



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Jun 3, 2023 – 06:03 AM EDT

PDB ID : 5UE2
Title : proMMP-7 with heparin octasaccharide bridging between domains
Authors : Fulcher, Y.G.; Prior, S.H.; Linhardt, R.J.; Van Doren, S.R.
Deposited on : 2016-12-29

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

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

MolProbity : 4.02b-467
Mogul : 1.8.5 (274361), CSD as541be (2020)
Percentile statistics : 20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
wwPDB-RCI : v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV : Wang et al. (2010)
wwPDB-ShiftChecker : v1.2
BMRB Restraints Analysis : v1.2
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.33

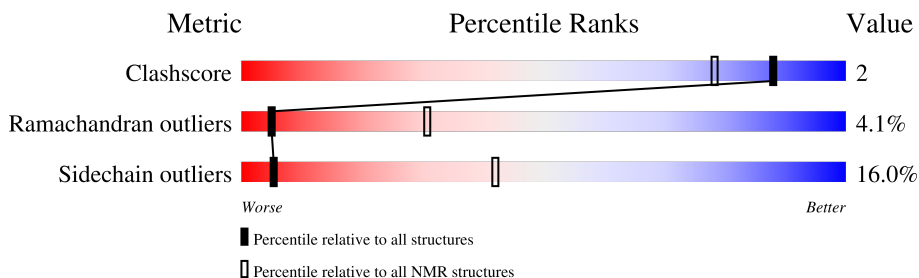
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 86%.

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



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

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

| Mol | Chain | Length | Quality of chain |
|-----|-------|--------|------------------|
| 1 | A | 247 | |
| 2 | B | 8 | |

The following table lists non-polymeric compounds, carbohydrate monomers and non-standard residues in protein, DNA and RNA chains that are outliers for geometric criteria:

| Mol | Chain | Compound | Res | Total models with violations | |
|-----|-------|----------|-----|------------------------------|----------|
| | | | | Chirality | Geometry |
| 2 | B | IDS | 6 | 1 | - |

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 16 models. Model 1 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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:15-A:22, A:34-A:71, A:83-A:216, A:224-A:239 (196) | 0.71 | 1 |

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

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

The models can be grouped into 3 clusters and 3 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition [i](#)

There are 4 unique types of molecules in this entry. The entry contains 4032 atoms, of which 1945 are hydrogens and 0 are deuteriums.

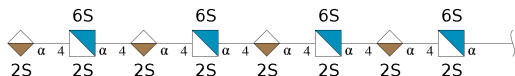
- Molecule 1 is a protein called Matrilysin.

| Mol | Chain | Residues | Atoms | | | | | Trace | |
|-----|-------|----------|-------|------|------|-----|-----|-------|---|
| | | | Total | C | H | N | O | | S |
| 1 | A | 247 | 3828 | 1234 | 1885 | 338 | 362 | 9 | 0 |

There is a discrepancy between the modelled and reference sequences:

| Chain | Residue | Modelled | Actual | Comment | Reference |
|-------|---------|----------|--------|---------------------|------------|
| A | 195 | ALA | GLU | engineered mutation | UNP P09237 |

- Molecule 2 is an oligosaccharide called 2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose.



| Mol | Chain | Residues | Atoms | | | | | Trace | |
|-----|-------|----------|-------|----|----|---|----|-------|---|
| | | | Total | C | H | N | O | | S |
| 2 | B | 8 | 200 | 48 | 60 | 4 | 76 | 12 | 0 |

- Molecule 3 is CALCIUM ION (three-letter code: CA) (formula: Ca).

| Mol | Chain | Residues | Atoms | |
|-----|-------|----------|-------|----|
| 3 | A | 2 | Total | Ca |
| | | | 2 | 2 |

- Molecule 4 is ZINC ION (three-letter code: ZN) (formula: Zn).

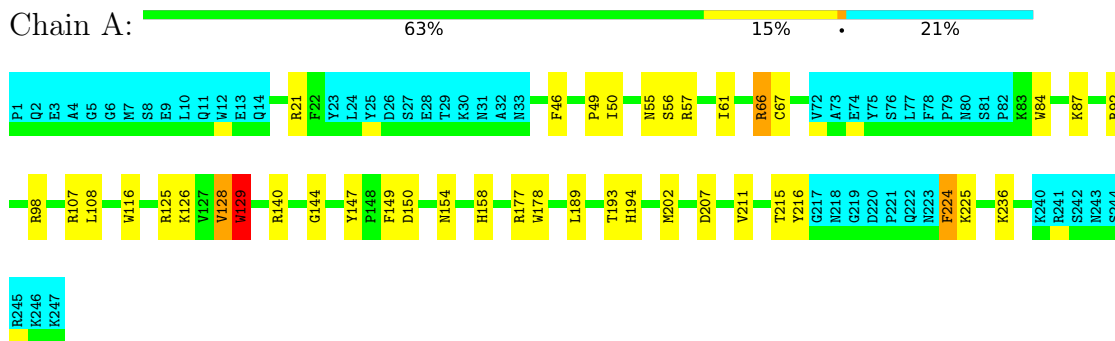
| Mol | Chain | Residues | Atoms | |
|-----|-------|----------|-------|----|
| 4 | A | 2 | Total | Zn |
| | | | 2 | 2 |

4 Residue-property plots [i](#)

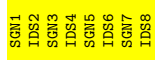
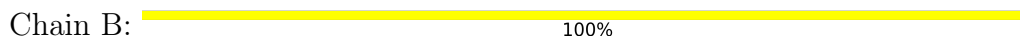
4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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: Matrilysin



- Molecule 2: 2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose



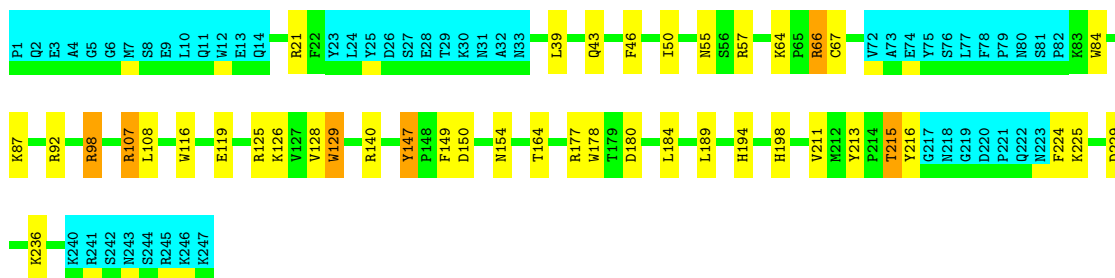
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1 (medoid)

