A:240:PHE:HD1 | 13 | 0.13 |
| (1,663) | 1:A:205:VAL:HA | 1:A:226:ARG:HD3 | 17 | 0.13 |
| (1,655) | 1:A:172:THR:HB | 1:A:219:VAL:HB | 4 | 0.13 |
| (1,655) | 1:A:172:THR:HB | 1:A:219:VAL:HB | 20 | 0.13 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG11 | 1:A:253:VAL:HG11 | 11 | 0.13 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG11 | 1:A:253:VAL:HG12 | 11 | 0.13 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG11 | 1:A:253:VAL:HG13 | 11 | 0.13 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG12 | 1:A:253:VAL:HG11 | 11 | 0.13 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG12 | 1:A:253:VAL:HG12 | 11 | 0.13 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG12 | 1:A:253:VAL:HG13 | 11 | 0.13 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG13 | 1:A:253:VAL:HG11 | 11 | 0.13 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG13 | 1:A:253:VAL:HG12 | 11 | 0.13 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG13 | 1:A:253:VAL:HG13 | 11 | 0.13 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD11 | 16 | 0.13 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD12 | 16 | 0.13 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD13 | 16 | 0.13 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD11 | 16 | 0.13 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD12 | 16 | 0.13 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD13 | 16 | 0.13 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD11 | 16 | 0.13 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD12 | 16 | 0.13 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD13 | 16 | 0.13 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD11 | 20 | 0.13 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD12 | 20 | 0.13 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD13 | 20 | 0.13 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD11 | 20 | 0.13 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD12 | 20 | 0.13 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD13 | 20 | 0.13 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD11 | 20 | 0.13 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD12 | 20 | 0.13 |
| (1,628) | 1:A:223:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD13 | 20 | 0.13 |
| (1,625) | 1:A:236:LYS:HG2 | 1:A:248:ASP:HB3 | 4 | 0.13 |
| (1,624) | 1:A:209:LYS:HD3 | 1:A:220:GLU:HB2 | 13 | 0.13 |
| (1,612) | 1:A:225:PRO:HB2 | 1:A:226:ARG:HB2 | 4 | 0.13 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG21 | 1:A:256:THR:HG21 | 13 | 0.13 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG21 | 1:A:256:THR:HG22 | 13 | 0.13 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG21 | 1:A:256:THR:HG23 | 13 | 0.13 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG22 | 1:A:256:THR:HG21 | 13 | 0.13 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG22 | 1:A:256:THR:HG22 | 13 | 0.13 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG22 | 1:A:256:THR:HG23 | 13 | 0.13 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG23 | 1:A:256:THR:HG21 | 13 | 0.13 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG23 | 1:A:256:THR:HG22 | 13 | 0.13 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG23 | 1:A:256:THR:HG23 | 13 | 0.13 |
| (1,538) | 1:A:254:ARG:HG3 | 1:A:256:THR:HG21 | 13 | 0.13 |
| (1,538) | 1:A:254:ARG:HG3 | 1:A:256:THR:HG22 | 13 | 0.13 |
| (1,538) | 1:A:254:ARG:HG3 | 1:A:256:THR:HG23 | 13 | 0.13 |
| (1,345) | 1:A:191:GLN:HG2 | 1:A:242:GLY:HA2 | 3 | 0.13 |
| (1,316) | 1:A:205:VAL:HA | 1:A:226:ARG:HD2 | 1 | 0.13 |
| (1,316) | 1:A:205:VAL:HA | 1:A:226:ARG:HD2 | 15 | 0.13 |
| (1,258) | 1:A:232:LYS:HG3 | 1:A:251:LEU:HA | 4 | 0.13 |
| (1,258) | 1:A:232:LYS:HG3 | 1:A:251:LEU:HA | 18 | 0.13 |
| (1,1712) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:177:GLN:HG2 | 7 | 0.13 |
| (1,1712) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:177:GLN:HG3 | 7 | 0.13 |
| (1,1708) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:224:PRO:HB2 | 4 | 0.13 |
| (1,1708) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:224:PRO:HB3 | 4 | 0.13 |
| (1,1685) | 1:A:248:ASP:HB2 | 1:A:250:TYR:HE2 | 7 | 0.13 |
| (1,1685) | 1:A:248:ASP:HB3 | 1:A:250:TYR:HE2 | 7 | 0.13 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD11 | 14 | 0.13 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD12 | 14 | 0.13 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD13 | 14 | 0.13 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD21 | 14 | 0.13 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD22 | 14 | 0.13 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD23 | 14 | 0.13 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD11 | 17 | 0.13 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD12 | 17 | 0.13 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD13 | 17 | 0.13 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD21 | 17 | 0.13 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD22 | 17 | 0.13 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD23 | 17 | 0.13 |
| (1,1670) | 1:A:236:LYS:HG2 | 1:A:248:ASP:HA | 15 | 0.13 |
| (1,1670) | 1:A:236:LYS:HG3 | 1:A:248:ASP:HA | 15 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:236:LYS:HA | 1 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:236:LYS:HA | 1 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:236:LYS:HA | 1 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:236:LYS:HA | 1 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:236:LYS:HA | 1 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:236:LYS:HA | 1 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:236:LYS:HA | 3 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:236:LYS:HA | 3 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:236:LYS:HA | 3 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:236:LYS:HA | 3 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:236:LYS:HA | 3 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:236:LYS:HA | 3 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:236:LYS:HA | 16 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:236:LYS:HA | 16 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:236:LYS:HA | 16 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:236:LYS:HA | 16 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:236:LYS:HA | 16 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:236:LYS:HA | 16 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:236:LYS:HA | 20 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:236:LYS:HA | 20 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:236:LYS:HA | 20 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:236:LYS:HA | 20 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:236:LYS:HA | 20 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:236:LYS:HA | 20 | 0.13 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:236:LYS:H | 2 | 0.13 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:236:LYS:H | 2 | 0.13 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:236:LYS:H | 2 | 0.13 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:236:LYS:H | 2 | 0.13 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:236:LYS:H | 2 | 0.13 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:236:LYS:H | 2 | 0.13 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:236:LYS:H | 19 | 0.13 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:236:LYS:H | 19 | 0.13 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:236:LYS:H | 19 | 0.13 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:236:LYS:H | 19 | 0.13 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:236:LYS:H | 19 | 0.13 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:236:LYS:H | 19 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD11 | 3 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD12 | 3 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD13 | 3 | 0.13 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD21 | 3 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD22 | 3 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD23 | 3 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD11 | 3 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD12 | 3 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD13 | 3 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD21 | 3 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD22 | 3 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD23 | 3 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD11 | 3 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD12 | 3 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD13 | 3 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD21 | 3 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD22 | 3 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD23 | 3 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD11 | 3 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD12 | 3 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD13 | 3 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD21 | 3 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD22 | 3 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD23 | 3 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD11 | 3 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD12 | 3 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD13 | 3 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD21 | 3 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD22 | 3 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD23 | 3 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD11 | 3 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD12 | 3 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD13 | 3 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD21 | 3 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD22 | 3 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD23 | 3 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD11 | 4 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD12 | 4 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD13 | 4 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD21 | 4 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD22 | 4 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD23 | 4 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD11 | 4 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD12 | 4 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD13 | 4 | 0.13 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD21 | 4 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD22 | 4 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD23 | 4 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD11 | 4 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD12 | 4 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD13 | 4 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD21 | 4 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD22 | 4 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD23 | 4 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD11 | 4 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD12 | 4 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD13 | 4 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD21 | 4 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD22 | 4 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD23 | 4 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD11 | 4 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD12 | 4 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD13 | 4 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD21 | 4 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD22 | 4 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD23 | 4 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD11 | 4 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD12 | 4 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD13 | 4 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD21 | 4 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD22 | 4 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD23 | 4 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD11 | 18 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD12 | 18 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD13 | 18 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD21 | 18 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD22 | 18 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD23 | 18 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD11 | 18 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD12 | 18 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD13 | 18 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD21 | 18 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD22 | 18 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD23 | 18 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD11 | 18 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD12 | 18 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD13 | 18 | 0.13 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD21 | 18 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD22 | 18 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD23 | 18 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD11 | 18 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD12 | 18 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD13 | 18 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD21 | 18 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD22 | 18 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD23 | 18 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD11 | 18 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD12 | 18 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD13 | 18 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD21 | 18 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD22 | 18 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD23 | 18 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD11 | 18 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD12 | 18 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD13 | 18 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD21 | 18 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD22 | 18 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD23 | 18 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD11 | 19 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD12 | 19 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD13 | 19 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD21 | 19 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD22 | 19 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD23 | 19 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD11 | 19 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD12 | 19 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD13 | 19 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD21 | 19 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD22 | 19 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD23 | 19 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD11 | 19 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD12 | 19 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD13 | 19 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD21 | 19 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD22 | 19 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD23 | 19 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD11 | 19 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD12 | 19 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD13 | 19 | 0.13 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD21 | 19 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD22 | 19 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD23 | 19 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD11 | 19 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD12 | 19 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD13 | 19 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD21 | 19 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD22 | 19 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD23 | 19 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD11 | 19 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD12 | 19 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD13 | 19 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD21 | 19 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD22 | 19 | 0.13 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD23 | 19 | 0.13 |
| (1,16) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:223:VAL:HG21 | 13 | 0.13 |
| (1,16) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:223:VAL:HG22 | 13 | 0.13 |
| (1,16) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:223:VAL:HG23 | 13 | 0.13 |
| (1,16) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:223:VAL:HG21 | 13 | 0.13 |
| (1,16) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:223:VAL:HG22 | 13 | 0.13 |
| (1,16) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:223:VAL:HG23 | 13 | 0.13 |
| (1,16) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:223:VAL:HG21 | 13 | 0.13 |
| (1,16) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:223:VAL:HG22 | 13 | 0.13 |
| (1,16) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:223:VAL:HG23 | 13 | 0.13 |
| (1,1569) | 1:A:209:LYS:HD2 | 1:A:221:VAL:H | 18 | 0.13 |
| (1,1569) | 1:A:209:LYS:HD3 | 1:A:221:VAL:H | 18 | 0.13 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:254:ARG:HB3 | 3 | 0.13 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:254:ARG:HB3 | 3 | 0.13 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:254:ARG:HB3 | 3 | 0.13 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:254:ARG:HB3 | 3 | 0.13 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:254:ARG:HB3 | 3 | 0.13 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:254:ARG:HB3 | 3 | 0.13 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:254:ARG:HB3 | 7 | 0.13 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:254:ARG:HB3 | 7 | 0.13 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:254:ARG:HB3 | 7 | 0.13 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:254:ARG:HB3 | 7 | 0.13 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:254:ARG:HB3 | 7 | 0.13 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:254:ARG:HB3 | 7 | 0.13 |
| (1,1458) | 1:A:174:GLY:H | 1:A:235:LEU:HD11 | 15 | 0.13 |
| (1,1458) | 1:A:174:GLY:H | 1:A:235:LEU:HD12 | 15 | 0.13 |
| (1,1458) | 1:A:174:GLY:H | 1:A:235:LEU:HD13 | 15 | 0.13 |
| (1,1458) | 1:A:174:GLY:H | 1:A:235:LEU:HD21 | 15 | 0.13 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1458) | 1:A:174:GLY:H | 1:A:235:LEU:HD22 | 15 | 0.13 |
| (1,1458) | 1:A:174:GLY:H | 1:A:235:LEU:HD23 | 15 | 0.13 |
| (1,1445) | 1:A:197:LEU:H | 1:A:213:MET:H | 10 | 0.13 |
| (1,1427) | 1:A:226:ARG:H | 1:A:226:ARG:HD3 | 15 | 0.13 |
| (1,1427) | 1:A:226:ARG:H | 1:A:226:ARG:HD3 | 16 | 0.13 |
| (1,1424) | 1:A:231:ARG:HD2 | 1:A:232:LYS:H | 3 | 0.13 |
| (1,1424) | 1:A:231:ARG:HD2 | 1:A:232:LYS:H | 7 | 0.13 |
| (1,1424) | 1:A:231:ARG:HD2 | 1:A:232:LYS:H | 20 | 0.13 |
| (1,1397) | 1:A:211:ARG:HG2 | 1:A:220:GLU:HG3 | 4 | 0.13 |
| (1,1394) | 1:A:242:GLY:HA3 | 1:A:246:ARG:HG3 | 13 | 0.13 |
| (1,1383) | 1:A:253:VAL:HG11 | 1:A:254:ARG:HB3 | 14 | 0.13 |
| (1,1383) | 1:A:253:VAL:HG12 | 1:A:254:ARG:HB3 | 14 | 0.13 |
| (1,1383) | 1:A:253:VAL:HG13 | 1:A:254:ARG:HB3 | 14 | 0.13 |
| (1,1373) | 1:A:211:ARG:HB2 | 1:A:220:GLU:HG2 | 3 | 0.13 |
| (1,1363) | 1:A:229:ALA:HA | 1:A:231:ARG:HD3 | 6 | 0.13 |
| (1,128) | 1:A:218:PRO:HG2 | 1:A:219:VAL:HA | 3 | 0.13 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG11 | 10 | 0.13 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG12 | 10 | 0.13 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG13 | 10 | 0.13 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG21 | 10 | 0.13 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG22 | 10 | 0.13 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG23 | 10 | 0.13 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG11 | 10 | 0.13 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG12 | 10 | 0.13 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG13 | 10 | 0.13 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG21 | 10 | 0.13 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG22 | 10 | 0.13 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG23 | 10 | 0.13 |
| (1,1201) | 1:A:209:LYS:HE2 | 1:A:222:ALA:HA | 3 | 0.13 |
| (1,1201) | 1:A:209:LYS:HE3 | 1:A:222:ALA:HA | 3 | 0.13 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG11 | 12 | 0.13 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG12 | 12 | 0.13 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG13 | 12 | 0.13 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG21 | 12 | 0.13 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG22 | 12 | 0.13 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:210:VAL:HG23 | 12 | 0.13 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG11 | 12 | 0.13 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG12 | 12 | 0.13 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG13 | 12 | 0.13 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG21 | 12 | 0.13 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG22 | 12 | 0.13 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:210:VAL:HG23 | 12 | 0.13 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG11 | 12 | 0.13 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG12 | 12 | 0.13 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG13 | 12 | 0.13 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG21 | 12 | 0.13 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG22 | 12 | 0.13 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:210:VAL:HG23 | 12 | 0.13 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG11 | 12 | 0.13 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG12 | 12 | 0.13 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG13 | 12 | 0.13 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG21 | 12 | 0.13 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG22 | 12 | 0.13 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:210:VAL:HG23 | 12 | 0.13 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG11 | 12 | 0.13 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG12 | 12 | 0.13 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG13 | 12 | 0.13 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG21 | 12 | 0.13 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG22 | 12 | 0.13 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:210:VAL:HG23 | 12 | 0.13 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG11 | 12 | 0.13 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG12 | 12 | 0.13 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG13 | 12 | 0.13 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG21 | 12 | 0.13 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG22 | 12 | 0.13 |
| (1,1167) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:210:VAL:HG23 | 12 | 0.13 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG11 | 1 | 0.13 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG12 | 1 | 0.13 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG13 | 1 | 0.13 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG21 | 1 | 0.13 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG22 | 1 | 0.13 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG23 | 1 | 0.13 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG11 | 8 | 0.13 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG12 | 8 | 0.13 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG13 | 8 | 0.13 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG21 | 8 | 0.13 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG22 | 8 | 0.13 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG23 | 8 | 0.13 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG11 | 11 | 0.13 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG12 | 11 | 0.13 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG13 | 11 | 0.13 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG21 | 11 | 0.13 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG22 | 11 | 0.13 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG23 | 11 | 0.13 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG11 | 15 | 0.13 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG12 | 15 | 0.13 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG13 | 15 | 0.13 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG21 | 15 | 0.13 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG22 | 15 | 0.13 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG23 | 15 | 0.13 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG11 | 16 | 0.13 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG12 | 16 | 0.13 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG13 | 16 | 0.13 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG21 | 16 | 0.13 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG22 | 16 | 0.13 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG23 | 16 | 0.13 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD11 | 15 | 0.13 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD12 | 15 | 0.13 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD13 | 15 | 0.13 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD21 | 15 | 0.13 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD22 | 15 | 0.13 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD23 | 15 | 0.13 |