- Molecule 1: Matrilysin





- Molecule 2: 2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose

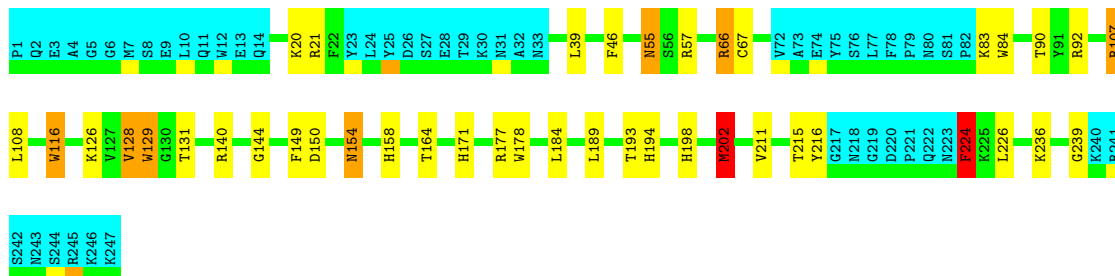
Chain B:  100%



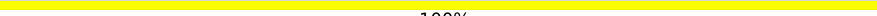
4.2.2 Score per residue for model 2

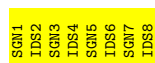
- Molecule 1: Matrilysin

Chain A:  62% 13% 21%



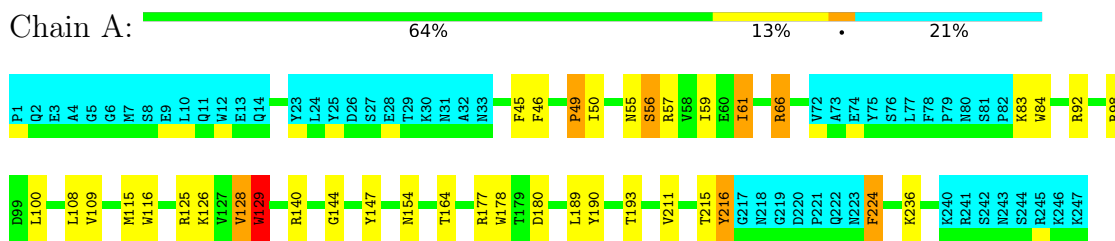
- Molecule 2: 2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose

Chain B:  100%

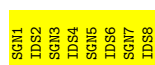


4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Matrilysin

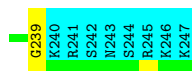
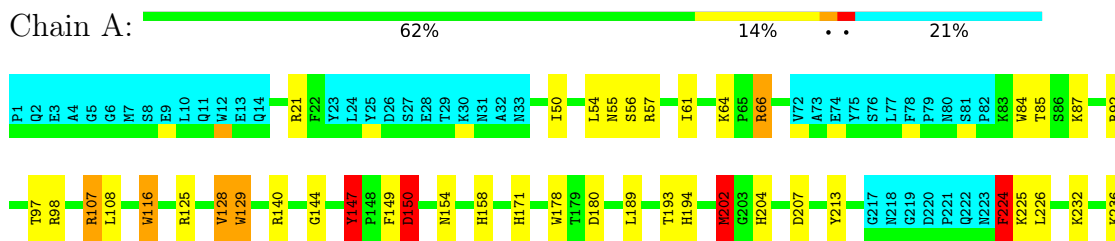


- Molecule 2: 2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose

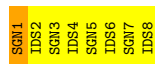
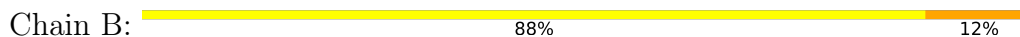


4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Matrilysin

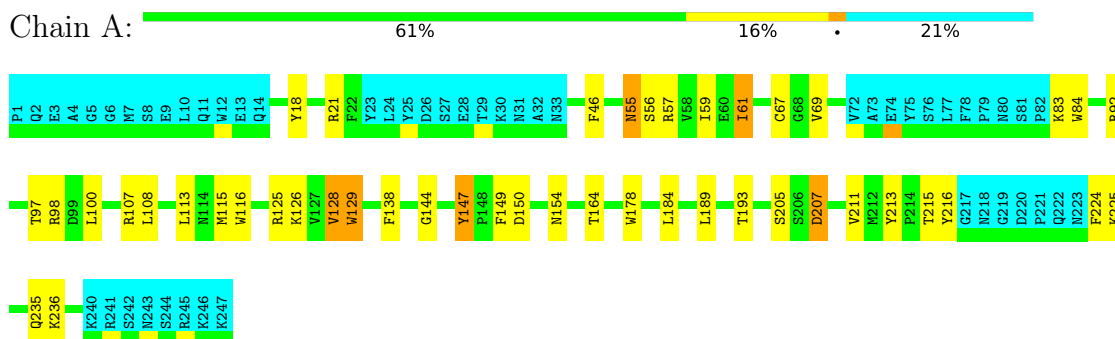


- Molecule 2: 2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose

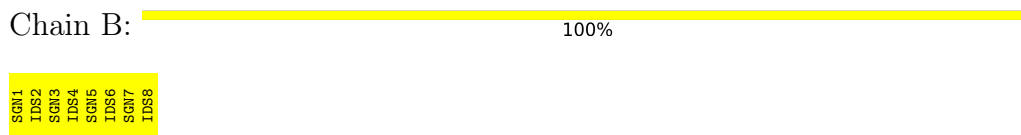


4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Matrilysin

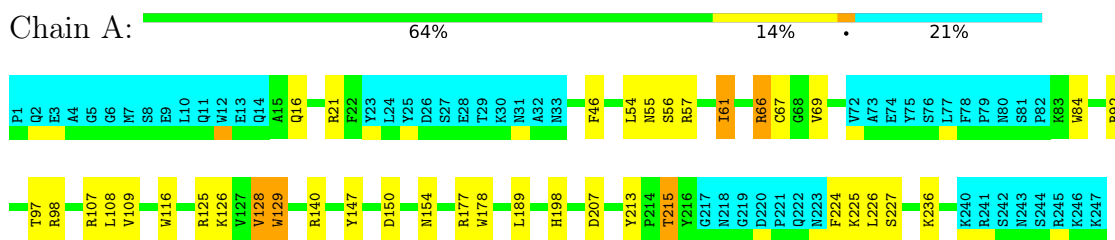


- Molecule 2: 2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose

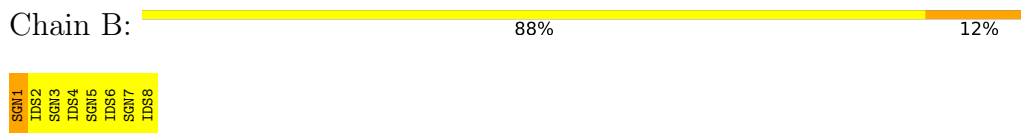


4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Matrilysin

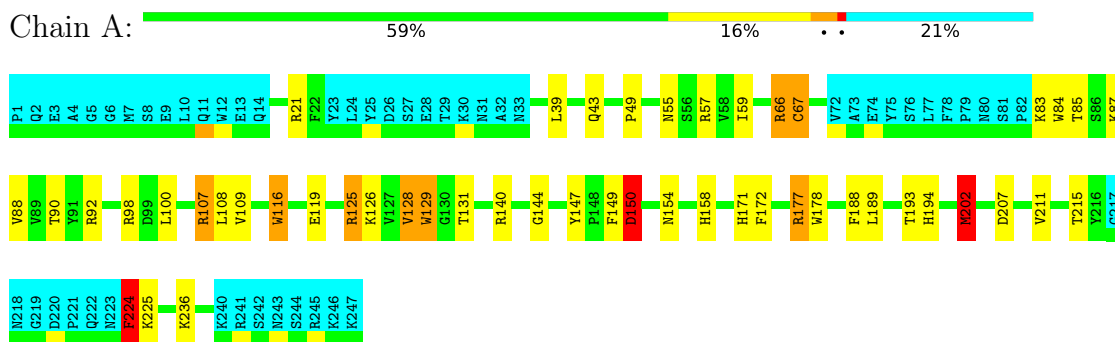


- Molecule 2: 2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose

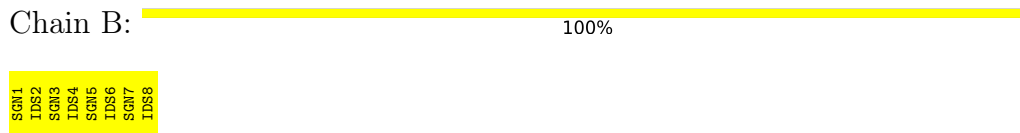


4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Matrilysin

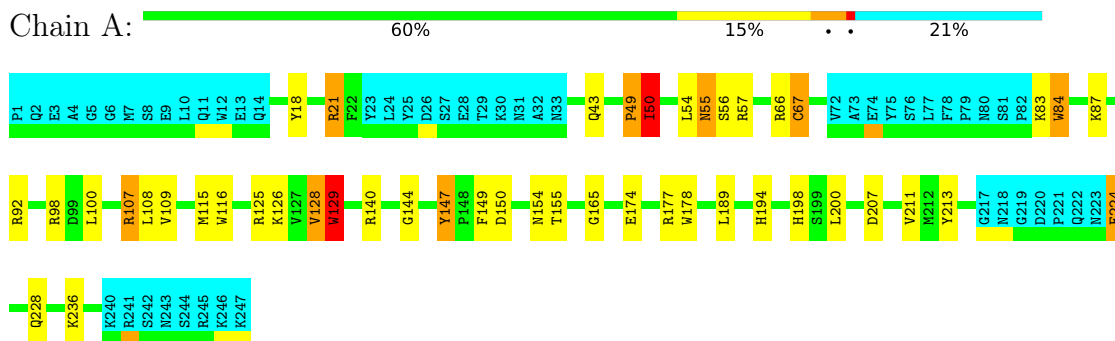


- Molecule 2: 2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose



4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Matrilysin



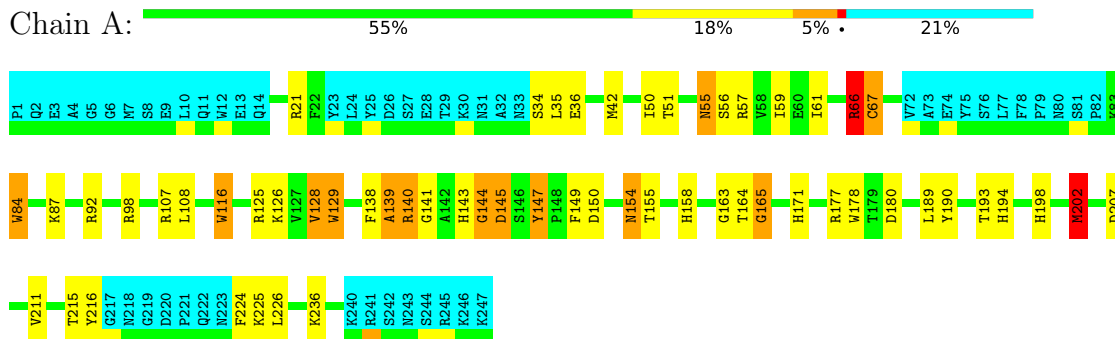
- Molecule 2: 2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose



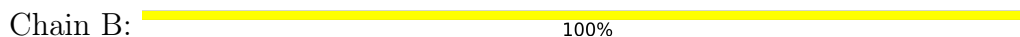
SGN1
IDS2
SGN3
IDS4
SGN5
IDS6
SGN7
IDS8

4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Matrilysin



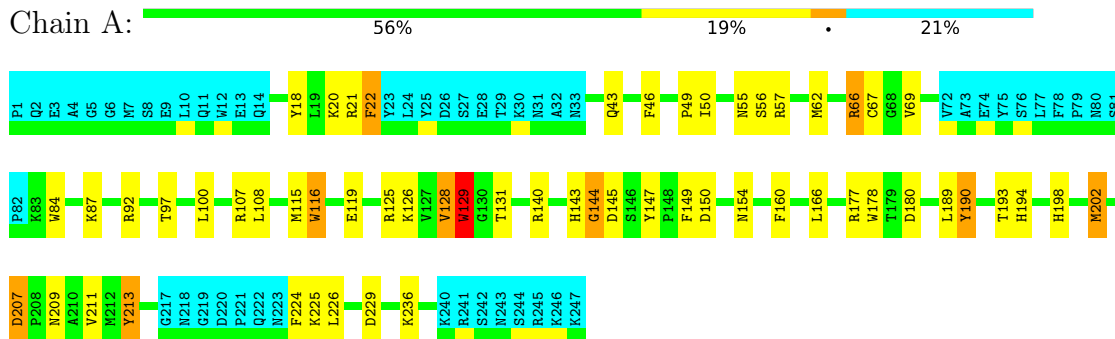
- Molecule 2: 2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose



SGN1
IDS2
SGN3
IDS4
SGN5
IDS6
SGN7
IDS8


4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Matrilysin



- Molecule 2: 2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose

o-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose

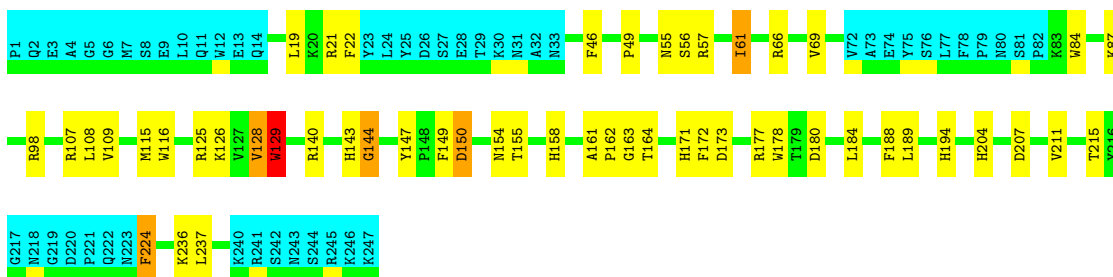
Chain B:  88% 12%

SGN1
IDS2
SGN3
IDS4
SGN5
IDS6
SGN7
IDS8

4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Matrilysin

Chain A:  58% 19% 21%



- Molecule 2: 2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose

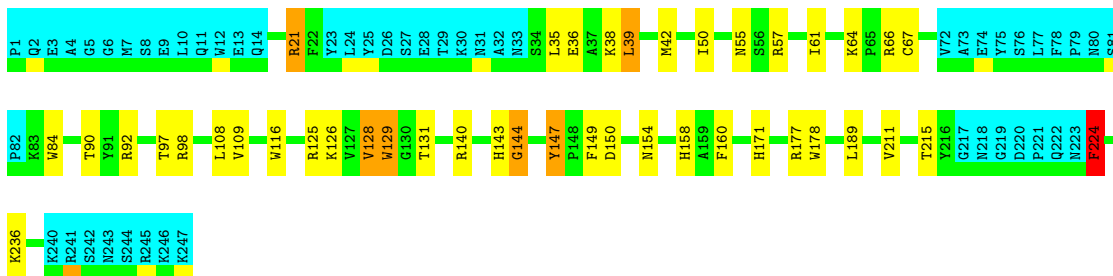
Chain B:  100%

SGN1
IDS2
SGN3
IDS4
SGN5
IDS6
SGN7
IDS8

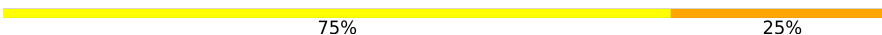
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Matrilysin

Chain A:  62% 15% 21%



- Molecule 2: 2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose

Chain B:  75% 25%

SGN1
IDS2
SGN3
IDS4
SGN5
IDS6
SGN7
IDS8

4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Matrilysin

Chain A:  58% 20% 21%

P1 Q2 E3 A4 G5 G6 M7 S8 E9 Q10 Q11 W12 E13 Q14 R21 F22 Y23 L24 Y25 D26 S27 E28 T29 K30 N31 A32 N33 E41 M42 N55 S56 R57 E60 I61 R66 V69 P70 D71 V72 A73 E74 Y75 S76 L77 F78 P79 N80 S81 P82 K83 M84 K87

R92 R98 L108 V109 W116 E119 R125 K126 V127 V128 W129 G130 T131 R140 G144 D145 S146 Y147 D150 N154 T155 L156 G165 F172 D173 E174 D175 E176 R177 W178 F188 L189 T193 H194 H204 D207 V211 M212 T215 Y216 G217 G219

D220 P221 Q222 M223 F224 K225 Q228 K236 K240 R241 S242 M243 S244 R245 K246 K247

- Molecule 2: 2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose

Chain B:  100%

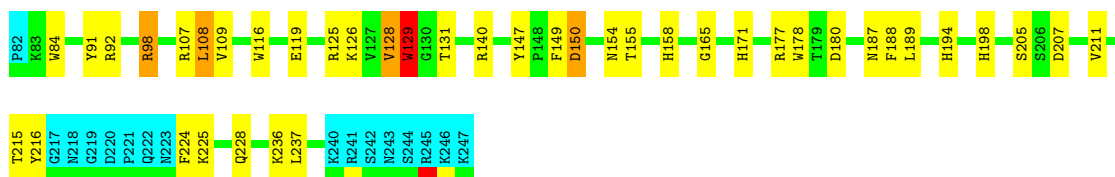
SGN1
IDS2
SGN3
IDS4
SGN5
IDS6
SGN7
IDS8

4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Matrilysin

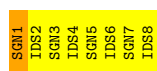
Chain A:  57% 19% 21%

P1 Q2 E3 A4 G5 G6 M7 S8 E9 Q10 Q11 W12 E13 Q14 R21 F22 Y23 L24 Y25 D26 S27 E28 T29 K30 N31 A32 N33 L39 Q43 F46 P49 I50 M53 L54 N55 S56 R57 I61 M62 R66 C67 V72 A73 E74 Y75 S76 L77 F78 P79 N80 S81



- Molecule 2: 2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose

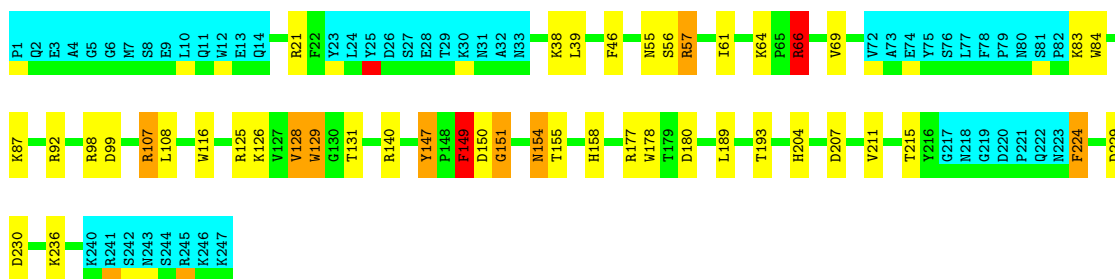
Chain B: 88% 12%



4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Matrilysin

Chain A: 61% 15% 21%



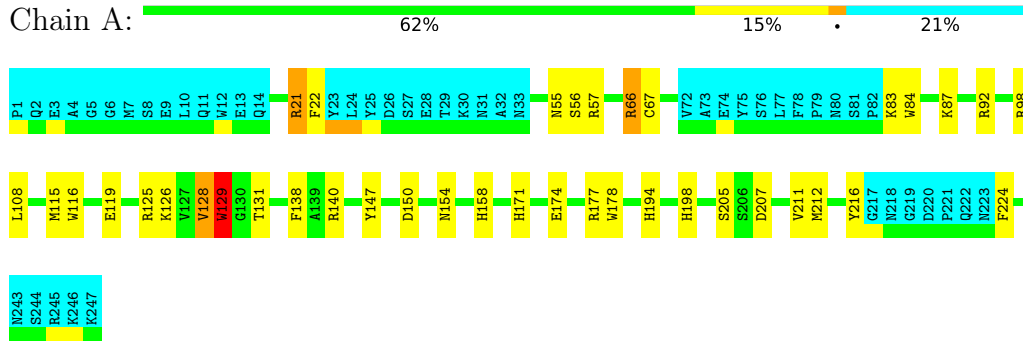
- Molecule 2: 2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose

Chain B: 88% 12%

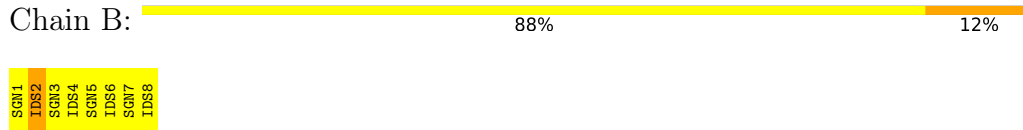


4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Matrilysin



- Molecule 2: 2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose-(1-4)-2-O-sulfo-alpha-L-idopyranuronic acid-(1-4)-2-deoxy-6-O-sulfo-2-(sulfoamino)-alpha-D-glucopyranose



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 120 calculated structures, 16 were deposited, based on the following criterion: *structures with the least restraint violations*.