| (1,1126) | 1:A:194:TYR:HD1 | 1:A:232:LYS:HE2 | 15 | 0.13 |
| (1,1126) | 1:A:194:TYR:HD1 | 1:A:232:LYS:HE3 | 15 | 0.13 |
| (1,1123) | 1:A:191:GLN:HG3 | 1:A:247:GLY:HA2 | 18 | 0.13 |
| (1,1123) | 1:A:191:GLN:HG3 | 1:A:247:GLY:HA3 | 18 | 0.13 |
| (1,1105) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HB2 | 17 | 0.13 |
| (1,1105) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:179:LYS:HB3 | 17 | 0.13 |
| (1,1098) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:175:GLU:HB2 | 7 | 0.13 |
| (1,1098) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:175:GLU:HB3 | 7 | 0.13 |
| (1,1077) | 1:A:169:GLU:HA | 1:A:169:GLU:HG2 | 12 | 0.13 |
| (1,1077) | 1:A:169:GLU:HA | 1:A:169:GLU:HG3 | 12 | 0.13 |
| (1,1077) | 1:A:169:GLU:HA | 1:A:169:GLU:HG2 | 14 | 0.13 |
| (1,1077) | 1:A:169:GLU:HA | 1:A:169:GLU:HG3 | 14 | 0.13 |
| (1,1067) | 1:A:228:GLN:HB2 | 1:A:228:GLN:HE21 | 11 | 0.13 |
| (1,1067) | 1:A:228:GLN:HB2 | 1:A:228:GLN:HE21 | 19 | 0.13 |
| (1,1063) | 1:A:191:GLN:HE21 | 1:A:242:GLY:HA2 | 11 | 0.13 |
| (1,1063) | 1:A:191:GLN:HE21 | 1:A:242:GLY:HA2 | 20 | 0.13 |
| (1,1014) | 1:A:196:THR:HG21 | 1:A:252:GLU:H | 7 | 0.13 |
| (1,1014) | 1:A:196:THR:HG22 | 1:A:252:GLU:H | 7 | 0.13 |
| (1,1014) | 1:A:196:THR:HG23 | 1:A:252:GLU:H | 7 | 0.13 |
| (1,1003) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:198:ASP:H | 6 | 0.13 |
| (1,1003) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:198:ASP:H | 19 | 0.13 |
| (3,1) | 1:A:228:GLN:OE1 | 1:A:231:ARG:HH11 | 2 | 0.12 |
| (2,24) | 1:A:251:LEU:H | 1:A:233:LEU:O | 2 | 0.12 |
| (2,24) | 1:A:251:LEU:H | 1:A:233:LEU:O | 13 | 0.12 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (2,10) | 1:A:210:VAL:H | 1:A:221:VAL:O | 19 | 0.12 |
| (1,976) | 1:A:241:PRO:HB2 | 1:A:242:GLY:H | 16 | 0.12 |
| (1,948) | 1:A:237:GLY:H | 1:A:248:ASP:HB2 | 1 | 0.12 |
| (1,948) | 1:A:237:GLY:H | 1:A:248:ASP:HB2 | 6 | 0.12 |
| (1,948) | 1:A:237:GLY:H | 1:A:248:ASP:HB2 | 10 | 0.12 |
| (1,934) | 1:A:238:LYS:H | 1:A:249:LEU:H | 19 | 0.12 |
| (1,907) | 1:A:209:LYS:HG3 | 1:A:210:VAL:H | 3 | 0.12 |
| (1,898) | 1:A:191:GLN:HB3 | 1:A:248:ASP:H | 2 | 0.12 |
| (1,898) | 1:A:191:GLN:HB3 | 1:A:248:ASP:H | 16 | 0.12 |
| (1,838) | 1:A:209:LYS:H | 1:A:209:LYS:HB3 | 1 | 0.12 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE1 | 1:A:215:LEU:HD21 | 18 | 0.12 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE1 | 1:A:215:LEU:HD22 | 18 | 0.12 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE1 | 1:A:215:LEU:HD23 | 18 | 0.12 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE2 | 1:A:215:LEU:HD21 | 18 | 0.12 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE2 | 1:A:215:LEU:HD22 | 18 | 0.12 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE2 | 1:A:215:LEU:HD23 | 18 | 0.12 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE3 | 1:A:215:LEU:HD21 | 18 | 0.12 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE3 | 1:A:215:LEU:HD22 | 18 | 0.12 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE3 | 1:A:215:LEU:HD23 | 18 | 0.12 |
| (1,767) | 1:A:232:LYS:HG2 | 1:A:233:LEU:H | 15 | 0.12 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD11 | 1:A:210:VAL:HG21 | 20 | 0.12 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD11 | 1:A:210:VAL:HG22 | 20 | 0.12 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD11 | 1:A:210:VAL:HG23 | 20 | 0.12 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD12 | 1:A:210:VAL:HG21 | 20 | 0.12 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD12 | 1:A:210:VAL:HG22 | 20 | 0.12 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD12 | 1:A:210:VAL:HG23 | 20 | 0.12 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD13 | 1:A:210:VAL:HG21 | 20 | 0.12 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD13 | 1:A:210:VAL:HG22 | 20 | 0.12 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD13 | 1:A:210:VAL:HG23 | 20 | 0.12 |
| (1,708) | 1:A:250:TYR:H | 1:A:250:TYR:HD2 | 8 | 0.12 |
| (1,700) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:221:VAL:HG11 | 18 | 0.12 |
| (1,700) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:221:VAL:HG12 | 18 | 0.12 |
| (1,700) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:221:VAL:HG13 | 18 | 0.12 |
| (1,663) | 1:A:205:VAL:HA | 1:A:226:ARG:HD3 | 4 | 0.12 |
| (1,663) | 1:A:205:VAL:HA | 1:A:226:ARG:HD3 | 8 | 0.12 |
| (1,663) | 1:A:205:VAL:HA | 1:A:226:ARG:HD3 | 13 | 0.12 |
| (1,655) | 1:A:172:THR:HB | 1:A:219:VAL:HB | 10 | 0.12 |
| (1,625) | 1:A:236:LYS:HG2 | 1:A:248:ASP:HB3 | 8 | 0.12 |
| (1,624) | 1:A:209:LYS:HD3 | 1:A:220:GLU:HB2 | 5 | 0.12 |
| (1,624) | 1:A:209:LYS:HD3 | 1:A:220:GLU:HB2 | 10 | 0.12 |
| (1,624) | 1:A:209:LYS:HD3 | 1:A:220:GLU:HB2 | 15 | 0.12 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG21 | 1:A:256:THR:HG21 | 9 | 0.12 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG21 | 1:A:256:THR:HG22 | 9 | 0.12 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG21 | 1:A:256:THR:HG23 | 9 | 0.12 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG22 | 1:A:256:THR:HG21 | 9 | 0.12 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG22 | 1:A:256:THR:HG22 | 9 | 0.12 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG22 | 1:A:256:THR:HG23 | 9 | 0.12 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG23 | 1:A:256:THR:HG21 | 9 | 0.12 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG23 | 1:A:256:THR:HG22 | 9 | 0.12 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG23 | 1:A:256:THR:HG23 | 9 | 0.12 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG21 | 1:A:256:THR:HG21 | 10 | 0.12 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG21 | 1:A:256:THR:HG22 | 10 | 0.12 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG21 | 1:A:256:THR:HG23 | 10 | 0.12 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG22 | 1:A:256:THR:HG21 | 10 | 0.12 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG22 | 1:A:256:THR:HG22 | 10 | 0.12 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG22 | 1:A:256:THR:HG23 | 10 | 0.12 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG23 | 1:A:256:THR:HG21 | 10 | 0.12 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG23 | 1:A:256:THR:HG22 | 10 | 0.12 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG23 | 1:A:256:THR:HG23 | 10 | 0.12 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG21 | 1:A:256:THR:HG21 | 11 | 0.12 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG21 | 1:A:256:THR:HG22 | 11 | 0.12 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG21 | 1:A:256:THR:HG23 | 11 | 0.12 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG22 | 1:A:256:THR:HG21 | 11 | 0.12 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG22 | 1:A:256:THR:HG22 | 11 | 0.12 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG22 | 1:A:256:THR:HG23 | 11 | 0.12 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG23 | 1:A:256:THR:HG21 | 11 | 0.12 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG23 | 1:A:256:THR:HG22 | 11 | 0.12 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG23 | 1:A:256:THR:HG23 | 11 | 0.12 |
| (1,595) | 1:A:191:GLN:HG2 | 1:A:246:ARG:HA | 5 | 0.12 |
| (1,59) | 1:A:172:THR:HG21 | 1:A:235:LEU:HD21 | 10 | 0.12 |
| (1,59) | 1:A:172:THR:HG21 | 1:A:235:LEU:HD22 | 10 | 0.12 |
| (1,59) | 1:A:172:THR:HG21 | 1:A:235:LEU:HD23 | 10 | 0.12 |
| (1,59) | 1:A:172:THR:HG22 | 1:A:235:LEU:HD21 | 10 | 0.12 |
| (1,59) | 1:A:172:THR:HG22 | 1:A:235:LEU:HD22 | 10 | 0.12 |
| (1,59) | 1:A:172:THR:HG22 | 1:A:235:LEU:HD23 | 10 | 0.12 |
| (1,59) | 1:A:172:THR:HG23 | 1:A:235:LEU:HD21 | 10 | 0.12 |
| (1,59) | 1:A:172:THR:HG23 | 1:A:235:LEU:HD22 | 10 | 0.12 |
| (1,59) | 1:A:172:THR:HG23 | 1:A:235:LEU:HD23 | 10 | 0.12 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD11 | 1:A:251:LEU:HB2 | 3 | 0.12 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD12 | 1:A:251:LEU:HB2 | 3 | 0.12 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD13 | 1:A:251:LEU:HB2 | 3 | 0.12 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD11 | 1:A:251:LEU:HB2 | 12 | 0.12 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD12 | 1:A:251:LEU:HB2 | 12 | 0.12 |
| (1,444) | 1:A:197:LEU:HD13 | 1:A:251:LEU:HB2 | 12 | 0.12 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,316) | 1:A:205:VAL:HA | 1:A:226:ARG:HD2 | 6 | 0.12 |
| (1,316) | 1:A:205:VAL:HA | 1:A:226:ARG:HD2 | 9 | 0.12 |
| (1,316) | 1:A:205:VAL:HA | 1:A:226:ARG:HD2 | 13 | 0.12 |
| (1,258) | 1:A:232:LYS:HG3 | 1:A:251:LEU:HA | 5 | 0.12 |
| (1,177) | 1:A:176:TRP:HZ2 | 1:A:223:VAL:HA | 18 | 0.12 |
| (1,1717) | 1:A:172:THR:H | 1:A:219:VAL:HG21 | 20 | 0.12 |
| (1,1717) | 1:A:172:THR:H | 1:A:219:VAL:HG22 | 20 | 0.12 |
| (1,1717) | 1:A:172:THR:H | 1:A:219:VAL:HG23 | 20 | 0.12 |
| (1,1716) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:234:ARG:HD2 | 11 | 0.12 |
| (1,1716) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:234:ARG:HD3 | 11 | 0.12 |
| (1,1716) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:234:ARG:HD2 | 13 | 0.12 |
| (1,1716) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:234:ARG:HD3 | 13 | 0.12 |
| (1,1708) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:224:PRO:HB2 | 10 | 0.12 |
| (1,1708) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:224:PRO:HB3 | 10 | 0.12 |
| (1,1708) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:224:PRO:HB2 | 13 | 0.12 |
| (1,1708) | 1:A:176:TRP:HD1 | 1:A:224:PRO:HB3 | 13 | 0.12 |
| (1,1706) | 1:A:176:TRP:HH2 | 1:A:221:VAL:HG11 | 9 | 0.12 |
| (1,1706) | 1:A:176:TRP:HH2 | 1:A:221:VAL:HG12 | 9 | 0.12 |
| (1,1706) | 1:A:176:TRP:HH2 | 1:A:221:VAL:HG13 | 9 | 0.12 |
| (1,1706) | 1:A:176:TRP:HH2 | 1:A:221:VAL:HG21 | 9 | 0.12 |
| (1,1706) | 1:A:176:TRP:HH2 | 1:A:221:VAL:HG22 | 9 | 0.12 |
| (1,1706) | 1:A:176:TRP:HH2 | 1:A:221:VAL:HG23 | 9 | 0.12 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD11 | 1 | 0.12 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD12 | 1 | 0.12 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD13 | 1 | 0.12 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD21 | 1 | 0.12 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD22 | 1 | 0.12 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD23 | 1 | 0.12 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD11 | 6 | 0.12 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD12 | 6 | 0.12 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD13 | 6 | 0.12 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD21 | 6 | 0.12 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD22 | 6 | 0.12 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD23 | 6 | 0.12 |
| (1,1670) | 1:A:236:LYS:HG2 | 1:A:248:ASP:HA | 4 | 0.12 |
| (1,1670) | 1:A:236:LYS:HG3 | 1:A:248:ASP:HA | 4 | 0.12 |
| (1,1670) | 1:A:236:LYS:HG2 | 1:A:248:ASP:HA | 6 | 0.12 |
| (1,1670) | 1:A:236:LYS:HG3 | 1:A:248:ASP:HA | 6 | 0.12 |
| (1,1670) | 1:A:236:LYS:HG2 | 1:A:248:ASP:HA | 18 | 0.12 |
| (1,1670) | 1:A:236:LYS:HG3 | 1:A:248:ASP:HA | 18 | 0.12 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:236:LYS:H | 4 | 0.12 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:236:LYS:H | 4 | 0.12 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:236:LYS:H | 4 | 0.12 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:236:LYS:H | 4 | 0.12 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:236:LYS:H | 4 | 0.12 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:236:LYS:H | 4 | 0.12 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:236:LYS:H | 11 | 0.12 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:236:LYS:H | 11 | 0.12 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:236:LYS:H | 11 | 0.12 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:236:LYS:H | 11 | 0.12 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:236:LYS:H | 11 | 0.12 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:236:LYS:H | 11 | 0.12 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:236:LYS:H | 16 | 0.12 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:236:LYS:H | 16 | 0.12 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:236:LYS:H | 16 | 0.12 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:236:LYS:H | 16 | 0.12 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:236:LYS:H | 16 | 0.12 |
| (1,1656) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:236:LYS:H | 16 | 0.12 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD11 | 14 | 0.12 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD12 | 14 | 0.12 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD13 | 14 | 0.12 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD21 | 14 | 0.12 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD22 | 14 | 0.12 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD23 | 14 | 0.12 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD11 | 14 | 0.12 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD12 | 14 | 0.12 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD13 | 14 | 0.12 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD21 | 14 | 0.12 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD22 | 14 | 0.12 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD23 | 14 | 0.12 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD11 | 14 | 0.12 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD12 | 14 | 0.12 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD13 | 14 | 0.12 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD21 | 14 | 0.12 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD22 | 14 | 0.12 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD23 | 14 | 0.12 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD11 | 14 | 0.12 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD12 | 14 | 0.12 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD13 | 14 | 0.12 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD21 | 14 | 0.12 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD22 | 14 | 0.12 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD23 | 14 | 0.12 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD11 | 14 | 0.12 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD12 | 14 | 0.12 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD13 | 14 | 0.12 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD21 | 14 | 0.12 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD22 | 14 | 0.12 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD23 | 14 | 0.12 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD11 | 14 | 0.12 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD12 | 14 | 0.12 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD13 | 14 | 0.12 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD21 | 14 | 0.12 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD22 | 14 | 0.12 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD23 | 14 | 0.12 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:217:GLY:H | 5 | 0.12 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:217:GLY:H | 5 | 0.12 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:217:GLY:H | 5 | 0.12 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:217:GLY:H | 5 | 0.12 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:217:GLY:H | 5 | 0.12 |
| (1,1599) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:217:GLY:H | 5 | 0.12 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD11 | 1:A:216:GLU:HA | 7 | 0.12 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD12 | 1:A:216:GLU:HA | 7 | 0.12 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD13 | 1:A:216:GLU:HA | 7 | 0.12 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD21 | 1:A:216:GLU:HA | 7 | 0.12 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD22 | 1:A:216:GLU:HA | 7 | 0.12 |
| (1,1596) | 1:A:215:LEU:HD23 | 1:A:216:GLU:HA | 7 | 0.12 |
| (1,1582) | 1:A:211:ARG:HD2 | 1:A:213:MET:H | 12 | 0.12 |
| (1,1582) | 1:A:211:ARG:HD3 | 1:A:213:MET:H | 12 | 0.12 |
| (1,1427) | 1:A:226:ARG:H | 1:A:226:ARG:HD3 | 1 | 0.12 |
| (1,1427) | 1:A:226:ARG:H | 1:A:226:ARG:HD3 | 17 | 0.12 |
| (1,1424) | 1:A:231:ARG:HD2 | 1:A:232:LYS:H | 1 | 0.12 |
| (1,1424) | 1:A:231:ARG:HD2 | 1:A:232:LYS:H | 8 | 0.12 |
| (1,1397) | 1:A:211:ARG:HG2 | 1:A:220:GLU:HG3 | 14 | 0.12 |
| (1,1394) | 1:A:242:GLY:HA3 | 1:A:246:ARG:HG3 | 3 | 0.12 |
| (1,1394) | 1:A:242:GLY:HA3 | 1:A:246:ARG:HG3 | 5 | 0.12 |
| (1,1385) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:251:LEU:HD21 | 12 | 0.12 |
| (1,1385) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:251:LEU:HD22 | 12 | 0.12 |
| (1,1385) | 1:A:196:THR:HA | 1:A:251:LEU:HD23 | 12 | 0.12 |
| (1,1383) | 1:A:253:VAL:HG11 | 1:A:254:ARG:HB3 | 9 | 0.12 |
| (1,1383) | 1:A:253:VAL:HG12 | 1:A:254:ARG:HB3 | 9 | 0.12 |
| (1,1383) | 1:A:253:VAL:HG13 | 1:A:254:ARG:HB3 | 9 | 0.12 |
| (1,1373) | 1:A:211:ARG:HB2 | 1:A:220:GLU:HG2 | 9 | 0.12 |
| (1,1370) | 1:A:228:GLN:H | 1:A:228:GLN:HG2 | 2 | 0.12 |
| (1,1363) | 1:A:229:ALA:HA | 1:A:231:ARG:HD3 | 5 | 0.12 |
| (1,1313) | 1:A:238:LYS:H | 1:A:238:LYS:HE2 | 10 | 0.12 |
| (1,1313) | 1:A:238:LYS:H | 1:A:238:LYS:HE3 | 10 | 0.12 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1310) | 1:A:236:LYS:HE2 | 1:A:237:GLY:H | 3 | 0.12 |
| (1,1310) | 1:A:236:LYS:HE3 | 1:A:237:GLY:H | 3 | 0.12 |
| (1,1295) | 1:A:234:ARG:HD2 | 1:A:250:TYR:HD2 | 5 | 0.12 |
| (1,1295) | 1:A:234:ARG:HD3 | 1:A:250:TYR:HD2 | 5 | 0.12 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG11 | 2 | 0.12 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG12 | 2 | 0.12 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG13 | 2 | 0.12 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG21 | 2 | 0.12 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG22 | 2 | 0.12 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG23 | 2 | 0.12 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG11 | 2 | 0.12 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG12 | 2 | 0.12 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG13 | 2 | 0.12 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG21 | 2 | 0.12 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG22 | 2 | 0.12 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG23 | 2 | 0.12 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG11 | 20 | 0.12 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG12 | 20 | 0.12 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG13 | 20 | 0.12 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG21 | 20 | 0.12 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG22 | 20 | 0.12 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG23 | 20 | 0.12 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG11 | 20 | 0.12 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG12 | 20 | 0.12 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG13 | 20 | 0.12 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG21 | 20 | 0.12 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG22 | 20 | 0.12 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG23 | 20 | 0.12 |
| (1,1229) | 1:A:211:ARG:HD2 | 1:A:219:VAL:H | 19 | 0.12 |
| (1,1229) | 1:A:211:ARG:HD3 | 1:A:219:VAL:H | 19 | 0.12 |
| (1,1225) | 1:A:211:ARG:HD2 | 1:A:212:ALA:H | 17 | 0.12 |
| (1,1225) | 1:A:211:ARG:HD3 | 1:A:212:ALA:H | 17 | 0.12 |
| (1,1201) | 1:A:209:LYS:HE2 | 1:A:222:ALA:HA | 8 | 0.12 |
| (1,1201) | 1:A:209:LYS:HE3 | 1:A:222:ALA:HA | 8 | 0.12 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG11 | 9 | 0.12 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG12 | 9 | 0.12 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG13 | 9 | 0.12 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG21 | 9 | 0.12 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG22 | 9 | 0.12 |
| (1,1152) | 1:A:199:VAL:HB | 1:A:210:VAL:HG23 | 9 | 0.12 |
| (1,1151) | 1:A:199:VAL:HA | 1:A:210:VAL:HG11 | 6 | 0.12 |
| (1,1151) | 1:A:199:VAL:HA | 1:A:210:VAL:HG12 | 6 | 0.12 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1151) | 1:A:199:VAL:HA | 1:A:210:VAL:HG13 | 6 | 0.12 |
| (1,1151) | 1:A:199:VAL:HA | 1:A:210:VAL:HG21 | 6 | 0.12 |
| (1,1151) | 1:A:199:VAL:HA | 1:A:210:VAL:HG22 | 6 | 0.12 |
| (1,1151) | 1:A:199:VAL:HA | 1:A:210:VAL:HG23 | 6 | 0.12 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD11 | 4 | 0.12 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD12 | 4 | 0.12 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD13 | 4 | 0.12 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD21 | 4 | 0.12 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD22 | 4 | 0.12 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD23 | 4 | 0.12 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD11 | 13 | 0.12 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD12 | 13 | 0.12 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD13 | 13 | 0.12 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD21 | 13 | 0.12 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD22 | 13 | 0.12 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD23 | 13 | 0.12 |
| (1,1098) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:175:GLU:HB2 | 4 | 0.12 |
| (1,1098) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:175:GLU:HB3 | 4 | 0.12 |
| (1,1098) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:175:GLU:HB2 | 8 | 0.12 |
| (1,1098) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:175:GLU:HB3 | 8 | 0.12 |
| (1,1098) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:175:GLU:HB2 | 10 | 0.12 |
| (1,1098) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:175:GLU:HB3 | 10 | 0.12 |
| (1,1095) | 1:A:174:GLY:HA2 | 1:A:234:ARG:HG2 | 9 | 0.12 |
| (1,1095) | 1:A:174:GLY:HA2 | 1:A:234:ARG:HG3 | 9 | 0.12 |
| (1,1095) | 1:A:174:GLY:HA3 | 1:A:234:ARG:HG2 | 9 | 0.12 |
| (1,1095) | 1:A:174:GLY:HA3 | 1:A:234:ARG:HG3 | 9 | 0.12 |
| (1,1067) | 1:A:228:GLN:HB2 | 1:A:228:GLN:HE21 | 6 | 0.12 |
| (1,1067) | 1:A:228:GLN:HB2 | 1:A:228:GLN:HE21 | 8 | 0.12 |
| (1,1067) | 1:A:228:GLN:HB2 | 1:A:228:GLN:HE21 | 14 | 0.12 |
| (1,1067) | 1:A:228:GLN:HB2 | 1:A:228:GLN:HE21 | 16 | 0.12 |
| (1,1063) | 1:A:191:GLN:HE21 | 1:A:242:GLY:HA2 | 9 | 0.12 |
| (2,5) | 1:A:201:ALA:H | 1:A:256:THR:O | 7 | 0.11 |
| (2,24) | 1:A:251:LEU:H | 1:A:233:LEU:O | 17 | 0.11 |
| (2,10) | 1:A:210:VAL:H | 1:A:221:VAL:O | 2 | 0.11 |
| (2,10) | 1:A:210:VAL:H | 1:A:221:VAL:O | 13 | 0.11 |
| (2,10) | 1:A:210:VAL:H | 1:A:221:VAL:O | 20 | 0.11 |
| (1,979) | 1:A:244:ALA:HA | 1:A:245:GLY:H | 9 | 0.11 |
| (1,971) | 1:A:191:GLN:HE22 | 1:A:242:GLY:H | 18 | 0.11 |
| (1,932) | 1:A:236:LYS:H | 1:A:238:LYS:H | 5 | 0.11 |
| (1,899) | 1:A:248:ASP:H | 1:A:248:ASP:HB3 | 4 | 0.11 |
| (1,898) | 1:A:191:GLN:HB3 | 1:A:248:ASP:H | 3 | 0.11 |
| (1,898) | 1:A:191:GLN:HB3 | 1:A:248:ASP:H | 9 | 0.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,898) | 1:A:191:GLN:HB3 | 1:A:248:ASP:H | 20 | 0.11 |
| (1,889) | 1:A:211:ARG:HA | 1:A:219:VAL:H | 2 | 0.11 |
| (1,878) | 1:A:239:GLY:H | 1:A:249:LEU:H | 3 | 0.11 |
| (1,838) | 1:A:209:LYS:H | 1:A:209:LYS:HB3 | 8 | 0.11 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE1 | 1:A:215:LEU:HD21 | 2 | 0.11 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE1 | 1:A:215:LEU:HD22 | 2 | 0.11 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE1 | 1:A:215:LEU:HD23 | 2 | 0.11 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE2 | 1:A:215:LEU:HD21 | 2 | 0.11 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE2 | 1:A:215:LEU:HD22 | 2 | 0.11 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE2 | 1:A:215:LEU:HD23 | 2 | 0.11 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE3 | 1:A:215:LEU:HD21 | 2 | 0.11 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE3 | 1:A:215:LEU:HD22 | 2 | 0.11 |