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

| Software name | Classification | Version |
|---------------|-----------------------|---------|
| CYANA | refinement | 2.1 |
| SYBYL-X | refinement | 2.1.1 |
| CYANA | structure calculation | 2.1 |

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 | 2746 |
| Number of shifts mapped to atoms | 2746 |
| Number of unparsed shifts | 0 |
| Number of shifts with mapping errors | 0 |
| Number of shifts with mapping warnings | 0 |
| Assignment completeness (well-defined parts) | 86% |

6 Model quality i

6.1 Standard geometry i

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

The Z score for a bond length (or angle) is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length (or angle) with $|Z| > 5$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the (average) root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

| Mol | Chain | Bond lengths | | Bond angles | |
|-----|-------|--------------|-----------------------|-------------|------------------------|
| | | RMSZ | #Z>5 | RMSZ | #Z>5 |
| 1 | A | 0.99±0.01 | 0±0/1582 (0.0± 0.0%) | 1.17±0.02 | 13±1/2141 (0.6± 0.1%) |
| All | All | 0.99 | 0/25312 (0.0%) | 1.17 | 204/34256 (0.6%) |

Chiral center outliers are detected by calculating the chiral volume of a chiral center and verifying if the center is modelled as a planar moiety or with the opposite hand. A planarity outlier is detected by checking planarity of atoms in a peptide group, atoms in a mainchain group or atoms of a sidechain that are expected to be planar.

| Mol | Chain | Chirality | Planarity |
|-----|-------|-----------|-----------|
| 1 | A | 0.0±0.0 | 1.2±1.2 |
| All | All | 0 | 19 |

There are no bond-length outliers.

All unique angle outliers are listed below. They are sorted according to the Z-score of the worst occurrence in the ensemble.

| Mol | Chain | Res | Type | Atoms | Z | Observed(°) | Ideal(°) | Models | |
|-----|-------|-----|------|------------|-------|-------------|----------|--------|-------|
| | | | | | | | | Worst | Total |
| 1 | A | 107 | ARG | NE-CZ-NH1 | 8.23 | 124.41 | 120.30 | 6 | 13 |
| 1 | A | 140 | ARG | NE-CZ-NH1 | 7.97 | 124.28 | 120.30 | 14 | 15 |
| 1 | A | 21 | ARG | NE-CZ-NH1 | 7.69 | 124.14 | 120.30 | 14 | 14 |
| 1 | A | 125 | ARG | NE-CZ-NH1 | 7.60 | 124.10 | 120.30 | 9 | 15 |
| 1 | A | 66 | ARG | NE-CZ-NH1 | 7.22 | 123.91 | 120.30 | 10 | 10 |
| 1 | A | 177 | ARG | NE-CZ-NH1 | 7.07 | 123.83 | 120.30 | 14 | 14 |
| 1 | A | 57 | ARG | NE-CZ-NH1 | 6.95 | 123.78 | 120.30 | 8 | 16 |
| 1 | A | 84 | TRP | CE2-CD2-CG | -6.90 | 101.78 | 107.30 | 14 | 16 |
| 1 | A | 98 | ARG | NE-CZ-NH1 | 6.83 | 123.71 | 120.30 | 4 | 12 |
| 1 | A | 178 | TRP | CE2-CD2-CG | -6.78 | 101.88 | 107.30 | 16 | 16 |
| 1 | A | 92 | ARG | NE-CZ-NH1 | 6.73 | 123.67 | 120.30 | 12 | 15 |
| 1 | A | 116 | TRP | CE2-CD2-CG | -6.38 | 102.20 | 107.30 | 12 | 16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Mol | Chain | Res | Type | Atoms | Z | Observed(°) | Ideal(°) | Models | |
|-----|-------|-----|------|------------|-------|-------------|----------|--------|-------|
| | | | | | | | | Worst | Total |
| 1 | A | 129 | TRP | CE2-CD2-CG | -6.22 | 102.33 | 107.30 | 4 | 16 |
| 1 | A | 202 | MET | CG-SD-CE | 6.00 | 109.81 | 100.20 | 4 | 4 |
| 1 | A | 204 | HIS | CG-CD2-NE2 | -5.69 | 98.38 | 109.20 | 15 | 1 |
| 1 | A | 190 | TYR | CB-CG-CD2 | -5.45 | 117.73 | 121.00 | 10 | 1 |
| 1 | A | 22 | PHE | CB-CG-CD1 | -5.41 | 117.01 | 120.80 | 10 | 2 |
| 1 | A | 18 | TYR | CB-CG-CD2 | -5.33 | 117.80 | 121.00 | 8 | 1 |
| 1 | A | 198 | HIS | CG-CD2-NE2 | -5.29 | 99.15 | 109.20 | 9 | 2 |
| 1 | A | 150 | ASP | N-CA-CB | 5.26 | 120.08 | 110.60 | 4 | 2 |
| 1 | A | 160 | PHE | CB-CG-CD2 | 5.07 | 124.35 | 120.80 | 12 | 1 |
| 1 | A | 22 | PHE | CB-CG-CD2 | 5.03 | 124.32 | 120.80 | 10 | 1 |
| 1 | A | 160 | PHE | CB-CG-CD1 | -5.01 | 117.29 | 120.80 | 12 | 1 |

There are no chirality outliers.

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

| Mol | Chain | Res | Type | Group | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|-----------|----------------|
| 1 | A | 216 | TYR | Sidechain | 5 |
| 1 | A | 46 | PHE | Sidechain | 3 |
| 1 | A | 224 | PHE | Sidechain | 2 |
| 1 | A | 147 | TYR | Sidechain | 2 |
| 1 | A | 190 | TYR | Sidechain | 1 |
| 1 | A | 18 | TYR | Sidechain | 1 |
| 1 | A | 160 | PHE | Sidechain | 1 |
| 1 | A | 213 | TYR | Sidechain | 1 |
| 1 | A | 91 | TYR | Sidechain | 1 |
| 1 | A | 149 | PHE | Sidechain | 1 |
| 1 | A | 138 | PHE | Sidechain | 1 |

6.2 Too-close contacts

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 | 1538 | 1512 | 1511 | 6±2 |
| 2 | B | 140 | 60 | 45 | 0±0 |
| All | All | 26912 | 25152 | 24897 | 96 |

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 2.