| (1,8) | 1:A:213:MET:HE3 | 1:A:215:LEU:HD23 | 2 | 0.11 |
| (1,788) | 1:A:235:LEU:HB3 | 1:A:236:LYS:H | 3 | 0.11 |
| (1,788) | 1:A:235:LEU:HB3 | 1:A:236:LYS:H | 13 | 0.11 |
| (1,762) | 1:A:201:ALA:H | 1:A:202:PRO:HD3 | 6 | 0.11 |
| (1,762) | 1:A:201:ALA:H | 1:A:202:PRO:HD3 | 10 | 0.11 |
| (1,762) | 1:A:201:ALA:H | 1:A:202:PRO:HD3 | 12 | 0.11 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD11 | 1:A:210:VAL:HG21 | 5 | 0.11 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD11 | 1:A:210:VAL:HG22 | 5 | 0.11 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD11 | 1:A:210:VAL:HG23 | 5 | 0.11 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD12 | 1:A:210:VAL:HG21 | 5 | 0.11 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD12 | 1:A:210:VAL:HG22 | 5 | 0.11 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD12 | 1:A:210:VAL:HG23 | 5 | 0.11 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD13 | 1:A:210:VAL:HG21 | 5 | 0.11 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD13 | 1:A:210:VAL:HG22 | 5 | 0.11 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD13 | 1:A:210:VAL:HG23 | 5 | 0.11 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD11 | 1:A:210:VAL:HG21 | 8 | 0.11 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD11 | 1:A:210:VAL:HG22 | 8 | 0.11 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD11 | 1:A:210:VAL:HG23 | 8 | 0.11 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD12 | 1:A:210:VAL:HG21 | 8 | 0.11 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD12 | 1:A:210:VAL:HG22 | 8 | 0.11 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD12 | 1:A:210:VAL:HG23 | 8 | 0.11 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD13 | 1:A:210:VAL:HG21 | 8 | 0.11 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD13 | 1:A:210:VAL:HG22 | 8 | 0.11 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD13 | 1:A:210:VAL:HG23 | 8 | 0.11 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD11 | 1:A:210:VAL:HG21 | 11 | 0.11 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD11 | 1:A:210:VAL:HG22 | 11 | 0.11 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD11 | 1:A:210:VAL:HG23 | 11 | 0.11 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD12 | 1:A:210:VAL:HG21 | 11 | 0.11 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD12 | 1:A:210:VAL:HG22 | 11 | 0.11 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD12 | 1:A:210:VAL:HG23 | 11 | 0.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD13 | 1:A:210:VAL:HG21 | 11 | 0.11 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD13 | 1:A:210:VAL:HG22 | 11 | 0.11 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD13 | 1:A:210:VAL:HG23 | 11 | 0.11 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD11 | 1:A:210:VAL:HG21 | 15 | 0.11 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD11 | 1:A:210:VAL:HG22 | 15 | 0.11 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD11 | 1:A:210:VAL:HG23 | 15 | 0.11 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD12 | 1:A:210:VAL:HG21 | 15 | 0.11 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD12 | 1:A:210:VAL:HG22 | 15 | 0.11 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD12 | 1:A:210:VAL:HG23 | 15 | 0.11 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD13 | 1:A:210:VAL:HG21 | 15 | 0.11 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD13 | 1:A:210:VAL:HG22 | 15 | 0.11 |
| (1,76) | 1:A:203:ILE:HD13 | 1:A:210:VAL:HG23 | 15 | 0.11 |
| (1,757) | 1:A:212:ALA:H | 1:A:218:PRO:HA | 5 | 0.11 |
| (1,729) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:216:GLU:H | 13 | 0.11 |
| (1,729) | 1:A:214:THR:HB | 1:A:216:GLU:H | 17 | 0.11 |
| (1,695) | 1:A:194:TYR:HE1 | 1:A:232:LYS:HG3 | 9 | 0.11 |
| (1,689) | 1:A:215:LEU:HB2 | 1:A:240:PHE:HD1 | 5 | 0.11 |
| (1,663) | 1:A:205:VAL:HA | 1:A:226:ARG:HD3 | 16 | 0.11 |
| (1,658) | 1:A:173:ALA:HB1 | 1:A:220:GLU:HB3 | 3 | 0.11 |
| (1,658) | 1:A:173:ALA:HB2 | 1:A:220:GLU:HB3 | 3 | 0.11 |
| (1,658) | 1:A:173:ALA:HB3 | 1:A:220:GLU:HB3 | 3 | 0.11 |
| (1,658) | 1:A:173:ALA:HB1 | 1:A:220:GLU:HB3 | 8 | 0.11 |
| (1,658) | 1:A:173:ALA:HB2 | 1:A:220:GLU:HB3 | 8 | 0.11 |
| (1,658) | 1:A:173:ALA:HB3 | 1:A:220:GLU:HB3 | 8 | 0.11 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG11 | 1:A:253:VAL:HG11 | 17 | 0.11 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG11 | 1:A:253:VAL:HG12 | 17 | 0.11 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG11 | 1:A:253:VAL:HG13 | 17 | 0.11 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG12 | 1:A:253:VAL:HG11 | 17 | 0.11 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG12 | 1:A:253:VAL:HG12 | 17 | 0.11 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG12 | 1:A:253:VAL:HG13 | 17 | 0.11 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG13 | 1:A:253:VAL:HG11 | 17 | 0.11 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG13 | 1:A:253:VAL:HG12 | 17 | 0.11 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG13 | 1:A:253:VAL:HG13 | 17 | 0.11 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG11 | 1:A:253:VAL:HG11 | 19 | 0.11 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG11 | 1:A:253:VAL:HG12 | 19 | 0.11 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG11 | 1:A:253:VAL:HG13 | 19 | 0.11 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG12 | 1:A:253:VAL:HG11 | 19 | 0.11 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG12 | 1:A:253:VAL:HG12 | 19 | 0.11 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG12 | 1:A:253:VAL:HG13 | 19 | 0.11 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG13 | 1:A:253:VAL:HG11 | 19 | 0.11 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG13 | 1:A:253:VAL:HG12 | 19 | 0.11 |
| (1,644) | 1:A:223:VAL:HG13 | 1:A:253:VAL:HG13 | 19 | 0.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,625) | 1:A:236:LYS:HG2 | 1:A:248:ASP:HB3 | 15 | 0.11 |
| (1,625) | 1:A:236:LYS:HG2 | 1:A:248:ASP:HB3 | 17 | 0.11 |
| (1,625) | 1:A:236:LYS:HG2 | 1:A:248:ASP:HB3 | 18 | 0.11 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG21 | 1:A:256:THR:HG21 | 6 | 0.11 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG21 | 1:A:256:THR:HG22 | 6 | 0.11 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG21 | 1:A:256:THR:HG23 | 6 | 0.11 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG22 | 1:A:256:THR:HG21 | 6 | 0.11 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG22 | 1:A:256:THR:HG22 | 6 | 0.11 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG22 | 1:A:256:THR:HG23 | 6 | 0.11 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG23 | 1:A:256:THR:HG21 | 6 | 0.11 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG23 | 1:A:256:THR:HG22 | 6 | 0.11 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG23 | 1:A:256:THR:HG23 | 6 | 0.11 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG21 | 1:A:256:THR:HG21 | 7 | 0.11 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG21 | 1:A:256:THR:HG22 | 7 | 0.11 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG21 | 1:A:256:THR:HG23 | 7 | 0.11 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG22 | 1:A:256:THR:HG21 | 7 | 0.11 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG22 | 1:A:256:THR:HG22 | 7 | 0.11 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG22 | 1:A:256:THR:HG23 | 7 | 0.11 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG23 | 1:A:256:THR:HG21 | 7 | 0.11 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG23 | 1:A:256:THR:HG22 | 7 | 0.11 |
| (1,61) | 1:A:255:ILE:HG23 | 1:A:256:THR:HG23 | 7 | 0.11 |
| (1,577) | 1:A:194:TYR:HD1 | 1:A:195:ALA:HA | 2 | 0.11 |
| (1,577) | 1:A:194:TYR:HD1 | 1:A:195:ALA:HA | 3 | 0.11 |
| (1,577) | 1:A:194:TYR:HD1 | 1:A:195:ALA:HA | 12 | 0.11 |
| (1,545) | 1:A:202:PRO:HD2 | 1:A:255:ILE:HG21 | 11 | 0.11 |
| (1,545) | 1:A:202:PRO:HD2 | 1:A:255:ILE:HG22 | 11 | 0.11 |
| (1,545) | 1:A:202:PRO:HD2 | 1:A:255:ILE:HG23 | 11 | 0.11 |
| (1,538) | 1:A:254:ARG:HG3 | 1:A:256:THR:HG21 | 6 | 0.11 |
| (1,538) | 1:A:254:ARG:HG3 | 1:A:256:THR:HG22 | 6 | 0.11 |
| (1,538) | 1:A:254:ARG:HG3 | 1:A:256:THR:HG23 | 6 | 0.11 |
| (1,448) | 1:A:195:ALA:HB1 | 1:A:197:LEU:H | 11 | 0.11 |
| (1,448) | 1:A:195:ALA:HB2 | 1:A:197:LEU:H | 11 | 0.11 |
| (1,448) | 1:A:195:ALA:HB3 | 1:A:197:LEU:H | 11 | 0.11 |
| (1,377) | 1:A:204:ALA:HB1 | 1:A:228:GLN:HA | 5 | 0.11 |
| (1,377) | 1:A:204:ALA:HB2 | 1:A:228:GLN:HA | 5 | 0.11 |
| (1,377) | 1:A:204:ALA:HB3 | 1:A:228:GLN:HA | 5 | 0.11 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB1 | 20 | 0.11 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB2 | 20 | 0.11 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:204:ALA:HB3 | 20 | 0.11 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB1 | 20 | 0.11 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB2 | 20 | 0.11 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:204:ALA:HB3 | 20 | 0.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB1 | 20 | 0.11 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB2 | 20 | 0.11 |
| (1,34) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:204:ALA:HB3 | 20 | 0.11 |
| (1,316) | 1:A:205:VAL:HA | 1:A:226:ARG:HD2 | 2 | 0.11 |
| (1,316) | 1:A:205:VAL:HA | 1:A:226:ARG:HD2 | 3 | 0.11 |
| (1,287) | 1:A:195:ALA:HB1 | 1:A:251:LEU:HB3 | 18 | 0.11 |
| (1,287) | 1:A:195:ALA:HB2 | 1:A:251:LEU:HB3 | 18 | 0.11 |
| (1,287) | 1:A:195:ALA:HB3 | 1:A:251:LEU:HB3 | 18 | 0.11 |
| (1,258) | 1:A:232:LYS:HG3 | 1:A:251:LEU:HA | 14 | 0.11 |
| (1,230) | 1:A:215:LEU:HA | 1:A:240:PHE:HE1 | 12 | 0.11 |
| (1,1716) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:234:ARG:HD2 | 8 | 0.11 |
| (1,1716) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:234:ARG:HD3 | 8 | 0.11 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD11 | 11 | 0.11 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD12 | 11 | 0.11 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD13 | 11 | 0.11 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD21 | 11 | 0.11 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD22 | 11 | 0.11 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD23 | 11 | 0.11 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD11 | 20 | 0.11 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD12 | 20 | 0.11 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD13 | 20 | 0.11 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD21 | 20 | 0.11 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD22 | 20 | 0.11 |
| (1,1677) | 1:A:238:LYS:HG2 | 1:A:249:LEU:HD23 | 20 | 0.11 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD11 | 1:A:238:LYS:H | 18 | 0.11 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD12 | 1:A:238:LYS:H | 18 | 0.11 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD13 | 1:A:238:LYS:H | 18 | 0.11 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD21 | 1:A:238:LYS:H | 18 | 0.11 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD22 | 1:A:238:LYS:H | 18 | 0.11 |
| (1,1658) | 1:A:235:LEU:HD23 | 1:A:238:LYS:H | 18 | 0.11 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD11 | 4 | 0.11 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD12 | 4 | 0.11 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD13 | 4 | 0.11 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD21 | 4 | 0.11 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD22 | 4 | 0.11 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD11 | 1:A:249:LEU:HD23 | 4 | 0.11 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD11 | 4 | 0.11 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD12 | 4 | 0.11 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD13 | 4 | 0.11 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD21 | 4 | 0.11 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD22 | 4 | 0.11 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD12 | 1:A:249:LEU:HD23 | 4 | 0.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD11 | 4 | 0.11 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD12 | 4 | 0.11 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD13 | 4 | 0.11 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD21 | 4 | 0.11 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD22 | 4 | 0.11 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD13 | 1:A:249:LEU:HD23 | 4 | 0.11 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD11 | 4 | 0.11 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD12 | 4 | 0.11 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD13 | 4 | 0.11 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD21 | 4 | 0.11 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD22 | 4 | 0.11 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD21 | 1:A:249:LEU:HD23 | 4 | 0.11 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD11 | 4 | 0.11 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD12 | 4 | 0.11 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD13 | 4 | 0.11 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD21 | 4 | 0.11 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD22 | 4 | 0.11 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD22 | 1:A:249:LEU:HD23 | 4 | 0.11 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD11 | 4 | 0.11 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD12 | 4 | 0.11 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD13 | 4 | 0.11 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD21 | 4 | 0.11 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD22 | 4 | 0.11 |
| (1,1643) | 1:A:233:LEU:HD23 | 1:A:249:LEU:HD23 | 4 | 0.11 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD11 | 1 | 0.11 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD12 | 1 | 0.11 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD13 | 1 | 0.11 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD21 | 1 | 0.11 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD22 | 1 | 0.11 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG11 | 1:A:233:LEU:HD23 | 1 | 0.11 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD11 | 1 | 0.11 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD12 | 1 | 0.11 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD13 | 1 | 0.11 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD21 | 1 | 0.11 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD22 | 1 | 0.11 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG12 | 1:A:233:LEU:HD23 | 1 | 0.11 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD11 | 1 | 0.11 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD12 | 1 | 0.11 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD13 | 1 | 0.11 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD21 | 1 | 0.11 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD22 | 1 | 0.11 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG13 | 1:A:233:LEU:HD23 | 1 | 0.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD11 | 1 | 0.11 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD12 | 1 | 0.11 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD13 | 1 | 0.11 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD21 | 1 | 0.11 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD22 | 1 | 0.11 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG21 | 1:A:233:LEU:HD23 | 1 | 0.11 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD11 | 1 | 0.11 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD12 | 1 | 0.11 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD13 | 1 | 0.11 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD21 | 1 | 0.11 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD22 | 1 | 0.11 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG22 | 1:A:233:LEU:HD23 | 1 | 0.11 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD11 | 1 | 0.11 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD12 | 1 | 0.11 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD13 | 1 | 0.11 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD21 | 1 | 0.11 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD22 | 1 | 0.11 |
| (1,1619) | 1:A:221:VAL:HG23 | 1:A:233:LEU:HD23 | 1 | 0.11 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG11 | 1:A:254:ARG:HB3 | 20 | 0.11 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG12 | 1:A:254:ARG:HB3 | 20 | 0.11 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG13 | 1:A:254:ARG:HB3 | 20 | 0.11 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG21 | 1:A:254:ARG:HB3 | 20 | 0.11 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG22 | 1:A:254:ARG:HB3 | 20 | 0.11 |
| (1,1520) | 1:A:199:VAL:HG23 | 1:A:254:ARG:HB3 | 20 | 0.11 |
| (1,1488) | 1:A:197:LEU:H | 1:A:252:GLU:HG2 | 5 | 0.11 |
| (1,1488) | 1:A:197:LEU:H | 1:A:252:GLU:HG3 | 5 | 0.11 |
| (1,1460) | 1:A:174:GLY:HA3 | 1:A:233:LEU:HD11 | 13 | 0.11 |
| (1,1460) | 1:A:174:GLY:HA3 | 1:A:233:LEU:HD12 | 13 | 0.11 |
| (1,1460) | 1:A:174:GLY:HA3 | 1:A:233:LEU:HD13 | 13 | 0.11 |
| (1,1460) | 1:A:174:GLY:HA3 | 1:A:233:LEU:HD21 | 13 | 0.11 |
| (1,1460) | 1:A:174:GLY:HA3 | 1:A:233:LEU:HD22 | 13 | 0.11 |
| (1,1460) | 1:A:174:GLY:HA3 | 1:A:233:LEU:HD23 | 13 | 0.11 |
| (1,1454) | 1:A:173:ALA:HB1 | 1:A:209:LYS:HD2 | 19 | 0.11 |
| (1,1454) | 1:A:173:ALA:HB1 | 1:A:209:LYS:HD3 | 19 | 0.11 |
| (1,1454) | 1:A:173:ALA:HB2 | 1:A:209:LYS:HD2 | 19 | 0.11 |
| (1,1454) | 1:A:173:ALA:HB2 | 1:A:209:LYS:HD3 | 19 | 0.11 |
| (1,1454) | 1:A:173:ALA:HB3 | 1:A:209:LYS:HD2 | 19 | 0.11 |
| (1,1454) | 1:A:173:ALA:HB3 | 1:A:209:LYS:HD3 | 19 | 0.11 |
| (1,1445) | 1:A:197:LEU:H | 1:A:213:MET:H | 2 | 0.11 |
| (1,1427) | 1:A:226:ARG:H | 1:A:226:ARG:HD3 | 18 | 0.11 |
| (1,1424) | 1:A:231:ARG:HD2 | 1:A:232:LYS:H | 9 | 0.11 |
| (1,1424) | 1:A:231:ARG:HD2 | 1:A:232:LYS:H | 10 | 0.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1424) | 1:A:231:ARG:HD2 | 1:A:232:LYS:H | 13 | 0.11 |
| (1,1411) | 1:A:176:TRP:HE3 | 1:A:231:ARG:HG2 | 11 | 0.11 |
| (1,1397) | 1:A:211:ARG:HG2 | 1:A:220:GLU:HG3 | 2 | 0.11 |
| (1,1394) | 1:A:242:GLY:HA3 | 1:A:246:ARG:HG3 | 6 | 0.11 |
| (1,1394) | 1:A:242:GLY:HA3 | 1:A:246:ARG:HG3 | 15 | 0.11 |
| (1,1383) | 1:A:253:VAL:HG11 | 1:A:254:ARG:HB3 | 11 | 0.11 |
| (1,1383) | 1:A:253:VAL:HG12 | 1:A:254:ARG:HB3 | 11 | 0.11 |
| (1,1383) | 1:A:253:VAL:HG13 | 1:A:254:ARG:HB3 | 11 | 0.11 |
| (1,1383) | 1:A:253:VAL:HG11 | 1:A:254:ARG:HB3 | 16 | 0.11 |
| (1,1383) | 1:A:253:VAL:HG12 | 1:A:254:ARG:HB3 | 16 | 0.11 |
| (1,1383) | 1:A:253:VAL:HG13 | 1:A:254:ARG:HB3 | 16 | 0.11 |
| (1,1383) | 1:A:253:VAL:HG11 | 1:A:254:ARG:HB3 | 17 | 0.11 |
| (1,1383) | 1:A:253:VAL:HG12 | 1:A:254:ARG:HB3 | 17 | 0.11 |
| (1,1383) | 1:A:253:VAL:HG13 | 1:A:254:ARG:HB3 | 17 | 0.11 |
| (1,1373) | 1:A:211:ARG:HB2 | 1:A:220:GLU:HG2 | 5 | 0.11 |
| (1,1373) | 1:A:211:ARG:HB2 | 1:A:220:GLU:HG2 | 7 | 0.11 |
| (1,1370) | 1:A:228:GLN:H | 1:A:228:GLN:HG2 | 7 | 0.11 |
| (1,1370) | 1:A:228:GLN:H | 1:A:228:GLN:HG2 | 20 | 0.11 |
| (1,1313) | 1:A:238:LYS:H | 1:A:238:LYS:HE2 | 17 | 0.11 |
| (1,1313) | 1:A:238:LYS:H | 1:A:238:LYS:HE3 | 17 | 0.11 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG11 | 3 | 0.11 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG12 | 3 | 0.11 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG13 | 3 | 0.11 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG21 | 3 | 0.11 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG22 | 3 | 0.11 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG23 | 3 | 0.11 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG11 | 3 | 0.11 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG12 | 3 | 0.11 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG13 | 3 | 0.11 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG21 | 3 | 0.11 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG22 | 3 | 0.11 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG23 | 3 | 0.11 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG11 | 17 | 0.11 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG12 | 17 | 0.11 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG13 | 17 | 0.11 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG21 | 17 | 0.11 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG22 | 17 | 0.11 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB2 | 1:A:219:VAL:HG23 | 17 | 0.11 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG11 | 17 | 0.11 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG12 | 17 | 0.11 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG13 | 17 | 0.11 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG21 | 17 | 0.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG22 | 17 | 0.11 |
| (1,1250) | 1:A:218:PRO:HB3 | 1:A:219:VAL:HG23 | 17 | 0.11 |
| (1,1225) | 1:A:211:ARG:HD2 | 1:A:212:ALA:H | 18 | 0.11 |
| (1,1225) | 1:A:211:ARG:HD3 | 1:A:212:ALA:H | 18 | 0.11 |
| (1,1151) | 1:A:199:VAL:HA | 1:A:210:VAL:HG11 | 1 | 0.11 |
| (1,1151) | 1:A:199:VAL:HA | 1:A:210:VAL:HG12 | 1 | 0.11 |
| (1,1151) | 1:A:199:VAL:HA | 1:A:210:VAL:HG13 | 1 | 0.11 |
| (1,1151) | 1:A:199:VAL:HA | 1:A:210:VAL:HG21 | 1 | 0.11 |
| (1,1151) | 1:A:199:VAL:HA | 1:A:210:VAL:HG22 | 1 | 0.11 |
| (1,1151) | 1:A:199:VAL:HA | 1:A:210:VAL:HG23 | 1 | 0.11 |
| (1,1151) | 1:A:199:VAL:HA | 1:A:210:VAL:HG11 | 14 | 0.11 |
| (1,1151) | 1:A:199:VAL:HA | 1:A:210:VAL:HG12 | 14 | 0.11 |
| (1,1151) | 1:A:199:VAL:HA | 1:A:210:VAL:HG13 | 14 | 0.11 |
| (1,1151) | 1:A:199:VAL:HA | 1:A:210:VAL:HG21 | 14 | 0.11 |
| (1,1151) | 1:A:199:VAL:HA | 1:A:210:VAL:HG22 | 14 | 0.11 |
| (1,1151) | 1:A:199:VAL:HA | 1:A:210:VAL:HG23 | 14 | 0.11 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD11 | 9 | 0.11 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD12 | 9 | 0.11 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD13 | 9 | 0.11 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD21 | 9 | 0.11 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD22 | 9 | 0.11 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD23 | 9 | 0.11 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD11 | 16 | 0.11 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD12 | 16 | 0.11 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD13 | 16 | 0.11 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD21 | 16 | 0.11 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD22 | 16 | 0.11 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD23 | 16 | 0.11 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD11 | 18 | 0.11 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD12 | 18 | 0.11 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD13 | 18 | 0.11 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD21 | 18 | 0.11 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD22 | 18 | 0.11 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD23 | 18 | 0.11 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD11 | 20 | 0.11 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD12 | 20 | 0.11 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD13 | 20 | 0.11 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD21 | 20 | 0.11 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD22 | 20 | 0.11 |
| (1,1138) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:251:LEU:HD23 | 20 | 0.11 |
| (1,1126) | 1:A:194:TYR:HD1 | 1:A:232:LYS:HE2 | 7 | 0.11 |
| (1,1126) | 1:A:194:TYR:HD1 | 1:A:232:LYS:HE3 | 7 | 0.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1098) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:175:GLU:HB2 | 14 | 0.11 |
| (1,1098) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:175:GLU:HB3 | 14 | 0.11 |
| (1,1098) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:175:GLU:HB2 | 17 | 0.11 |
| (1,1098) | 1:A:175:GLU:H | 1:A:175:GLU:HB3 | 17 | 0.11 |
| (1,1072) | 1:A:228:GLN:HE21 | 1:A:229:ALA:H | 20 | 0.11 |
| (1,1067) | 1:A:228:GLN:HB2 | 1:A:228:GLN:HE21 | 3 | 0.11 |
| (1,1067) | 1:A:228:GLN:HB2 | 1:A:228:GLN:HE21 | 12 | 0.11 |
| (1,1067) | 1:A:228:GLN:HB2 | 1:A:228:GLN:HE21 | 18 | 0.11 |
| (1,1039) | 1:A:232:LYS:HG3 | 1:A:252:GLU:H | 14 | 0.11 |
| (1,1014) | 1:A:196:THR:HG21 | 1:A:252:GLU:H | 4 | 0.11 |
| (1,1014) | 1:A:196:THR:HG22 | 1:A:252:GLU:H | 4 | 0.11 |
| (1,1014) | 1:A:196:THR:HG23 | 1:A:252:GLU:H | 4 | 0.11 |
| (1,1003) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:198:ASP:H | 4 | 0.11 |
| (1,1003) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:198:ASP:H | 5 | 0.11 |
| (1,1003) | 1:A:197:LEU:HG | 1:A:198:ASP:H | 8 | 0.11 |