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

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:46:PHE:CD1 | 1:A:61:ILE:HD12 | 0.62 | 2.29 | 14 | 3 |
| 1:A:158:HIS:NE2 | 1:A:171:HIS:ND1 | 0.58 | 2.46 | 16 | 8 |
| 1:A:46:PHE:CD2 | 1:A:61:ILE:HD12 | 0.57 | 2.34 | 11 | 2 |
| 1:A:46:PHE:CE1 | 1:A:61:ILE:HD12 | 0.56 | 2.36 | 15 | 2 |
| 1:A:194:HIS:CD2 | 1:A:198:HIS:NE2 | 0.55 | 2.73 | 14 | 5 |
| 1:A:116:TRP:CZ3 | 1:A:202:MET:SD | 0.55 | 3.00 | 2 | 5 |
| 1:A:115:MET:SD | 1:A:224:PHE:CZ | 0.55 | 3.00 | 3 | 3 |
| 1:A:224:PHE:C | 1:A:224:PHE:CD1 | 0.54 | 2.81 | 7 | 1 |
| 1:A:224:PHE:C | 1:A:224:PHE:CD2 | 0.54 | 2.80 | 2 | 2 |
| 1:A:67:CYS:SG | 1:A:194:HIS:CD2 | 0.53 | 3.02 | 10 | 3 |
| 1:A:194:HIS:CD2 | 1:A:198:HIS:HE2 | 0.51 | 2.22 | 14 | 3 |
| 1:A:22:PHE:CD1 | 1:A:66:ARG:CZ | 0.50 | 2.94 | 10 | 1 |
| 2:B:1:SGN:O1S | 2:B:1:SGN:C1 | 0.49 | 2.61 | 4 | 2 |
| 1:A:108:LEU:HD23 | 1:A:188:PHE:HB3 | 0.49 | 1.85 | 14 | 1 |
| 1:A:172:PHE:CE1 | 1:A:188:PHE:CZ | 0.48 | 3.01 | 13 | 2 |
| 1:A:49:PRO:O | 1:A:50:ILE:C | 0.48 | 2.52 | 8 | 3 |
| 1:A:172:PHE:CD1 | 1:A:188:PHE:CE1 | 0.48 | 3.02 | 13 | 1 |
| 1:A:143:HIS:CG | 1:A:144:GLY:N | 0.48 | 2.81 | 9 | 4 |
| 1:A:194:HIS:CE1 | 1:A:204:HIS:CE1 | 0.47 | 3.02 | 13 | 3 |
| 1:A:108:LEU:HD23 | 1:A:188:PHE:CB | 0.47 | 2.40 | 14 | 1 |
| 1:A:116:TRP:CE3 | 1:A:226:LEU:HD11 | 0.47 | 2.44 | 4 | 1 |
| 1:A:207:ASP:O | 1:A:213:TYR:CD2 | 0.45 | 2.69 | 8 | 2 |
| 1:A:224:PHE:CD2 | 1:A:224:PHE:C | 0.45 | 2.90 | 12 | 1 |
| 1:A:149:PHE:CE2 | 1:A:158:HIS:CE1 | 0.45 | 3.05 | 15 | 1 |
| 2:B:1:SGN:C1 | 2:B:1:SGN:O2S | 0.44 | 2.65 | 14 | 1 |
| 1:A:172:PHE:CD1 | 1:A:188:PHE:CZ | 0.44 | 3.05 | 13 | 1 |
| 1:A:128:VAL:C | 1:A:129:TRP:CG | 0.44 | 2.91 | 10 | 6 |
| 1:A:67:CYS:HG | 1:A:198:HIS:CD2 | 0.43 | 2.30 | 6 | 1 |
| 1:A:190:TYR:CE1 | 1:A:216:TYR:CZ | 0.43 | 3.05 | 3 | 1 |
| 1:A:46:PHE:CG | 1:A:61:ILE:HD12 | 0.43 | 2.49 | 11 | 1 |
| 1:A:54:LEU:O | 1:A:55:ASN:CG | 0.43 | 2.57 | 8 | 1 |
| 1:A:161:ALA:O | 1:A:163:GLY:N | 0.43 | 2.52 | 11 | 1 |
| 1:A:119:GLU:OE2 | 1:A:226:LEU:HD13 | 0.43 | 2.13 | 10 | 1 |
| 1:A:150:ASP:O | 1:A:151:GLY:C | 0.42 | 2.57 | 15 | 1 |
| 1:A:207:ASP:O | 1:A:213:TYR:CD1 | 0.42 | 2.72 | 4 | 2 |
| 1:A:163:GLY:O | 1:A:165:GLY:N | 0.42 | 2.52 | 9 | 1 |
| 1:A:34:SER:O | 1:A:35:LEU:C | 0.42 | 2.57 | 9 | 1 |
| 1:A:46:PHE:CE2 | 1:A:61:ILE:HD12 | 0.42 | 2.50 | 5 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|-----------------|-----------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 2:B:1:SGN:O3S | 2:B:1:SGN:O3 | 0.42 | 2.38 | 10 | 1 |
| 2:B:1:SGN:C1 | 2:B:1:SGN:O3S | 0.42 | 2.68 | 15 | 1 |
| 1:A:172:PHE:CE2 | 1:A:188:PHE:CZ | 0.42 | 3.08 | 7 | 1 |
| 1:A:213:TYR:CE2 | 1:A:215:THR:HB | 0.41 | 2.49 | 1 | 1 |
| 1:A:138:PHE:O | 1:A:139:ALA:CB | 0.41 | 2.68 | 9 | 1 |
| 1:A:22:PHE:CE1 | 1:A:66:ARG:CZ | 0.41 | 3.03 | 10 | 1 |
| 1:A:143:HIS:CE1 | 1:A:171:HIS:CE1 | 0.41 | 3.08 | 9 | 1 |
| 1:A:104:THR:O | 1:A:105:VAL:C | 0.41 | 2.58 | 16 | 1 |
| 1:A:21:ARG:NH2 | 2:B:2:IDS:O3S | 0.41 | 2.54 | 16 | 1 |
| 1:A:67:CYS:SG | 1:A:194:HIS:CE1 | 0.41 | 3.14 | 8 | 1 |
| 1:A:38:LYS:O | 1:A:39:LEU:C | 0.41 | 2.58 | 15 | 2 |
| 1:A:115:MET:SD | 1:A:224:PHE:CE1 | 0.41 | 3.14 | 8 | 1 |
| 2:B:3:SGN:O3 | 2:B:4:IDS:O5 | 0.40 | 2.40 | 12 | 1 |
| 1:A:213:TYR:CE1 | 1:A:215:THR:HB | 0.40 | 2.51 | 6 | 1 |
| 1:A:84:TRP:CZ2 | 1:A:200:LEU:CD2 | 0.40 | 3.04 | 8 | 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 | 196/247 (79%) | 170±3 (87±2%) | 18±3 (9±1%) | 8±2 (4±1%) | 5 | 31 |
| All | All | 3136/3952 (79%) | 2716 (87%) | 291 (9%) | 129 (4%) | 5 | 31 |