# 10 Dihedral-angle violation analysis (i)

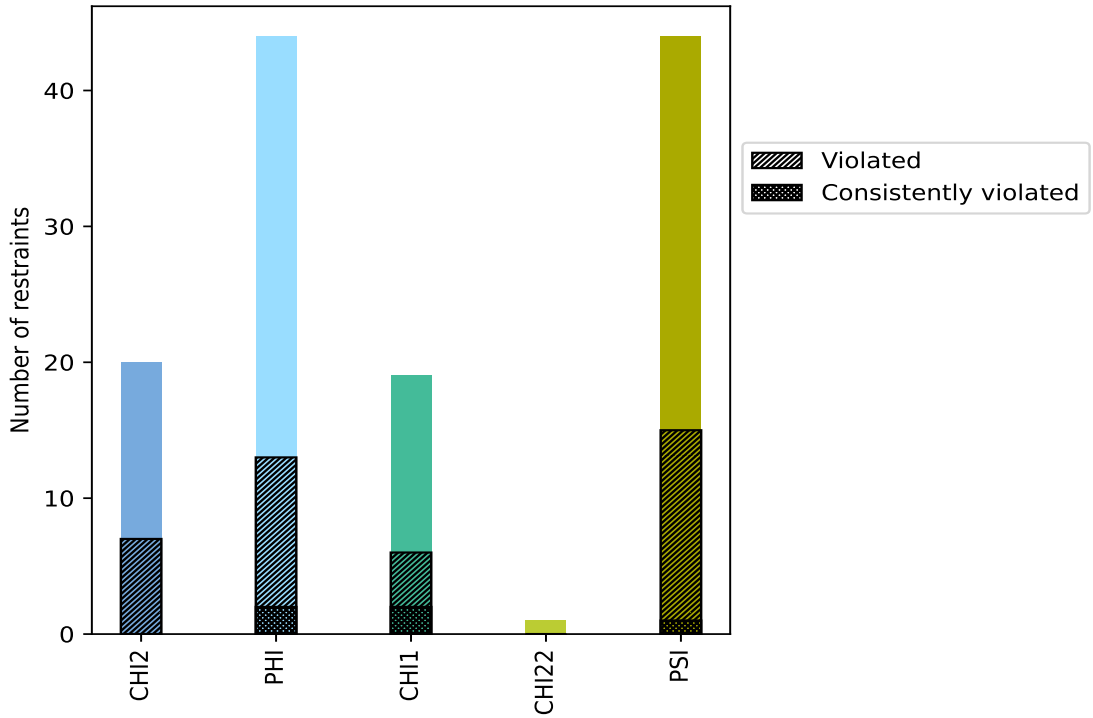
## 10.1 Summary of dihedral-angle violations (i)

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] |
| CHI2 | 20 | 15.6 | 7 | 35.0 | 5.5 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| PHI | 44 | 34.4 | 13 | 29.5 | 10.2 | 2 | 4.5 | 1.6 |
| CHI1 | 19 | 14.8 | 6 | 31.6 | 4.7 | 2 | 10.5 | 1.6 |
| CHI22 | 1 | 0.8 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| PSI | 44 | 34.4 | 15 | 34.1 | 11.7 | 1 | 2.3 | 0.8 |
| Total | 128 | 100.0 | 41 | 32.0 | 32.0 | 5 | 3.9 | 3.9 |

[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)



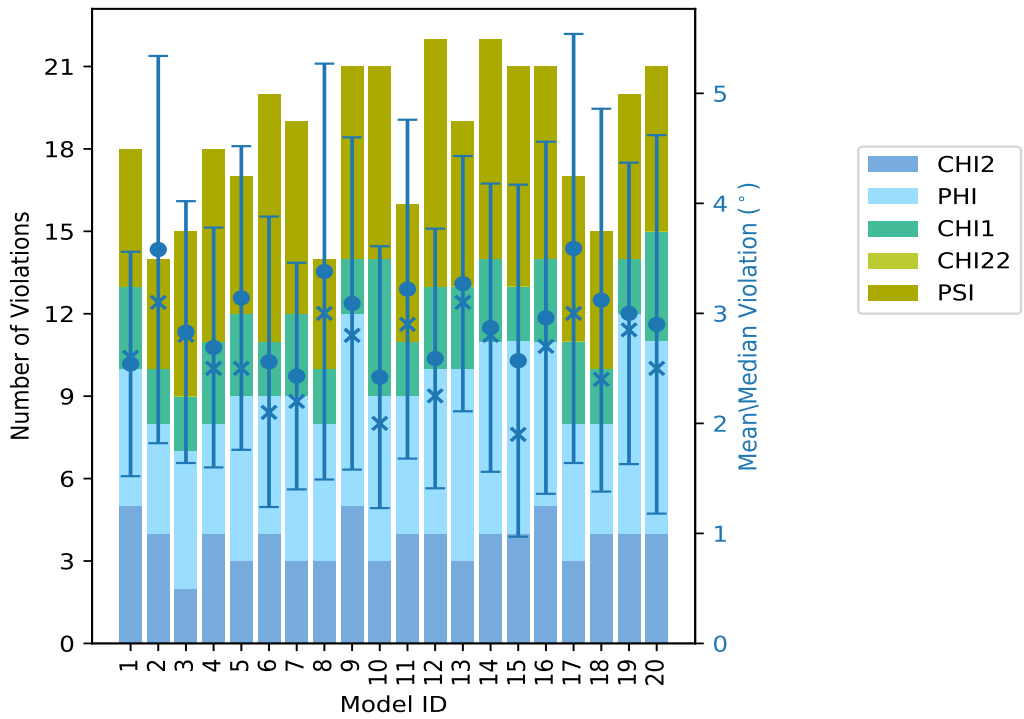

Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories

## 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 (°) |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | CHI2 | PHI | CHI1 | CHI22 | PSI | Total | | | | |
| 1 | 5 | 5 | 3 | 0 | 5 | 18 | 2.54 | 5.3 | 1.02 | 2.6 |
| 2 | 4 | 4 | 2 | 0 | 4 | 14 | 3.58 | 7.1 | 1.76 | 3.1 |
| 3 | 2 | 5 | 2 | 0 | 6 | 15 | 2.83 | 5.1 | 1.19 | 2.8 |
| 4 | 4 | 4 | 3 | 0 | 7 | 18 | 2.69 | 5.9 | 1.09 | 2.5 |
| 5 | 3 | 6 | 3 | 0 | 5 | 17 | 3.14 | 6.7 | 1.38 | 2.5 |
| 6 | 4 | 5 | 2 | 0 | 9 | 20 | 2.56 | 7.2 | 1.32 | 2.1 |
| 7 | 3 | 6 | 3 | 0 | 7 | 19 | 2.43 | 4.8 | 1.03 | 2.2 |
| 8 | 3 | 5 | 2 | 0 | 4 | 14 | 3.38 | 8.1 | 1.89 | 3.0 |
| 9 | 5 | 7 | 2 | 0 | 7 | 21 | 3.09 | 7.6 | 1.51 | 2.8 |
| 10 | 3 | 6 | 5 | 0 | 7 | 21 | 2.42 | 5.9 | 1.19 | 2.0 |
| 11 | 4 | 5 | 2 | 0 | 5 | 16 | 3.22 | 6.3 | 1.54 | 2.9 |
| 12 | 4 | 6 | 3 | 0 | 9 | 22 | 2.59 | 5.6 | 1.18 | 2.25 |
| 13 | 3 | 7 | 3 | 0 | 6 | 19 | 3.27 | 6.4 | 1.16 | 3.1 |
| 14 | 4 | 7 | 3 | 0 | 8 | 22 | 2.87 | 6.7 | 1.31 | 2.8 |
| 15 | 4 | 7 | 2 | 0 | 8 | 21 | 2.57 | 7.7 | 1.6 | 1.9 |
| 16 | 5 | 6 | 3 | 0 | 7 | 21 | 2.96 | 8.1 | 1.6 | 2.7 |
| 17 | 3 | 5 | 3 | 0 | 6 | 17 | 3.59 | 8.1 | 1.95 | 3.0 |
| 18 | 4 | 4 | 2 | 0 | 5 | 15 | 3.12 | 7.0 | 1.74 | 2.4 |
| 19 | 4 | 8 | 2 | 0 | 6 | 20 | 3.0 | 6.6 | 1.37 | 2.85 |
| 20 | 4 | 7 | 4 | 0 | 6 | 21 | 2.9 | 8.0 | 1.72 | 2.5 |

### 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 | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| CHI2 | PHI | CHI1 | CHI22 | PSI | Total | Count[1] | % |
| 0 | 4 | 1 | 0 | 4 | 9 | 1 | 5.0 |
| 0 | 1 | 1 | 0 | 1 | 3 | 2 | 10.0 |
| 1 | 0 | 1 | 0 | 1 | 3 | 3 | 15.0 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 2 | 2 | 4 | 20.0 |
| 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 5 | 25.0 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 6 | 30.0 |
| 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 1 | 7 | 35.0 |
| 0 | 1 | 1 | 0 | 0 | 2 | 8 | 40.0 |
| 1 | 1 | 0 | 0 | 0 | 2 | 9 | 45.0 |
| 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 10 | 50.0 |
| 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 1 | 11 | 55.0 |

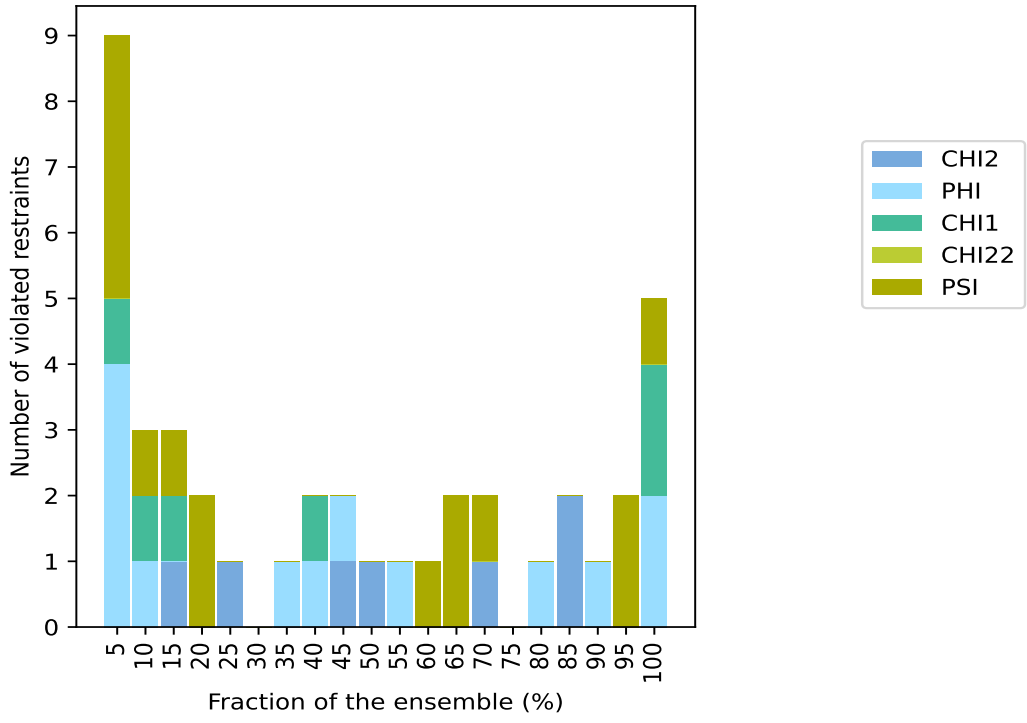
*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Number of violated restraints | | | | | | Fraction of the ensemble | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| CHI2 | PHI | CHI1 | CHI22 | PSI | Total | Count[1] | % |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 1 | 12 | 60.0 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 2 | 2 | 13 | 65.0 |
| 1 | 0 | 0 | 0 | 1 | 2 | 14 | 70.0 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 15 | 75.0 |
| 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 1 | 16 | 80.0 |
| 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 2 | 17 | 85.0 |
| 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 1 | 18 | 90.0 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 2 | 2 | 19 | 95.0 |
| 0 | 2 | 2 | 0 | 1 | 5 | 20 | 100.0 |

[1] Number of models with violations

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

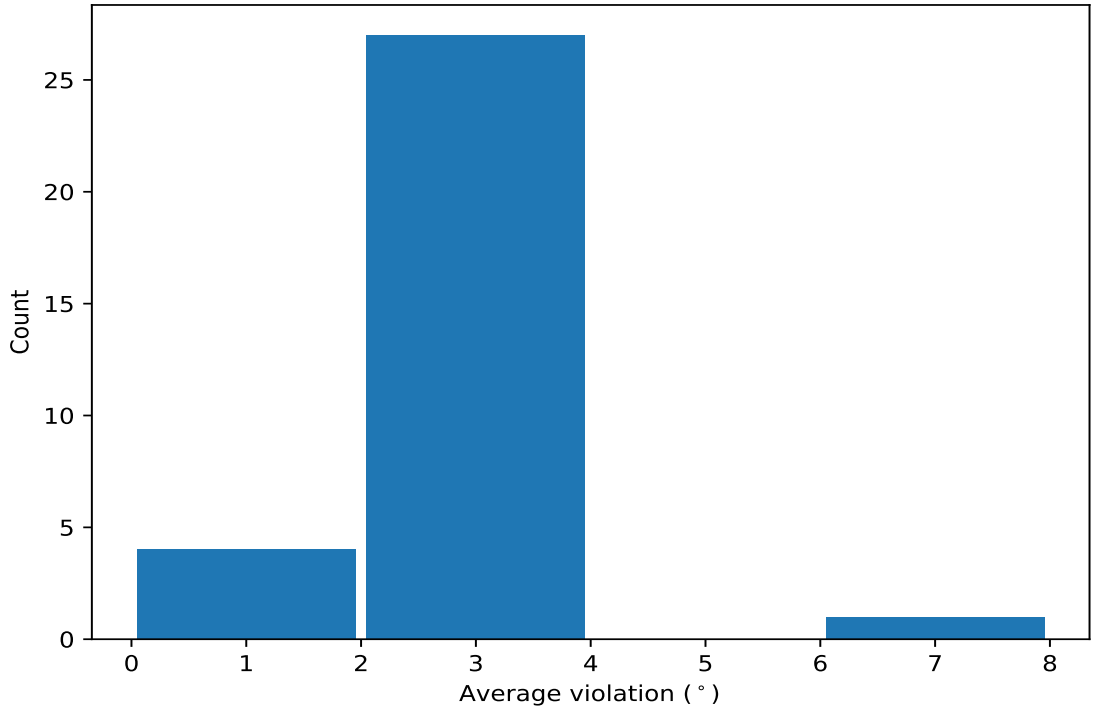



## 10.4 Most violated dihedral-angle restraints in the ensemble (i)

### 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] | Medi |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,4) | 1:A:195:ALA:N | 1:A:195:ALA:CA | 1:A:195:ALA:C | 1:A:196:THR:N | 20 | 6.3 | 1.28 | 6.5 |
| (1,114) | 1:A:232:LYS:N | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:CB | 1:A:232:LYS:CG | 20 | 3.88 | 1.36 | 4.05 |
| (1,106) | 1:A:215:LEU:N | 1:A:215:LEU:CA | 1:A:215:LEU:CB | 1:A:215:LEU:CG | 20 | 3.52 | 2.0 | 3.2 |
| (1,21) | 1:A:205:VAL:C | 1:A:206:VAL:N | 1:A:206:VAL:CA | 1:A:206:VAL:C | 20 | 2.94 | 0.93 | 2.95 |
| (1,81) | 1:A:251:LEU:C | 1:A:252:GLU:N | 1:A:252:GLU:CA | 1:A:252:GLU:C | 20 | 2.92 | 0.94 | 2.75 |
| (1,34) | 1:A:214:THR:N | 1:A:214:THR:CA | 1:A:214:THR:C | 1:A:215:LEU:N | 19 | 3.29 | 1.18 | 3.4 |
| (1,76) | 1:A:249:LEU:N | 1:A:249:LEU:CA | 1:A:249:LEU:C | 1:A:250:TYR:N | 19 | 2.76 | 1.29 | 2.3 |
| (1,31) | 1:A:212:ALA:C | 1:A:213:MET:N | 1:A:213:MET:CA | 1:A:213:MET:C | 18 | 2.38 | 0.67 | 2.4 |
| (1,115) | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:CB | 1:A:232:LYS:CG | 1:A:232:LYS:CD | 17 | 2.99 | 1.7 | 2.6 |
| (1,121) | 1:A:238:LYS:CA | 1:A:238:LYS:CB | 1:A:238:LYS:CG | 1:A:238:LYS:CD | 17 | 2.71 | 1.32 | 2.3 |
| (1,55) | 1:A:231:ARG:C | 1:A:232:LYS:N | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:C | 16 | 2.04 | 0.65 | 1.95 |
| (1,36) | 1:A:215:LEU:N | 1:A:215:LEU:CA | 1:A:215:LEU:C | 1:A:216:GLU:N | 14 | 3.0 | 0.84 | 3.0 |
| (1,113) | 1:A:231:ARG:CA | 1:A:231:ARG:CB | 1:A:231:ARG:CG | 1:A:231:ARG:CD | 14 | 2.24 | 0.78 | 2.25 |
| (1,38) | 1:A:216:GLU:N | 1:A:216:GLU:CA | 1:A:216:GLU:C | 1:A:217:GLY:N | 13 | 2.41 | 0.75 | 2.4 |
| (1,10) | 1:A:198:ASP:N | 1:A:198:ASP:CA | 1:A:198:ASP:C | 1:A:199:VAL:N | 13 | 2.39 | 0.55 | 2.6 |
| (1,60) | 1:A:234:ARG:N | 1:A:234:ARG:CA | 1:A:234:ARG:C | 1:A:235:LEU:N | 12 | 2.15 | 1.01 | 1.7 |
| (1,69) | 1:A:241:PRO:C | 1:A:242:GLY:N | 1:A:242:GLY:CA | 1:A:242:GLY:C | 11 | 2.54 | 0.8 | 2.3 |
| (1,104) | 1:A:211:ARG:CA | 1:A:211:ARG:CB | 1:A:211:ARG:CG | 1:A:211:ARG:CD | 10 | 2.49 | 1.25 | 1.95 |
| (1,37) | 1:A:215:LEU:C | 1:A:216:GLU:N | 1:A:216:GLU:CA | 1:A:216:GLU:C | 9 | 3.79 | 1.44 | 4.0 |
| (1,109) | 1:A:226:ARG:CA | 1:A:226:ARG:CB | 1:A:226:ARG:CG | 1:A:226:ARG:CD | 9 | 1.72 | 0.45 | 1.5 |

*Continued on next pag*

*Continued from previous page...*

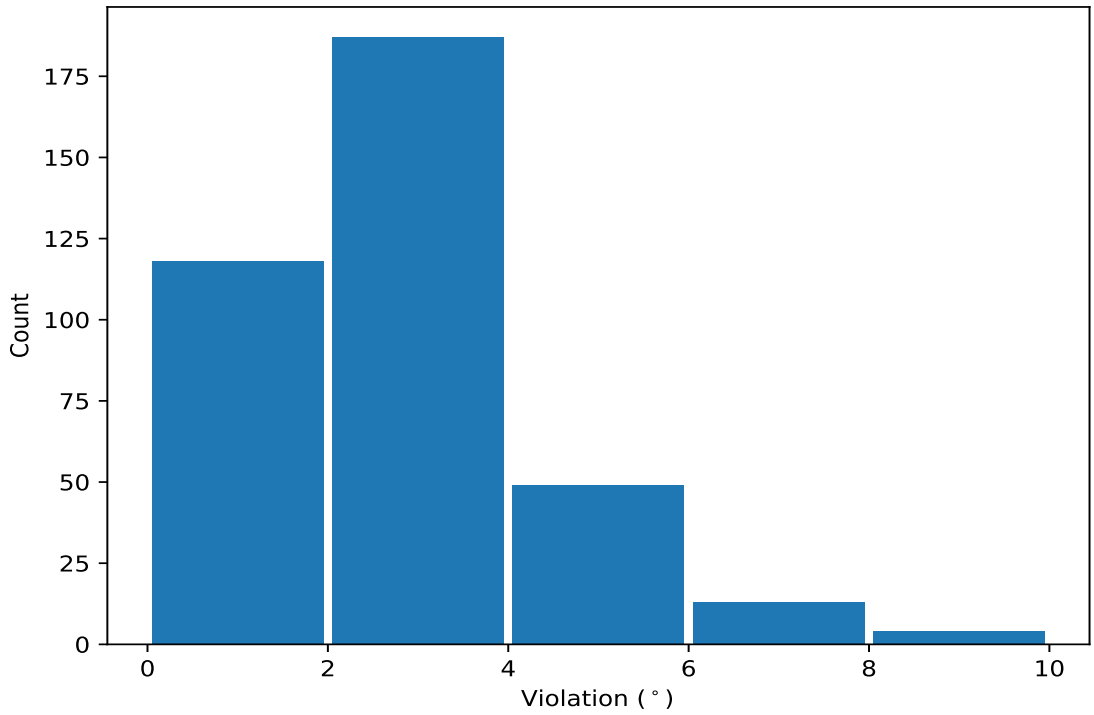
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Models[1] | Mean | SD[2] | Medi |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,102) | 1:A:209:LYS:N | 1:A:209:LYS:CA | 1:A:209:LYS:CB | 1:A:209:LYS:CG | 8 | 2.46 | 0.77 | 2.3 |
| (1,77) | 1:A:249:LEU:C | 1:A:250:TYR:N | 1:A:250:TYR:CA | 1:A:250:TYR:C | 8 | 2.36 | 0.91 | 2.25 |
| (1,67) | 1:A:239:GLY:C | 1:A:240:PHE:N | 1:A:240:PHE:CA | 1:A:240:PHE:C | 7 | 2.64 | 0.76 | 2.5 |
| (1,107) | 1:A:215:LEU:CA | 1:A:215:LEU:CB | 1:A:215:LEU:CG | 1:A:215:LEU:CD1 | 5 | 1.8 | 0.18 | 1.7 |
| (1,30) | 1:A:212:ALA:N | 1:A:212:ALA:CA | 1:A:212:ALA:C | 1:A:213:MET:N | 4 | 2.15 | 0.99 | 1.75 |
| (1,8) | 1:A:197:LEU:N | 1:A:197:LEU:CA | 1:A:197:LEU:C | 1:A:198:ASP:N | 4 | 1.8 | 0.64 | 1.5 |
| (1,123) | 1:A:248:ASP:CA | 1:A:248:ASP:CB | 1:A:248:ASP:CG | 1:A:248:ASP:OD1 | 3 | 2.3 | 1.0 | 1.8 |
| (1,93) | 1:A:193:LEU:N | 1:A:193:LEU:CA | 1:A:193:LEU:CB | 1:A:193:LEU:CG | 3 | 2.17 | 0.58 | 2.3 |
| (1,2) | 1:A:194:TYR:N | 1:A:194:TYR:CA | 1:A:194:TYR:C | 1:A:195:ALA:N | 3 | 2.03 | 0.99 | 1.6 |
| (1,124) | 1:A:249:LEU:N | 1:A:249:LEU:CA | 1:A:249:LEU:CB | 1:A:249:LEU:CG | 2 | 2.8 | 1.1 | 2.8 |
| (1,28) | 1:A:211:ARG:N | 1:A:211:ARG:CA | 1:A:211:ARG:C | 1:A:212:ALA:N | 2 | 2.4 | 0.2 | 2.4 |
| (1,73) | 1:A:247:GLY:C | 1:A:248:ASP:N | 1:A:248:ASP:CA | 1:A:248:ASP:C | 2 | 1.5 | 0.1 | 1.5 |