All 23 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 | 55 | ASN | 16 |
| 1 | A | 154 | ASN | 16 |
| 1 | A | 147 | TYR | 15 |
| 1 | A | 144 | GLY | 11 |
| 1 | A | 66 | ARG | 10 |
| 1 | A | 56 | SER | 10 |
| 1 | A | 128 | VAL | 9 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1 | A | 150 | ASP | 8 |
| 1 | A | 49 | PRO | 6 |
| 1 | A | 155 | THR | 4 |
| 1 | A | 165 | GLY | 4 |
| 1 | A | 129 | TRP | 3 |
| 1 | A | 224 | PHE | 3 |
| 1 | A | 50 | ILE | 3 |
| 1 | A | 239 | GLY | 2 |
| 1 | A | 173 | ASP | 2 |
| 1 | A | 84 | TRP | 1 |
| 1 | A | 139 | ALA | 1 |
| 1 | A | 141 | GLY | 1 |
| 1 | A | 145 | ASP | 1 |
| 1 | A | 164 | THR | 1 |
| 1 | A | 162 | PRO | 1 |
| 1 | A | 151 | GLY | 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 | 161/205 (79%) | 135±5 (84±3%) | 26±5 (16±3%) | 5 | 42 |
| All | All | 2576/3280 (79%) | 2165 (84%) | 411 (16%) | 5 | 42 |

All 86 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 | 108 | LEU | 16 |
| 1 | A | 128 | VAL | 16 |
| 1 | A | 129 | TRP | 16 |
| 1 | A | 236 | LYS | 16 |
| 1 | A | 126 | LYS | 15 |
| 1 | A | 189 | LEU | 15 |
| 1 | A | 224 | PHE | 15 |
| 1 | A | 211 | VAL | 14 |
| 1 | A | 149 | PHE | 12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1 | A | 215 | THR | 12 |
| 1 | A | 87 | LYS | 10 |
| 1 | A | 150 | ASP | 10 |
| 1 | A | 207 | ASP | 10 |
| 1 | A | 67 | CYS | 9 |
| 1 | A | 225 | LYS | 9 |
| 1 | A | 193 | THR | 9 |
| 1 | A | 180 | ASP | 8 |
| 1 | A | 131 | THR | 8 |
| 1 | A | 61 | ILE | 8 |
| 1 | A | 109 | VAL | 8 |
| 1 | A | 107 | ARG | 7 |
| 1 | A | 66 | ARG | 7 |
| 1 | A | 83 | LYS | 7 |
| 1 | A | 50 | ILE | 6 |
| 1 | A | 147 | TYR | 6 |
| 1 | A | 69 | VAL | 6 |
| 1 | A | 39 | LEU | 5 |
| 1 | A | 43 | GLN | 5 |
| 1 | A | 119 | GLU | 5 |
| 1 | A | 164 | THR | 5 |
| 1 | A | 55 | ASN | 5 |
| 1 | A | 202 | MET | 5 |
| 1 | A | 100 | LEU | 5 |
| 1 | A | 97 | THR | 5 |
| 1 | A | 64 | LYS | 4 |
| 1 | A | 98 | ARG | 4 |
| 1 | A | 184 | LEU | 4 |
| 1 | A | 59 | ILE | 4 |
| 1 | A | 21 | ARG | 4 |
| 1 | A | 229 | ASP | 3 |
| 1 | A | 90 | THR | 3 |
| 1 | A | 154 | ASN | 3 |
| 1 | A | 226 | LEU | 3 |
| 1 | A | 115 | MET | 3 |
| 1 | A | 205 | SER | 3 |
| 1 | A | 216 | TYR | 3 |
| 1 | A | 174 | GLU | 3 |
| 1 | A | 228 | GLN | 3 |
| 1 | A | 42 | MET | 3 |
| 1 | A | 145 | ASP | 3 |
| 1 | A | 20 | LYS | 2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1 | A | 85 | THR | 2 |
| 1 | A | 36 | GLU | 2 |
| 1 | A | 62 | MET | 2 |
| 1 | A | 155 | THR | 2 |
| 1 | A | 237 | LEU | 2 |
| 1 | A | 212 | MET | 2 |
| 1 | A | 232 | LYS | 1 |
| 1 | A | 18 | TYR | 1 |
| 1 | A | 113 | LEU | 1 |
| 1 | A | 138 | PHE | 1 |
| 1 | A | 235 | GLN | 1 |
| 1 | A | 16 | GLN | 1 |
| 1 | A | 227 | SER | 1 |
| 1 | A | 88 | VAL | 1 |
| 1 | A | 125 | ARG | 1 |
| 1 | A | 177 | ARG | 1 |
| 1 | A | 51 | THR | 1 |
| 1 | A | 140 | ARG | 1 |
| 1 | A | 166 | LEU | 1 |
| 1 | A | 190 | TYR | 1 |
| 1 | A | 209 | ASN | 1 |
| 1 | A | 19 | LEU | 1 |
| 1 | A | 35 | LEU | 1 |
| 1 | A | 41 | GLU | 1 |
| 1 | A | 60 | GLU | 1 |
| 1 | A | 71 | ASP | 1 |
| 1 | A | 146 | SER | 1 |
| 1 | A | 156 | LEU | 1 |
| 1 | A | 176 | GLU | 1 |
| 1 | A | 53 | MET | 1 |
| 1 | A | 187 | ASN | 1 |
| 1 | A | 57 | ARG | 1 |
| 1 | A | 99 | ASP | 1 |
| 1 | A | 230 | ASP | 1 |
| 1 | A | 22 | PHE | 1 |

6.3.3 RNA

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](#)

8 monosaccharides are modelled in this entry.