[1] Number of violated models, [2]Standard 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 (°) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,4) | 1:A:195:ALA:N | 1:A:195:ALA:CA | 1:A:195:ALA:C | 1:A:196:THR:N | 8 | 8.1 |
| (1,4) | 1:A:195:ALA:N | 1:A:195:ALA:CA | 1:A:195:ALA:C | 1:A:196:THR:N | 16 | 8.1 |
| (1,4) | 1:A:195:ALA:N | 1:A:195:ALA:CA | 1:A:195:ALA:C | 1:A:196:THR:N | 17 | 8.1 |
| (1,106) | 1:A:215:LEU:N | 1:A:215:LEU:CA | 1:A:215:LEU:CB | 1:A:215:LEU:CG | 20 | 8.0 |
| (1,115) | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:CB | 1:A:232:LYS:CG | 1:A:232:LYS:CD | 17 | 7.9 |
| (1,4) | 1:A:195:ALA:N | 1:A:195:ALA:CA | 1:A:195:ALA:C | 1:A:196:THR:N | 15 | 7.7 |
| (1,4) | 1:A:195:ALA:N | 1:A:195:ALA:CA | 1:A:195:ALA:C | 1:A:196:THR:N | 9 | 7.6 |
| (1,4) | 1:A:195:ALA:N | 1:A:195:ALA:CA | 1:A:195:ALA:C | 1:A:196:THR:N | 6 | 7.2 |
| (1,106) | 1:A:215:LEU:N | 1:A:215:LEU:CA | 1:A:215:LEU:CB | 1:A:215:LEU:CG | 2 | 7.1 |
| (1,4) | 1:A:195:ALA:N | 1:A:195:ALA:CA | 1:A:195:ALA:C | 1:A:196:THR:N | 18 | 7.0 |
| (1,4) | 1:A:195:ALA:N | 1:A:195:ALA:CA | 1:A:195:ALA:C | 1:A:196:THR:N | 5 | 6.7 |
| (1,4) | 1:A:195:ALA:N | 1:A:195:ALA:CA | 1:A:195:ALA:C | 1:A:196:THR:N | 14 | 6.7 |
| (1,4) | 1:A:195:ALA:N | 1:A:195:ALA:CA | 1:A:195:ALA:C | 1:A:196:THR:N | 2 | 6.6 |
| (1,37) | 1:A:215:LEU:C | 1:A:216:GLU:N | 1:A:216:GLU:CA | 1:A:216:GLU:C | 19 | 6.6 |
| (1,4) | 1:A:195:ALA:N | 1:A:195:ALA:CA | 1:A:195:ALA:C | 1:A:196:THR:N | 13 | 6.4 |
| (1,4) | 1:A:195:ALA:N | 1:A:195:ALA:CA | 1:A:195:ALA:C | 1:A:196:THR:N | 11 | 6.3 |
| (1,106) | 1:A:215:LEU:N | 1:A:215:LEU:CA | 1:A:215:LEU:CB | 1:A:215:LEU:CG | 8 | 6.2 |
| (1,4) | 1:A:195:ALA:N | 1:A:195:ALA:CA | 1:A:195:ALA:C | 1:A:196:THR:N | 4 | 5.9 |
| (1,115) | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:CB | 1:A:232:LYS:CG | 1:A:232:LYS:CD | 10 | 5.9 |
| (1,114) | 1:A:232:LYS:N | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:CB | 1:A:232:LYS:CG | 5 | 5.8 |
| (1,106) | 1:A:215:LEU:N | 1:A:215:LEU:CA | 1:A:215:LEU:CB | 1:A:215:LEU:CG | 11 | 5.8 |
| (1,114) | 1:A:232:LYS:N | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:CB | 1:A:232:LYS:CG | 17 | 5.7 |
| (1,121) | 1:A:238:LYS:CA | 1:A:238:LYS:CB | 1:A:238:LYS:CG | 1:A:238:LYS:CD | 12 | 5.6 |
| (1,4) | 1:A:195:ALA:N | 1:A:195:ALA:CA | 1:A:195:ALA:C | 1:A:196:THR:N | 20 | 5.5 |
| (1,81) | 1:A:251:LEU:C | 1:A:252:GLU:N | 1:A:252:GLU:CA | 1:A:252:GLU:C | 15 | 5.4 |
| (1,76) | 1:A:249:LEU:N | 1:A:249:LEU:CA | 1:A:249:LEU:C | 1:A:250:TYR:N | 8 | 5.4 |
| (1,114) | 1:A:232:LYS:N | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:CB | 1:A:232:LYS:CG | 18 | 5.4 |
| (1,76) | 1:A:249:LEU:N | 1:A:249:LEU:CA | 1:A:249:LEU:C | 1:A:250:TYR:N | 2 | 5.3 |
| (1,4) | 1:A:195:ALA:N | 1:A:195:ALA:CA | 1:A:195:ALA:C | 1:A:196:THR:N | 1 | 5.3 |
| (1,34) | 1:A:214:THR:N | 1:A:214:THR:CA | 1:A:214:THR:C | 1:A:215:LEU:N | 18 | 5.3 |
| (1,34) | 1:A:214:THR:N | 1:A:214:THR:CA | 1:A:214:THR:C | 1:A:215:LEU:N | 16 | 5.2 |
| (1,37) | 1:A:215:LEU:C | 1:A:216:GLU:N | 1:A:216:GLU:CA | 1:A:216:GLU:C | 3 | 5.1 |
| (1,114) | 1:A:232:LYS:N | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:CB | 1:A:232:LYS:CG | 9 | 5.1 |
| (1,106) | 1:A:215:LEU:N | 1:A:215:LEU:CA | 1:A:215:LEU:CB | 1:A:215:LEU:CG | 18 | 5.1 |
| (1,121) | 1:A:238:LYS:CA | 1:A:238:LYS:CB | 1:A:238:LYS:CG | 1:A:238:LYS:CD | 9 | 5.0 |
| (1,114) | 1:A:232:LYS:N | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:CB | 1:A:232:LYS:CG | 11 | 5.0 |
| (1,114) | 1:A:232:LYS:N | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:CB | 1:A:232:LYS:CG | 13 | 5.0 |
| (1,4) | 1:A:195:ALA:N | 1:A:195:ALA:CA | 1:A:195:ALA:C | 1:A:196:THR:N | 3 | 4.9 |
| (1,4) | 1:A:195:ALA:N | 1:A:195:ALA:CA | 1:A:195:ALA:C | 1:A:196:THR:N | 12 | 4.9 |
| (1,115) | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:CB | 1:A:232:LYS:CG | 1:A:232:LYS:CD | 20 | 4.9 |
| (1,104) | 1:A:211:ARG:CA | 1:A:211:ARG:CB | 1:A:211:ARG:CG | 1:A:211:ARG:CD | 10 | 4.9 |
| (1,4) | 1:A:195:ALA:N | 1:A:195:ALA:CA | 1:A:195:ALA:C | 1:A:196:THR:N | 7 | 4.8 |
| (1,34) | 1:A:214:THR:N | 1:A:214:THR:CA | 1:A:214:THR:C | 1:A:215:LEU:N | 11 | 4.8 |
| (1,114) | 1:A:232:LYS:N | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:CB | 1:A:232:LYS:CG | 2 | 4.8 |
| (1,114) | 1:A:232:LYS:N | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:CB | 1:A:232:LYS:CG | 19 | 4.8 |
| (1,106) | 1:A:215:LEU:N | 1:A:215:LEU:CA | 1:A:215:LEU:CB | 1:A:215:LEU:CG | 19 | 4.8 |
| (1,76) | 1:A:249:LEU:N | 1:A:249:LEU:CA | 1:A:249:LEU:C | 1:A:250:TYR:N | 17 | 4.7 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,4) | 1:A:195:ALA:N | 1:A:195:ALA:CA | 1:A:195:ALA:C | 1:A:196:THR:N | 19 | 4.7 |
| (1,34) | 1:A:214:THR:N | 1:A:214:THR:CA | 1:A:214:THR:C | 1:A:215:LEU:N | 14 | 4.6 |
| (1,21) | 1:A:205:VAL:C | 1:A:206:VAL:N | 1:A:206:VAL:CA | 1:A:206:VAL:C | 13 | 4.5 |
| (1,121) | 1:A:238:LYS:CA | 1:A:238:LYS:CB | 1:A:238:LYS:CG | 1:A:238:LYS:CD | 16 | 4.5 |
| (1,21) | 1:A:205:VAL:C | 1:A:206:VAL:N | 1:A:206:VAL:CA | 1:A:206:VAL:C | 2 | 4.4 |
| (1,121) | 1:A:238:LYS:CA | 1:A:238:LYS:CB | 1:A:238:LYS:CG | 1:A:238:LYS:CD | 11 | 4.4 |
| (1,60) | 1:A:234:ARG:N | 1:A:234:ARG:CA | 1:A:234:ARG:C | 1:A:235:LEU:N | 20 | 4.3 |
| (1,76) | 1:A:249:LEU:N | 1:A:249:LEU:CA | 1:A:249:LEU:C | 1:A:250:TYR:N | 15 | 4.2 |
| (1,69) | 1:A:241:PRO:C | 1:A:242:GLY:N | 1:A:242:GLY:CA | 1:A:242:GLY:C | 5 | 4.2 |
| (1,37) | 1:A:215:LEU:C | 1:A:216:GLU:N | 1:A:216:GLU:CA | 1:A:216:GLU:C | 9 | 4.2 |
| (1,114) | 1:A:232:LYS:N | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:CB | 1:A:232:LYS:CG | 4 | 4.2 |
| (1,114) | 1:A:232:LYS:N | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:CB | 1:A:232:LYS:CG | 20 | 4.2 |
| (1,37) | 1:A:215:LEU:C | 1:A:216:GLU:N | 1:A:216:GLU:CA | 1:A:216:GLU:C | 13 | 4.1 |
| (1,34) | 1:A:214:THR:N | 1:A:214:THR:CA | 1:A:214:THR:C | 1:A:215:LEU:N | 5 | 4.1 |
| (1,21) | 1:A:205:VAL:C | 1:A:206:VAL:N | 1:A:206:VAL:CA | 1:A:206:VAL:C | 14 | 4.1 |
| (1,21) | 1:A:205:VAL:C | 1:A:206:VAL:N | 1:A:206:VAL:CA | 1:A:206:VAL:C | 16 | 4.1 |
| (1,37) | 1:A:215:LEU:C | 1:A:216:GLU:N | 1:A:216:GLU:CA | 1:A:216:GLU:C | 16 | 4.0 |
| (1,36) | 1:A:215:LEU:N | 1:A:215:LEU:CA | 1:A:215:LEU:C | 1:A:216:GLU:N | 7 | 4.0 |
| (1,36) | 1:A:215:LEU:N | 1:A:215:LEU:CA | 1:A:215:LEU:C | 1:A:216:GLU:N | 14 | 4.0 |
| (1,36) | 1:A:215:LEU:N | 1:A:215:LEU:CA | 1:A:215:LEU:C | 1:A:216:GLU:N | 3 | 3.9 |
| (1,36) | 1:A:215:LEU:N | 1:A:215:LEU:CA | 1:A:215:LEU:C | 1:A:216:GLU:N | 9 | 3.9 |
| (1,34) | 1:A:214:THR:N | 1:A:214:THR:CA | 1:A:214:THR:C | 1:A:215:LEU:N | 9 | 3.9 |
| (1,124) | 1:A:249:LEU:N | 1:A:249:LEU:CA | 1:A:249:LEU:CB | 1:A:249:LEU:CG | 12 | 3.9 |
| (1,114) | 1:A:232:LYS:N | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:CB | 1:A:232:LYS:CG | 6 | 3.9 |
| (1,106) | 1:A:215:LEU:N | 1:A:215:LEU:CA | 1:A:215:LEU:CB | 1:A:215:LEU:CG | 15 | 3.9 |
| (1,81) | 1:A:251:LEU:C | 1:A:252:GLU:N | 1:A:252:GLU:CA | 1:A:252:GLU:C | 7 | 3.8 |
| (1,77) | 1:A:249:LEU:C | 1:A:250:TYR:N | 1:A:250:TYR:CA | 1:A:250:TYR:C | 7 | 3.8 |
| (1,58) | 1:A:233:LEU:N | 1:A:233:LEU:CA | 1:A:233:LEU:C | 1:A:234:ARG:N | 19 | 3.8 |
| (1,38) | 1:A:216:GLU:N | 1:A:216:GLU:CA | 1:A:216:GLU:C | 1:A:217:GLY:N | 14 | 3.8 |
| (1,38) | 1:A:216:GLU:N | 1:A:216:GLU:CA | 1:A:216:GLU:C | 1:A:217:GLY:N | 17 | 3.8 |
| (1,36) | 1:A:215:LEU:N | 1:A:215:LEU:CA | 1:A:215:LEU:C | 1:A:216:GLU:N | 12 | 3.8 |
| (1,30) | 1:A:212:ALA:N | 1:A:212:ALA:CA | 1:A:212:ALA:C | 1:A:213:MET:N | 17 | 3.8 |
| (1,81) | 1:A:251:LEU:C | 1:A:252:GLU:N | 1:A:252:GLU:CA | 1:A:252:GLU:C | 8 | 3.7 |
| (1,81) | 1:A:251:LEU:C | 1:A:252:GLU:N | 1:A:252:GLU:CA | 1:A:252:GLU:C | 13 | 3.7 |
| (1,81) | 1:A:251:LEU:C | 1:A:252:GLU:N | 1:A:252:GLU:CA | 1:A:252:GLU:C | 17 | 3.7 |
| (1,76) | 1:A:249:LEU:N | 1:A:249:LEU:CA | 1:A:249:LEU:C | 1:A:250:TYR:N | 6 | 3.7 |
| (1,69) | 1:A:241:PRO:C | 1:A:242:GLY:N | 1:A:242:GLY:CA | 1:A:242:GLY:C | 1 | 3.7 |
| (1,67) | 1:A:239:GLY:C | 1:A:240:PHE:N | 1:A:240:PHE:CA | 1:A:240:PHE:C | 18 | 3.7 |
| (1,21) | 1:A:205:VAL:C | 1:A:206:VAL:N | 1:A:206:VAL:CA | 1:A:206:VAL:C | 9 | 3.7 |
| (1,123) | 1:A:248:ASP:CA | 1:A:248:ASP:CB | 1:A:248:ASP:CG | 1:A:248:ASP:OD1 | 13 | 3.7 |
| (1,114) | 1:A:232:LYS:N | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:CB | 1:A:232:LYS:CG | 1 | 3.7 |
| (1,114) | 1:A:232:LYS:N | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:CB | 1:A:232:LYS:CG | 3 | 3.7 |
| (1,114) | 1:A:232:LYS:N | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:CB | 1:A:232:LYS:CG | 12 | 3.7 |
| (1,106) | 1:A:215:LEU:N | 1:A:215:LEU:CA | 1:A:215:LEU:CB | 1:A:215:LEU:CG | 5 | 3.7 |
| (1,106) | 1:A:215:LEU:N | 1:A:215:LEU:CA | 1:A:215:LEU:CB | 1:A:215:LEU:CG | 16 | 3.7 |
| (1,104) | 1:A:211:ARG:CA | 1:A:211:ARG:CB | 1:A:211:ARG:CG | 1:A:211:ARG:CD | 4 | 3.7 |
| (1,81) | 1:A:251:LEU:C | 1:A:252:GLU:N | 1:A:252:GLU:CA | 1:A:252:GLU:C | 2 | 3.6 |
| (1,81) | 1:A:251:LEU:C | 1:A:252:GLU:N | 1:A:252:GLU:CA | 1:A:252:GLU:C | 18 | 3.6 |
| (1,7) | 1:A:196:THR:C | 1:A:197:LEU:N | 1:A:197:LEU:CA | 1:A:197:LEU:C | 14 | 3.6 |
| (1,67) | 1:A:239:GLY:C | 1:A:240:PHE:N | 1:A:240:PHE:CA | 1:A:240:PHE:C | 8 | 3.6 |
| (1,60) | 1:A:234:ARG:N | 1:A:234:ARG:CA | 1:A:234:ARG:C | 1:A:235:LEU:N | 10 | 3.6 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,55) | 1:A:231:ARG:C | 1:A:232:LYS:N | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:C | 17 | 3.6 |
| (1,4) | 1:A:195:ALA:N | 1:A:195:ALA:CA | 1:A:195:ALA:C | 1:A:196:THR:N | 10 | 3.6 |
| (1,34) | 1:A:214:THR:N | 1:A:214:THR:CA | 1:A:214:THR:C | 1:A:215:LEU:N | 12 | 3.6 |
| (1,115) | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:CB | 1:A:232:LYS:CG | 1:A:232:LYS:CD | 13 | 3.6 |
| (1,104) | 1:A:211:ARG:CA | 1:A:211:ARG:CB | 1:A:211:ARG:CG | 1:A:211:ARG:CD | 20 | 3.6 |
| (1,81) | 1:A:251:LEU:C | 1:A:252:GLU:N | 1:A:252:GLU:CA | 1:A:252:GLU:C | 16 | 3.5 |
| (1,71) | 1:A:243:PRO:C | 1:A:244:ALA:N | 1:A:244:ALA:CA | 1:A:244:ALA:C | 9 | 3.5 |
| (1,37) | 1:A:215:LEU:C | 1:A:216:GLU:N | 1:A:216:GLU:CA | 1:A:216:GLU:C | 14 | 3.5 |
| (1,34) | 1:A:214:THR:N | 1:A:214:THR:CA | 1:A:214:THR:C | 1:A:215:LEU:N | 1 | 3.5 |
| (1,34) | 1:A:214:THR:N | 1:A:214:THR:CA | 1:A:214:THR:C | 1:A:215:LEU:N | 19 | 3.5 |
| (1,31) | 1:A:212:ALA:C | 1:A:213:MET:N | 1:A:213:MET:CA | 1:A:213:MET:C | 5 | 3.5 |
| (1,21) | 1:A:205:VAL:C | 1:A:206:VAL:N | 1:A:206:VAL:CA | 1:A:206:VAL:C | 20 | 3.5 |
| (1,113) | 1:A:231:ARG:CA | 1:A:231:ARG:CB | 1:A:231:ARG:CG | 1:A:231:ARG:CD | 14 | 3.5 |
| (1,104) | 1:A:211:ARG:CA | 1:A:211:ARG:CB | 1:A:211:ARG:CG | 1:A:211:ARG:CD | 15 | 3.5 |
| (1,102) | 1:A:209:LYS:N | 1:A:209:LYS:CA | 1:A:209:LYS:CB | 1:A:209:LYS:CG | 13 | 3.5 |
| (1,60) | 1:A:234:ARG:N | 1:A:234:ARG:CA | 1:A:234:ARG:C | 1:A:235:LEU:N | 11 | 3.4 |
| (1,34) | 1:A:214:THR:N | 1:A:214:THR:CA | 1:A:214:THR:C | 1:A:215:LEU:N | 20 | 3.4 |
| (1,2) | 1:A:194:TYR:N | 1:A:194:TYR:CA | 1:A:194:TYR:C | 1:A:195:ALA:N | 12 | 3.4 |
| (1,115) | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:CB | 1:A:232:LYS:CG | 1:A:232:LYS:CD | 3 | 3.4 |
| (1,102) | 1:A:209:LYS:N | 1:A:209:LYS:CA | 1:A:209:LYS:CB | 1:A:209:LYS:CG | 4 | 3.4 |
| (1,77) | 1:A:249:LEU:C | 1:A:250:TYR:N | 1:A:250:TYR:CA | 1:A:250:TYR:C | 19 | 3.3 |
| (1,76) | 1:A:249:LEU:N | 1:A:249:LEU:CA | 1:A:249:LEU:C | 1:A:250:TYR:N | 20 | 3.3 |
| (1,21) | 1:A:205:VAL:C | 1:A:206:VAL:N | 1:A:206:VAL:CA | 1:A:206:VAL:C | 3 | 3.3 |
| (1,113) | 1:A:231:ARG:CA | 1:A:231:ARG:CB | 1:A:231:ARG:CG | 1:A:231:ARG:CD | 2 | 3.3 |
| (1,106) | 1:A:215:LEU:N | 1:A:215:LEU:CA | 1:A:215:LEU:CB | 1:A:215:LEU:CG | 6 | 3.3 |
| (1,10) | 1:A:198:ASP:N | 1:A:198:ASP:CA | 1:A:198:ASP:C | 1:A:199:VAL:N | 11 | 3.3 |
| (1,36) | 1:A:215:LEU:N | 1:A:215:LEU:CA | 1:A:215:LEU:C | 1:A:216:GLU:N | 19 | 3.2 |
| (1,34) | 1:A:214:THR:N | 1:A:214:THR:CA | 1:A:214:THR:C | 1:A:215:LEU:N | 6 | 3.2 |
| (1,31) | 1:A:212:ALA:C | 1:A:213:MET:N | 1:A:213:MET:CA | 1:A:213:MET:C | 9 | 3.2 |
| (1,31) | 1:A:212:ALA:C | 1:A:213:MET:N | 1:A:213:MET:CA | 1:A:213:MET:C | 13 | 3.2 |
| (1,21) | 1:A:205:VAL:C | 1:A:206:VAL:N | 1:A:206:VAL:CA | 1:A:206:VAL:C | 5 | 3.2 |
| (1,114) | 1:A:232:LYS:N | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:CB | 1:A:232:LYS:CG | 14 | 3.2 |
| (1,113) | 1:A:231:ARG:CA | 1:A:231:ARG:CB | 1:A:231:ARG:CG | 1:A:231:ARG:CD | 8 | 3.2 |
| (1,102) | 1:A:209:LYS:N | 1:A:209:LYS:CA | 1:A:209:LYS:CB | 1:A:209:LYS:CG | 10 | 3.2 |
| (1,77) | 1:A:249:LEU:C | 1:A:250:TYR:N | 1:A:250:TYR:CA | 1:A:250:TYR:C | 15 | 3.1 |
| (1,69) | 1:A:241:PRO:C | 1:A:242:GLY:N | 1:A:242:GLY:CA | 1:A:242:GLY:C | 14 | 3.1 |
| (1,36) | 1:A:215:LEU:N | 1:A:215:LEU:CA | 1:A:215:LEU:C | 1:A:216:GLU:N | 13 | 3.1 |
| (1,34) | 1:A:214:THR:N | 1:A:214:THR:CA | 1:A:214:THR:C | 1:A:215:LEU:N | 4 | 3.1 |
| (1,34) | 1:A:214:THR:N | 1:A:214:THR:CA | 1:A:214:THR:C | 1:A:215:LEU:N | 13 | 3.1 |
| (1,31) | 1:A:212:ALA:C | 1:A:213:MET:N | 1:A:213:MET:CA | 1:A:213:MET:C | 8 | 3.1 |
| (1,21) | 1:A:205:VAL:C | 1:A:206:VAL:N | 1:A:206:VAL:CA | 1:A:206:VAL:C | 6 | 3.1 |
| (1,121) | 1:A:238:LYS:CA | 1:A:238:LYS:CB | 1:A:238:LYS:CG | 1:A:238:LYS:CD | 13 | 3.1 |
| (1,106) | 1:A:215:LEU:N | 1:A:215:LEU:CA | 1:A:215:LEU:CB | 1:A:215:LEU:CG | 9 | 3.1 |
| (1,81) | 1:A:251:LEU:C | 1:A:252:GLU:N | 1:A:252:GLU:CA | 1:A:252:GLU:C | 19 | 3.0 |
| (1,67) | 1:A:239:GLY:C | 1:A:240:PHE:N | 1:A:240:PHE:CA | 1:A:240:PHE:C | 11 | 3.0 |
| (1,37) | 1:A:215:LEU:C | 1:A:216:GLU:N | 1:A:216:GLU:CA | 1:A:216:GLU:C | 17 | 3.0 |
| (1,21) | 1:A:205:VAL:C | 1:A:206:VAL:N | 1:A:206:VAL:CA | 1:A:206:VAL:C | 7 | 3.0 |
| (1,10) | 1:A:198:ASP:N | 1:A:198:ASP:CA | 1:A:198:ASP:C | 1:A:199:VAL:N | 7 | 3.0 |
| (1,81) | 1:A:251:LEU:C | 1:A:252:GLU:N | 1:A:252:GLU:CA | 1:A:252:GLU:C | 3 | 2.9 |
| (1,8) | 1:A:197:LEU:N | 1:A:197:LEU:CA | 1:A:197:LEU:C | 1:A:198:ASP:N | 4 | 2.9 |
| (1,76) | 1:A:249:LEU:N | 1:A:249:LEU:CA | 1:A:249:LEU:C | 1:A:250:TYR:N | 16 | 2.9 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,38) | 1:A:216:GLU:N | 1:A:216:GLU:CA | 1:A:216:GLU:C | 1:A:217:GLY:N | 19 | 2.9 |
| (1,36) | 1:A:215:LEU:N | 1:A:215:LEU:CA | 1:A:215:LEU:C | 1:A:216:GLU:N | 16 | 2.9 |
| (1,31) | 1:A:212:ALA:C | 1:A:213:MET:N | 1:A:213:MET:CA | 1:A:213:MET:C | 14 | 2.9 |
| (1,21) | 1:A:205:VAL:C | 1:A:206:VAL:N | 1:A:206:VAL:CA | 1:A:206:VAL:C | 8 | 2.9 |
| (1,109) | 1:A:226:ARG:CA | 1:A:226:ARG:CB | 1:A:226:ARG:CG | 1:A:226:ARG:CD | 2 | 2.9 |
| (1,106) | 1:A:215:LEU:N | 1:A:215:LEU:CA | 1:A:215:LEU:CB | 1:A:215:LEU:CG | 1 | 2.9 |
| (1,10) | 1:A:198:ASP:N | 1:A:198:ASP:CA | 1:A:198:ASP:C | 1:A:199:VAL:N | 4 | 2.9 |
| (1,93) | 1:A:193:LEU:N | 1:A:193:LEU:CA | 1:A:193:LEU:CB | 1:A:193:LEU:CG | 1 | 2.8 |
| (1,69) | 1:A:241:PRO:C | 1:A:242:GLY:N | 1:A:242:GLY:CA | 1:A:242:GLY:C | 13 | 2.8 |
| (1,55) | 1:A:231:ARG:C | 1:A:232:LYS:N | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:C | 9 | 2.8 |
| (1,55) | 1:A:231:ARG:C | 1:A:232:LYS:N | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:C | 19 | 2.8 |
| (1,36) | 1:A:215:LEU:N | 1:A:215:LEU:CA | 1:A:215:LEU:C | 1:A:216:GLU:N | 17 | 2.8 |
| (1,31) | 1:A:212:ALA:C | 1:A:213:MET:N | 1:A:213:MET:CA | 1:A:213:MET:C | 7 | 2.8 |
| (1,21) | 1:A:205:VAL:C | 1:A:206:VAL:N | 1:A:206:VAL:CA | 1:A:206:VAL:C | 1 | 2.8 |
| (1,21) | 1:A:205:VAL:C | 1:A:206:VAL:N | 1:A:206:VAL:CA | 1:A:206:VAL:C | 11 | 2.8 |
| (1,121) | 1:A:238:LYS:CA | 1:A:238:LYS:CB | 1:A:238:LYS:CG | 1:A:238:LYS:CD | 3 | 2.8 |
| (1,113) | 1:A:231:ARG:CA | 1:A:231:ARG:CB | 1:A:231:ARG:CG | 1:A:231:ARG:CD | 9 | 2.8 |
| (1,113) | 1:A:231:ARG:CA | 1:A:231:ARG:CB | 1:A:231:ARG:CG | 1:A:231:ARG:CD | 16 | 2.8 |
| (1,10) | 1:A:198:ASP:N | 1:A:198:ASP:CA | 1:A:198:ASP:C | 1:A:199:VAL:N | 5 | 2.8 |
| (1,55) | 1:A:231:ARG:C | 1:A:232:LYS:N | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:C | 15 | 2.7 |
| (1,38) | 1:A:216:GLU:N | 1:A:216:GLU:CA | 1:A:216:GLU:C | 1:A:217:GLY:N | 6 | 2.7 |
| (1,38) | 1:A:216:GLU:N | 1:A:216:GLU:CA | 1:A:216:GLU:C | 1:A:217:GLY:N | 16 | 2.7 |
| (1,31) | 1:A:212:ALA:C | 1:A:213:MET:N | 1:A:213:MET:CA | 1:A:213:MET:C | 1 | 2.7 |
| (1,31) | 1:A:212:ALA:C | 1:A:213:MET:N | 1:A:213:MET:CA | 1:A:213:MET:C | 3 | 2.7 |
| (1,115) | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:CB | 1:A:232:LYS:CG | 1:A:232:LYS:CD | 19 | 2.7 |
| (1,114) | 1:A:232:LYS:N | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:CB | 1:A:232:LYS:CG | 16 | 2.7 |
| (1,10) | 1:A:198:ASP:N | 1:A:198:ASP:CA | 1:A:198:ASP:C | 1:A:199:VAL:N | 14 | 2.7 |
| (1,81) | 1:A:251:LEU:C | 1:A:252:GLU:N | 1:A:252:GLU:CA | 1:A:252:GLU:C | 1 | 2.6 |
| (1,34) | 1:A:214:THR:N | 1:A:214:THR:CA | 1:A:214:THR:C | 1:A:215:LEU:N | 2 | 2.6 |
| (1,28) | 1:A:211:ARG:N | 1:A:211:ARG:CA | 1:A:211:ARG:C | 1:A:212:ALA:N | 15 | 2.6 |
| (1,21) | 1:A:205:VAL:C | 1:A:206:VAL:N | 1:A:206:VAL:CA | 1:A:206:VAL:C | 17 | 2.6 |
| (1,121) | 1:A:238:LYS:CA | 1:A:238:LYS:CB | 1:A:238:LYS:CG | 1:A:238:LYS:CD | 14 | 2.6 |
| (1,115) | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:CB | 1:A:232:LYS:CG | 1:A:232:LYS:CD | 4 | 2.6 |
| (1,115) | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:CB | 1:A:232:LYS:CG | 1:A:232:LYS:CD | 6 | 2.6 |
| (1,115) | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:CB | 1:A:232:LYS:CG | 1:A:232:LYS:CD | 9 | 2.6 |
| (1,113) | 1:A:231:ARG:CA | 1:A:231:ARG:CB | 1:A:231:ARG:CG | 1:A:231:ARG:CD | 6 | 2.6 |
| (1,10) | 1:A:198:ASP:N | 1:A:198:ASP:CA | 1:A:198:ASP:C | 1:A:199:VAL:N | 1 | 2.6 |
| (1,10) | 1:A:198:ASP:N | 1:A:198:ASP:CA | 1:A:198:ASP:C | 1:A:199:VAL:N | 20 | 2.6 |
| (1,81) | 1:A:251:LEU:C | 1:A:252:GLU:N | 1:A:252:GLU:CA | 1:A:252:GLU:C | 4 | 2.5 |
| (1,81) | 1:A:251:LEU:C | 1:A:252:GLU:N | 1:A:252:GLU:CA | 1:A:252:GLU:C | 10 | 2.5 |
| (1,77) | 1:A:249:LEU:C | 1:A:250:TYR:N | 1:A:250:TYR:CA | 1:A:250:TYR:C | 8 | 2.5 |
| (1,76) | 1:A:249:LEU:N | 1:A:249:LEU:CA | 1:A:249:LEU:C | 1:A:250:TYR:N | 10 | 2.5 |
| (1,67) | 1:A:239:GLY:C | 1:A:240:PHE:N | 1:A:240:PHE:CA | 1:A:240:PHE:C | 20 | 2.5 |
| (1,63) | 1:A:235:LEU:C | 1:A:236:LYS:N | 1:A:236:LYS:CA | 1:A:236:LYS:C | 5 | 2.5 |
| (1,60) | 1:A:234:ARG:N | 1:A:234:ARG:CA | 1:A:234:ARG:C | 1:A:235:LEU:N | 13 | 2.5 |
| (1,38) | 1:A:216:GLU:N | 1:A:216:GLU:CA | 1:A:216:GLU:C | 1:A:217:GLY:N | 4 | 2.5 |
| (1,36) | 1:A:215:LEU:N | 1:A:215:LEU:CA | 1:A:215:LEU:C | 1:A:216:GLU:N | 5 | 2.5 |
| (1,31) | 1:A:212:ALA:C | 1:A:213:MET:N | 1:A:213:MET:CA | 1:A:213:MET:C | 16 | 2.5 |
| (1,115) | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:CB | 1:A:232:LYS:CG | 1:A:232:LYS:CD | 2 | 2.5 |
| (1,76) | 1:A:249:LEU:N | 1:A:249:LEU:CA | 1:A:249:LEU:C | 1:A:250:TYR:N | 18 | 2.4 |
| (1,69) | 1:A:241:PRO:C | 1:A:242:GLY:N | 1:A:242:GLY:CA | 1:A:242:GLY:C | 7 | 2.4 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,55) | 1:A:231:ARG:C | 1:A:232:LYS:N | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:C | 12 | 2.4 |
| (1,38) | 1:A:216:GLU:N | 1:A:216:GLU:CA | 1:A:216:GLU:C | 1:A:217:GLY:N | 12 | 2.4 |
| (1,36) | 1:A:215:LEU:N | 1:A:215:LEU:CA | 1:A:215:LEU:C | 1:A:216:GLU:N | 18 | 2.4 |
| (1,34) | 1:A:214:THR:N | 1:A:214:THR:CA | 1:A:214:THR:C | 1:A:215:LEU:N | 7 | 2.4 |
| (1,33) | 1:A:213:MET:C | 1:A:214:THR:N | 1:A:214:THR:CA | 1:A:214:THR:C | 19 | 2.4 |
| (1,21) | 1:A:205:VAL:C | 1:A:206:VAL:N | 1:A:206:VAL:CA | 1:A:206:VAL:C | 4 | 2.4 |
| (1,113) | 1:A:231:ARG:CA | 1:A:231:ARG:CB | 1:A:231:ARG:CG | 1:A:231:ARG:CD | 17 | 2.4 |
| (1,102) | 1:A:209:LYS:N | 1:A:209:LYS:CA | 1:A:209:LYS:CB | 1:A:209:LYS:CG | 5 | 2.4 |
| (1,93) | 1:A:193:LEU:N | 1:A:193:LEU:CA | 1:A:193:LEU:CB | 1:A:193:LEU:CG | 10 | 2.3 |
| (1,81) | 1:A:251:LEU:C | 1:A:252:GLU:N | 1:A:252:GLU:CA | 1:A:252:GLU:C | 5 | 2.3 |
| (1,81) | 1:A:251:LEU:C | 1:A:252:GLU:N | 1:A:252:GLU:CA | 1:A:252:GLU:C | 12 | 2.3 |
| (1,76) | 1:A:249:LEU:N | 1:A:249:LEU:CA | 1:A:249:LEU:C | 1:A:250:TYR:N | 13 | 2.3 |
| (1,69) | 1:A:241:PRO:C | 1:A:242:GLY:N | 1:A:242:GLY:CA | 1:A:242:GLY:C | 12 | 2.3 |
| (1,38) | 1:A:216:GLU:N | 1:A:216:GLU:CA | 1:A:216:GLU:C | 1:A:217:GLY:N | 13 | 2.3 |
| (1,36) | 1:A:215:LEU:N | 1:A:215:LEU:CA | 1:A:215:LEU:C | 1:A:216:GLU:N | 1 | 2.3 |
| (1,31) | 1:A:212:ALA:C | 1:A:213:MET:N | 1:A:213:MET:CA | 1:A:213:MET:C | 18 | 2.3 |
| (1,121) | 1:A:238:LYS:CA | 1:A:238:LYS:CB | 1:A:238:LYS:CG | 1:A:238:LYS:CD | 2 | 2.3 |
| (1,121) | 1:A:238:LYS:CA | 1:A:238:LYS:CB | 1:A:238:LYS:CG | 1:A:238:LYS:CD | 5 | 2.3 |
| (1,121) | 1:A:238:LYS:CA | 1:A:238:LYS:CB | 1:A:238:LYS:CG | 1:A:238:LYS:CD | 8 | 2.3 |
| (1,115) | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:CB | 1:A:232:LYS:CG | 1:A:232:LYS:CD | 5 | 2.3 |
| (1,81) | 1:A:251:LEU:C | 1:A:252:GLU:N | 1:A:252:GLU:CA | 1:A:252:GLU:C | 9 | 2.2 |
| (1,81) | 1:A:251:LEU:C | 1:A:252:GLU:N | 1:A:252:GLU:CA | 1:A:252:GLU:C | 11 | 2.2 |
| (1,76) | 1:A:249:LEU:N | 1:A:249:LEU:CA | 1:A:249:LEU:C | 1:A:250:TYR:N | 4 | 2.2 |
| (1,76) | 1:A:249:LEU:N | 1:A:249:LEU:CA | 1:A:249:LEU:C | 1:A:250:TYR:N | 14 | 2.2 |
| (1,69) | 1:A:241:PRO:C | 1:A:242:GLY:N | 1:A:242:GLY:CA | 1:A:242:GLY:C | 10 | 2.2 |
| (1,67) | 1:A:239:GLY:C | 1:A:240:PHE:N | 1:A:240:PHE:CA | 1:A:240:PHE:C | 17 | 2.2 |
| (1,55) | 1:A:231:ARG:C | 1:A:232:LYS:N | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:C | 3 | 2.2 |
| (1,31) | 1:A:212:ALA:C | 1:A:213:MET:N | 1:A:213:MET:CA | 1:A:213:MET:C | 20 | 2.2 |
| (1,28) | 1:A:211:ARG:N | 1:A:211:ARG:CA | 1:A:211:ARG:C | 1:A:212:ALA:N | 12 | 2.2 |
| (1,21) | 1:A:205:VAL:C | 1:A:206:VAL:N | 1:A:206:VAL:CA | 1:A:206:VAL:C | 19 | 2.2 |
| (1,115) | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:CB | 1:A:232:LYS:CG | 1:A:232:LYS:CD | 12 | 2.2 |
| (1,114) | 1:A:232:LYS:N | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:CB | 1:A:232:LYS:CG | 7 | 2.2 |
| (1,102) | 1:A:209:LYS:N | 1:A:209:LYS:CA | 1:A:209:LYS:CB | 1:A:209:LYS:CG | 14 | 2.2 |
| (1,10) | 1:A:198:ASP:N | 1:A:198:ASP:CA | 1:A:198:ASP:C | 1:A:199:VAL:N | 16 | 2.2 |
| (1,76) | 1:A:249:LEU:N | 1:A:249:LEU:CA | 1:A:249:LEU:C | 1:A:250:TYR:N | 9 | 2.1 |
| (1,69) | 1:A:241:PRO:C | 1:A:242:GLY:N | 1:A:242:GLY:CA | 1:A:242:GLY:C | 15 | 2.1 |
| (1,36) | 1:A:215:LEU:N | 1:A:215:LEU:CA | 1:A:215:LEU:C | 1:A:216:GLU:N | 10 | 2.1 |
| (1,31) | 1:A:212:ALA:C | 1:A:213:MET:N | 1:A:213:MET:CA | 1:A:213:MET:C | 6 | 2.1 |
| (1,31) | 1:A:212:ALA:C | 1:A:213:MET:N | 1:A:213:MET:CA | 1:A:213:MET:C | 11 | 2.1 |
| (1,113) | 1:A:231:ARG:CA | 1:A:231:ARG:CB | 1:A:231:ARG:CG | 1:A:231:ARG:CD | 4 | 2.1 |
| (1,107) | 1:A:215:LEU:CA | 1:A:215:LEU:CB | 1:A:215:LEU:CG | 1:A:215:LEU:CD1 | 4 | 2.1 |
| (1,102) | 1:A:209:LYS:N | 1:A:209:LYS:CA | 1:A:209:LYS:CB | 1:A:209:LYS:CG | 17 | 2.1 |
| (1,10) | 1:A:198:ASP:N | 1:A:198:ASP:CA | 1:A:198:ASP:C | 1:A:199:VAL:N | 6 | 2.1 |
| (1,81) | 1:A:251:LEU:C | 1:A:252:GLU:N | 1:A:252:GLU:CA | 1:A:252:GLU:C | 6 | 2.0 |
| (1,77) | 1:A:249:LEU:C | 1:A:250:TYR:N | 1:A:250:TYR:CA | 1:A:250:TYR:C | 14 | 2.0 |
| (1,76) | 1:A:249:LEU:N | 1:A:249:LEU:CA | 1:A:249:LEU:C | 1:A:250:TYR:N | 11 | 2.0 |
| (1,69) | 1:A:241:PRO:C | 1:A:242:GLY:N | 1:A:242:GLY:CA | 1:A:242:GLY:C | 19 | 2.0 |
| (1,60) | 1:A:234:ARG:N | 1:A:234:ARG:CA | 1:A:234:ARG:C | 1:A:235:LEU:N | 8 | 2.0 |
| (1,55) | 1:A:231:ARG:C | 1:A:232:LYS:N | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:C | 10 | 2.0 |
| (1,55) | 1:A:231:ARG:C | 1:A:232:LYS:N | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:C | 13 | 2.0 |
| (1,30) | 1:A:212:ALA:N | 1:A:212:ALA:CA | 1:A:212:ALA:C | 1:A:213:MET:N | 6 | 2.0 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,104) | 1:A:211:ARG:CA | 1:A:211:ARG:CB | 1:A:211:ARG:CG | 1:A:211:ARG:CD | 16 | 2.0 |
| (1,10) | 1:A:198:ASP:N | 1:A:198:ASP:CA | 1:A:198:ASP:C | 1:A:199:VAL:N | 10 | 2.0 |
| (1,76) | 1:A:249:LEU:N | 1:A:249:LEU:CA | 1:A:249:LEU:C | 1:A:250:TYR:N | 19 | 1.9 |
| (1,67) | 1:A:239:GLY:C | 1:A:240:PHE:N | 1:A:240:PHE:CA | 1:A:240:PHE:C | 15 | 1.9 |
| (1,55) | 1:A:231:ARG:C | 1:A:232:LYS:N | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:C | 11 | 1.9 |
| (1,34) | 1:A:214:THR:N | 1:A:214:THR:CA | 1:A:214:THR:C | 1:A:215:LEU:N | 3 | 1.9 |
| (1,31) | 1:A:212:ALA:C | 1:A:213:MET:N | 1:A:213:MET:CA | 1:A:213:MET:C | 15 | 1.9 |
| (1,21) | 1:A:205:VAL:C | 1:A:206:VAL:N | 1:A:206:VAL:CA | 1:A:206:VAL:C | 15 | 1.9 |
| (1,121) | 1:A:238:LYS:CA | 1:A:238:LYS:CB | 1:A:238:LYS:CG | 1:A:238:LYS:CD | 1 | 1.9 |
| (1,121) | 1:A:238:LYS:CA | 1:A:238:LYS:CB | 1:A:238:LYS:CG | 1:A:238:LYS:CD | 6 | 1.9 |
| (1,109) | 1:A:226:ARG:CA | 1:A:226:ARG:CB | 1:A:226:ARG:CG | 1:A:226:ARG:CD | 6 | 1.9 |
| (1,107) | 1:A:215:LEU:CA | 1:A:215:LEU:CB | 1:A:215:LEU:CG | 1:A:215:LEU:CD1 | 11 | 1.9 |
| (1,106) | 1:A:215:LEU:N | 1:A:215:LEU:CA | 1:A:215:LEU:CB | 1:A:215:LEU:CG | 7 | 1.9 |
| (1,104) | 1:A:211:ARG:CA | 1:A:211:ARG:CB | 1:A:211:ARG:CG | 1:A:211:ARG:CD | 12 | 1.9 |
| (1,10) | 1:A:198:ASP:N | 1:A:198:ASP:CA | 1:A:198:ASP:C | 1:A:199:VAL:N | 18 | 1.9 |
| (1,55) | 1:A:231:ARG:C | 1:A:232:LYS:N | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:C | 5 | 1.8 |
| (1,52) | 1:A:229:ALA:N | 1:A:229:ALA:CA | 1:A:229:ALA:C | 1:A:230:GLY:N | 5 | 1.8 |
| (1,38) | 1:A:216:GLU:N | 1:A:216:GLU:CA | 1:A:216:GLU:C | 1:A:217:GLY:N | 7 | 1.8 |
| (1,38) | 1:A:216:GLU:N | 1:A:216:GLU:CA | 1:A:216:GLU:C | 1:A:217:GLY:N | 15 | 1.8 |
| (1,37) | 1:A:215:LEU:C | 1:A:216:GLU:N | 1:A:216:GLU:CA | 1:A:216:GLU:C | 10 | 1.8 |
| (1,37) | 1:A:215:LEU:C | 1:A:216:GLU:N | 1:A:216:GLU:CA | 1:A:216:GLU:C | 12 | 1.8 |
| (1,123) | 1:A:248:ASP:CA | 1:A:248:ASP:CB | 1:A:248:ASP:CG | 1:A:248:ASP:OD1 | 12 | 1.8 |
| (1,114) | 1:A:232:LYS:N | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:CB | 1:A:232:LYS:CG | 15 | 1.8 |
| (1,113) | 1:A:231:ARG:CA | 1:A:231:ARG:CB | 1:A:231:ARG:CG | 1:A:231:ARG:CD | 10 | 1.8 |
| (1,109) | 1:A:226:ARG:CA | 1:A:226:ARG:CB | 1:A:226:ARG:CG | 1:A:226:ARG:CD | 9 | 1.8 |
| (1,106) | 1:A:215:LEU:N | 1:A:215:LEU:CA | 1:A:215:LEU:CB | 1:A:215:LEU:CG | 12 | 1.8 |
| (1,106) | 1:A:215:LEU:N | 1:A:215:LEU:CA | 1:A:215:LEU:CB | 1:A:215:LEU:CG | 17 | 1.8 |
| (1,60) | 1:A:234:ARG:N | 1:A:234:ARG:CA | 1:A:234:ARG:C | 1:A:235:LEU:N | 7 | 1.7 |
| (1,60) | 1:A:234:ARG:N | 1:A:234:ARG:CA | 1:A:234:ARG:C | 1:A:235:LEU:N | 14 | 1.7 |
| (1,55) | 1:A:231:ARG:C | 1:A:232:LYS:N | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:C | 2 | 1.7 |
| (1,38) | 1:A:216:GLU:N | 1:A:216:GLU:CA | 1:A:216:GLU:C | 1:A:217:GLY:N | 3 | 1.7 |
| (1,31) | 1:A:212:ALA:C | 1:A:213:MET:N | 1:A:213:MET:CA | 1:A:213:MET:C | 10 | 1.7 |
| (1,21) | 1:A:205:VAL:C | 1:A:206:VAL:N | 1:A:206:VAL:CA | 1:A:206:VAL:C | 10 | 1.7 |
| (1,124) | 1:A:249:LEU:N | 1:A:249:LEU:CA | 1:A:249:LEU:CB | 1:A:249:LEU:CG | 10 | 1.7 |
| (1,121) | 1:A:238:LYS:CA | 1:A:238:LYS:CB | 1:A:238:LYS:CG | 1:A:238:LYS:CD | 18 | 1.7 |
| (1,115) | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:CB | 1:A:232:LYS:CG | 1:A:232:LYS:CD | 1 | 1.7 |
| (1,115) | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:CB | 1:A:232:LYS:CG | 1:A:232:LYS:CD | 14 | 1.7 |
| (1,113) | 1:A:231:ARG:CA | 1:A:231:ARG:CB | 1:A:231:ARG:CG | 1:A:231:ARG:CD | 18 | 1.7 |
| (1,109) | 1:A:226:ARG:CA | 1:A:226:ARG:CB | 1:A:226:ARG:CG | 1:A:226:ARG:CD | 20 | 1.7 |
| (1,107) | 1:A:215:LEU:CA | 1:A:215:LEU:CB | 1:A:215:LEU:CG | 1:A:215:LEU:CD1 | 7 | 1.7 |
| (1,107) | 1:A:215:LEU:CA | 1:A:215:LEU:CB | 1:A:215:LEU:CG | 1:A:215:LEU:CD1 | 17 | 1.7 |
| (1,106) | 1:A:215:LEU:N | 1:A:215:LEU:CA | 1:A:215:LEU:CB | 1:A:215:LEU:CG | 4 | 1.7 |
| (1,106) | 1:A:215:LEU:N | 1:A:215:LEU:CA | 1:A:215:LEU:CB | 1:A:215:LEU:CG | 10 | 1.7 |
| (1,10) | 1:A:198:ASP:N | 1:A:198:ASP:CA | 1:A:198:ASP:C | 1:A:199:VAL:N | 9 | 1.7 |
| (1,81) | 1:A:251:LEU:C | 1:A:252:GLU:N | 1:A:252:GLU:CA | 1:A:252:GLU:C | 20 | 1.6 |
| (1,8) | 1:A:197:LEU:N | 1:A:197:LEU:CA | 1:A:197:LEU:C | 1:A:198:ASP:N | 20 | 1.6 |
| (1,77) | 1:A:249:LEU:C | 1:A:250:TYR:N | 1:A:250:TYR:CA | 1:A:250:TYR:C | 13 | 1.6 |
| (1,73) | 1:A:247:GLY:C | 1:A:248:ASP:N | 1:A:248:ASP:CA | 1:A:248:ASP:C | 9 | 1.6 |
| (1,69) | 1:A:241:PRO:C | 1:A:242:GLY:N | 1:A:242:GLY:CA | 1:A:242:GLY:C | 4 | 1.6 |
| (1,67) | 1:A:239:GLY:C | 1:A:240:PHE:N | 1:A:240:PHE:CA | 1:A:240:PHE:C | 1 | 1.6 |
| (1,34) | 1:A:214:THR:N | 1:A:214:THR:CA | 1:A:214:THR:C | 1:A:215:LEU:N | 15 | 1.6 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,2) | 1:A:194:TYR:N | 1:A:194:TYR:CA | 1:A:194:TYR:C | 1:A:195:ALA:N | 15 | 1.6 |
| (1,121) | 1:A:238:LYS:CA | 1:A:238:LYS:CB | 1:A:238:LYS:CG | 1:A:238:LYS:CD | 7 | 1.6 |
| (1,121) | 1:A:238:LYS:CA | 1:A:238:LYS:CB | 1:A:238:LYS:CG | 1:A:238:LYS:CD | 19 | 1.6 |
| (1,115) | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:CB | 1:A:232:LYS:CG | 1:A:232:LYS:CD | 18 | 1.6 |
| (1,114) | 1:A:232:LYS:N | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:CB | 1:A:232:LYS:CG | 8 | 1.6 |
| (1,113) | 1:A:231:ARG:CA | 1:A:231:ARG:CB | 1:A:231:ARG:CG | 1:A:231:ARG:CD | 1 | 1.6 |
| (1,107) | 1:A:215:LEU:CA | 1:A:215:LEU:CB | 1:A:215:LEU:CG | 1:A:215:LEU:CD1 | 14 | 1.6 |
| (1,106) | 1:A:215:LEU:N | 1:A:215:LEU:CA | 1:A:215:LEU:CB | 1:A:215:LEU:CG | 13 | 1.6 |
| (1,102) | 1:A:209:LYS:N | 1:A:209:LYS:CA | 1:A:209:LYS:CB | 1:A:209:LYS:CG | 7 | 1.6 |
| (1,77) | 1:A:249:LEU:C | 1:A:250:TYR:N | 1:A:250:TYR:CA | 1:A:250:TYR:C | 16 | 1.5 |
| (1,76) | 1:A:249:LEU:N | 1:A:249:LEU:CA | 1:A:249:LEU:C | 1:A:250:TYR:N | 12 | 1.5 |
| (1,69) | 1:A:241:PRO:C | 1:A:242:GLY:N | 1:A:242:GLY:CA | 1:A:242:GLY:C | 6 | 1.5 |
| (1,60) | 1:A:234:ARG:N | 1:A:234:ARG:CA | 1:A:234:ARG:C | 1:A:235:LEU:N | 12 | 1.5 |
| (1,55) | 1:A:231:ARG:C | 1:A:232:LYS:N | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:C | 4 | 1.5 |
| (1,55) | 1:A:231:ARG:C | 1:A:232:LYS:N | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:C | 16 | 1.5 |
| (1,38) | 1:A:216:GLU:N | 1:A:216:GLU:CA | 1:A:216:GLU:C | 1:A:217:GLY:N | 9 | 1.5 |
| (1,34) | 1:A:214:THR:N | 1:A:214:THR:CA | 1:A:214:THR:C | 1:A:215:LEU:N | 8 | 1.5 |
| (1,31) | 1:A:212:ALA:C | 1:A:213:MET:N | 1:A:213:MET:CA | 1:A:213:MET:C | 2 | 1.5 |
| (1,30) | 1:A:212:ALA:N | 1:A:212:ALA:CA | 1:A:212:ALA:C | 1:A:213:MET:N | 2 | 1.5 |
| (1,126) | 1:A:254:ARG:N | 1:A:254:ARG:CA | 1:A:254:ARG:CB | 1:A:254:ARG:CG | 20 | 1.5 |
| (1,109) | 1:A:226:ARG:CA | 1:A:226:ARG:CB | 1:A:226:ARG:CG | 1:A:226:ARG:CD | 15 | 1.5 |
| (1,109) | 1:A:226:ARG:CA | 1:A:226:ARG:CB | 1:A:226:ARG:CG | 1:A:226:ARG:CD | 16 | 1.5 |
| (1,93) | 1:A:193:LEU:N | 1:A:193:LEU:CA | 1:A:193:LEU:CB | 1:A:193:LEU:CG | 20 | 1.4 |
| (1,8) | 1:A:197:LEU:N | 1:A:197:LEU:CA | 1:A:197:LEU:C | 1:A:198:ASP:N | 15 | 1.4 |
| (1,76) | 1:A:249:LEU:N | 1:A:249:LEU:CA | 1:A:249:LEU:C | 1:A:250:TYR:N | 3 | 1.4 |
| (1,73) | 1:A:247:GLY:C | 1:A:248:ASP:N | 1:A:248:ASP:CA | 1:A:248:ASP:C | 20 | 1.4 |
| (1,60) | 1:A:234:ARG:N | 1:A:234:ARG:CA | 1:A:234:ARG:C | 1:A:235:LEU:N | 6 | 1.4 |
| (1,55) | 1:A:231:ARG:C | 1:A:232:LYS:N | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:C | 6 | 1.4 |
| (1,38) | 1:A:216:GLU:N | 1:A:216:GLU:CA | 1:A:216:GLU:C | 1:A:217:GLY:N | 10 | 1.4 |
| (1,31) | 1:A:212:ALA:C | 1:A:213:MET:N | 1:A:213:MET:CA | 1:A:213:MET:C | 12 | 1.4 |
| (1,123) | 1:A:248:ASP:CA | 1:A:248:ASP:CB | 1:A:248:ASP:CG | 1:A:248:ASP:OD1 | 1 | 1.4 |
| (1,121) | 1:A:238:LYS:CA | 1:A:238:LYS:CB | 1:A:238:LYS:CG | 1:A:238:LYS:CD | 20 | 1.4 |
| (1,115) | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:CB | 1:A:232:LYS:CG | 1:A:232:LYS:CD | 11 | 1.4 |
| (1,109) | 1:A:226:ARG:CA | 1:A:226:ARG:CB | 1:A:226:ARG:CG | 1:A:226:ARG:CD | 1 | 1.4 |
| (1,109) | 1:A:226:ARG:CA | 1:A:226:ARG:CB | 1:A:226:ARG:CG | 1:A:226:ARG:CD | 18 | 1.4 |
| (1,109) | 1:A:226:ARG:CA | 1:A:226:ARG:CB | 1:A:226:ARG:CG | 1:A:226:ARG:CD | 19 | 1.4 |
| (1,104) | 1:A:211:ARG:CA | 1:A:211:ARG:CB | 1:A:211:ARG:CG | 1:A:211:ARG:CD | 5 | 1.4 |
| (1,104) | 1:A:211:ARG:CA | 1:A:211:ARG:CB | 1:A:211:ARG:CG | 1:A:211:ARG:CD | 19 | 1.4 |
| (1,8) | 1:A:197:LEU:N | 1:A:197:LEU:CA | 1:A:197:LEU:C | 1:A:198:ASP:N | 6 | 1.3 |
| (1,60) | 1:A:234:ARG:N | 1:A:234:ARG:CA | 1:A:234:ARG:C | 1:A:235:LEU:N | 9 | 1.3 |
| (1,30) | 1:A:212:ALA:N | 1:A:212:ALA:CA | 1:A:212:ALA:C | 1:A:213:MET:N | 12 | 1.3 |
| (1,21) | 1:A:205:VAL:C | 1:A:206:VAL:N | 1:A:206:VAL:CA | 1:A:206:VAL:C | 12 | 1.3 |
| (1,21) | 1:A:205:VAL:C | 1:A:206:VAL:N | 1:A:206:VAL:CA | 1:A:206:VAL:C | 18 | 1.3 |
| (1,115) | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:CB | 1:A:232:LYS:CG | 1:A:232:LYS:CD | 16 | 1.3 |
| (1,113) | 1:A:231:ARG:CA | 1:A:231:ARG:CB | 1:A:231:ARG:CG | 1:A:231:ARG:CD | 7 | 1.3 |
| (1,106) | 1:A:215:LEU:N | 1:A:215:LEU:CA | 1:A:215:LEU:CB | 1:A:215:LEU:CG | 3 | 1.3 |
| (1,104) | 1:A:211:ARG:CA | 1:A:211:ARG:CB | 1:A:211:ARG:CG | 1:A:211:ARG:CD | 9 | 1.3 |
| (1,102) | 1:A:209:LYS:N | 1:A:209:LYS:CA | 1:A:209:LYS:CB | 1:A:209:LYS:CG | 16 | 1.3 |
| (1,10) | 1:A:198:ASP:N | 1:A:198:ASP:CA | 1:A:198:ASP:C | 1:A:199:VAL:N | 3 | 1.3 |
| (1,88) | 1:A:255:ILE:N | 1:A:255:ILE:CA | 1:A:255:ILE:C | 1:A:256:THR:N | 6 | 1.2 |
| (1,81) | 1:A:251:LEU:C | 1:A:252:GLU:N | 1:A:252:GLU:CA | 1:A:252:GLU:C | 14 | 1.2 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,76) | 1:A:249:LEU:N | 1:A:249:LEU:CA | 1:A:249:LEU:C | 1:A:250:TYR:N | 1 | 1.2 |
| (1,76) | 1:A:249:LEU:N | 1:A:249:LEU:CA | 1:A:249:LEU:C | 1:A:250:TYR:N | 7 | 1.2 |
| (1,60) | 1:A:234:ARG:N | 1:A:234:ARG:CA | 1:A:234:ARG:C | 1:A:235:LEU:N | 4 | 1.2 |
| (1,60) | 1:A:234:ARG:N | 1:A:234:ARG:CA | 1:A:234:ARG:C | 1:A:235:LEU:N | 16 | 1.2 |
| (1,55) | 1:A:231:ARG:C | 1:A:232:LYS:N | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:C | 7 | 1.2 |
| (1,55) | 1:A:231:ARG:C | 1:A:232:LYS:N | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:C | 20 | 1.2 |
| (1,34) | 1:A:214:THR:N | 1:A:214:THR:CA | 1:A:214:THR:C | 1:A:215:LEU:N | 17 | 1.2 |
| (1,113) | 1:A:231:ARG:CA | 1:A:231:ARG:CB | 1:A:231:ARG:CG | 1:A:231:ARG:CD | 11 | 1.2 |
| (1,104) | 1:A:211:ARG:CA | 1:A:211:ARG:CB | 1:A:211:ARG:CG | 1:A:211:ARG:CD | 8 | 1.2 |
| (1,77) | 1:A:249:LEU:C | 1:A:250:TYR:N | 1:A:250:TYR:CA | 1:A:250:TYR:C | 20 | 1.1 |
| (1,72) | 1:A:244:ALA:N | 1:A:244:ALA:CA | 1:A:244:ALA:C | 1:A:245:GLY:N | 14 | 1.1 |
| (1,36) | 1:A:215:LEU:N | 1:A:215:LEU:CA | 1:A:215:LEU:C | 1:A:216:GLU:N | 15 | 1.1 |
| (1,31) | 1:A:212:ALA:C | 1:A:213:MET:N | 1:A:213:MET:CA | 1:A:213:MET:C | 19 | 1.1 |
| (1,2) | 1:A:194:TYR:N | 1:A:194:TYR:CA | 1:A:194:TYR:C | 1:A:195:ALA:N | 10 | 1.1 |
| (1,121) | 1:A:238:LYS:CA | 1:A:238:LYS:CB | 1:A:238:LYS:CG | 1:A:238:LYS:CD | 15 | 1.1 |
| (1,114) | 1:A:232:LYS:N | 1:A:232:LYS:CA | 1:A:232:LYS:CB | 1:A:232:LYS:CG | 10 | 1.1 |
| (1,113) | 1:A:231:ARG:CA | 1:A:231:ARG:CB | 1:A:231:ARG:CG | 1:A:231:ARG:CD | 15 | 1.1 |
| (1,106) | 1:A:215:LEU:N | 1:A:215:LEU:CA | 1:A:215:LEU:CB | 1:A:215:LEU:CG | 14 | 1.1 |