In the following table, the Counts columns list the number of bonds for which Mogul statistics could be retrieved, the number of bonds that are observed in the model and the number of bonds that are defined in the chemical component dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. The Z score for a bond length is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length with $|Z| > 2$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the average root-mean-square of all Z scores of the bond lengths.

| Mol | Type | Chain | Res | Link | Counts | Bond lengths | |
|-----|------|-------|-----|------|----------|--------------|-------------|
| | | | | | | RMSZ | #Z>2 |
| 2 | SGN | B | 1 | 2 | 18,19,20 | 3.74±0.05 | 3±0 (18±2%) |
| 2 | IDS | B | 2 | 2 | 16,16,17 | 1.25±0.02 | 1±0 (6±1%) |
| 2 | SGN | B | 3 | 2 | 18,19,20 | 3.77±0.05 | 5±0 (26±2%) |
| 2 | IDS | B | 4 | 2 | 16,16,17 | 1.26±0.02 | 1±0 (6±0%) |
| 2 | SGN | B | 5 | 2 | 18,19,20 | 3.77±0.07 | 5±0 (26±2%) |
| 2 | IDS | B | 6 | 2 | 16,16,17 | 1.27±0.01 | 1±0 (6±0%) |
| 2 | SGN | B | 7 | 2 | 18,19,20 | 3.76±0.05 | 4±0 (25±2%) |
| 2 | IDS | B | 8 | 2 | 16,16,17 | 1.20±0.02 | 1±0 (6±0%) |

In the following table, the Counts columns list the number of angles for which Mogul statistics could be retrieved, the number of angles that are observed in the model and the number of angles that are defined in the chemical component dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. The Z score for a bond angle is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond angle with $|Z| > 2$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the average root-mean-square of all Z scores of the bond angles.

| Mol | Type | Chain | Res | Link | Counts | Bond angles | |
|-----|------|-------|-----|------|----------|-------------|-------------|
| | | | | | | RMSZ | #Z>2 |
| 2 | SGN | B | 1 | 2 | 22,29,31 | 1.42±0.15 | 3±1 (13±4%) |
| 2 | IDS | B | 2 | 2 | 17,24,26 | 1.12±0.14 | 1±1 (5±4%) |
| 2 | SGN | B | 3 | 2 | 22,29,31 | 1.63±0.20 | 4±2 (20±7%) |
| 2 | IDS | B | 4 | 2 | 17,24,26 | 1.08±0.19 | 0±1 (2±4%) |
| 2 | SGN | B | 5 | 2 | 22,29,31 | 1.60±0.17 | 4±1 (20±6%) |

| Mol | Type | Chain | Res | Link | Counts | Bond angles | |
|-----|------|-------|-----|------|----------|-------------|-------------|
| | | | | | | RMSZ | #Z>2 |
| 2 | IDS | B | 6 | 2 | 17,24,26 | 1.04±0.13 | 1±1 (3±3%) |
| 2 | SGN | B | 7 | 2 | 22,29,31 | 1.55±0.21 | 4±1 (16±5%) |
| 2 | IDS | B | 8 | 2 | 17,24,26 | 1.06±0.19 | 1±1 (4±3%) |

In the following table, the Chirals column lists the number of chiral outliers, the number of chiral centers analysed, the number of these observed in the model and the number defined in the chemical component dictionary. Similar counts are reported in the Torsion and Rings columns. '-' means no outliers of that kind were identified.

| Mol | Type | Chain | Res | Link | Chirals | Torsions | Rings |
|-----|------|-------|-----|------|---------|--------------|-----------|
| 2 | SGN | B | 1 | 2 | - | 0±0,11,28,31 | 0±0,1,1,1 |
| 2 | IDS | B | 2 | 2 | - | 0±0,9,26,29 | 0±0,1,1,1 |
| 2 | SGN | B | 3 | 2 | - | 0±0,11,28,31 | 0±0,1,1,1 |
| 2 | IDS | B | 4 | 2 | - | 0±0,9,26,29 | 0±0,1,1,1 |
| 2 | SGN | B | 5 | 2 | - | 0±0,11,28,31 | 0±0,1,1,1 |
| 2 | IDS | B | 6 | 2 | - | 0±0,9,26,29 | 0±0,1,1,1 |
| 2 | SGN | B | 7 | 2 | - | 0±0,11,28,31 | 0±0,1,1,1 |
| 2 | IDS | B | 8 | 2 | - | 0±0,9,26,29 | 0±0,1,1,1 |

All unique bond outliers are listed below. They are sorted according to the Z-score of the worst occurrence in the ensemble.

| Mol | Chain | Res | Type | Atoms | Z | Observed(Å) | Ideal(Å) | Models | |
|-----|-------|-----|------|--------|-------|-------------|----------|--------|-------|
| | | | | | | | | Worst | Total |
| 2 | B | 5 | SGN | S1-N2 | 15.30 | 1.80 | 1.59 | 5 | 16 |
| 2 | B | 3 | SGN | S1-N2 | 15.22 | 1.80 | 1.59 | 5 | 16 |
| 2 | B | 7 | SGN | S1-N2 | 15.13 | 1.79 | 1.59 | 2 | 16 |
| 2 | B | 1 | SGN | S1-N2 | 15.12 | 1.79 | 1.59 | 2 | 16 |
| 2 | B | 7 | SGN | O2S-S1 | 3.15 | 1.45 | 1.42 | 11 | 16 |
| 2 | B | 3 | SGN | O1S-S1 | 3.10 | 1.45 | 1.42 | 16 | 16 |
| 2 | B | 3 | SGN | O2S-S1 | 3.06 | 1.45 | 1.42 | 6 | 16 |
| 2 | B | 5 | SGN | O1S-S1 | 3.02 | 1.45 | 1.42 | 11 | 16 |
| 2 | B | 7 | SGN | O1S-S1 | 3.01 | 1.45 | 1.42 | 4 | 16 |
| 2 | B | 7 | SGN | C1-C2 | 3.00 | 1.56 | 1.52 | 8 | 16 |
| 2 | B | 1 | SGN | O1S-S1 | 3.00 | 1.45 | 1.42 | 11 | 16 |
| 2 | B | 2 | IDS | C1-C2 | 2.96 | 1.56 | 1.51 | 2 | 16 |
| 2 | B | 5 | SGN | O2S-S1 | 2.94 | 1.45 | 1.42 | 3 | 16 |
| 2 | B | 1 | SGN | O2S-S1 | 2.94 | 1.45 | 1.42 | 16 | 16 |
| 2 | B | 8 | IDS | C1-C2 | 2.88 | 1.56 | 1.51 | 1 | 16 |
| 2 | B | 4 | IDS | C1-C2 | 2.84 | 1.56 | 1.51 | 9 | 16 |
| 2 | B | 6 | IDS | C1-C2 | 2.82 | 1.56 | 1.51 | 13 | 16 |
| 2 | B | 5 | SGN | C1-C2 | 2.78 | 1.56 | 1.52 | 5 | 16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Mol | Chain | Res | Type | Atoms | Z | Observed(Å) | Ideal(Å) | Models | |
|-----|-------|-----|------|-------|------|-------------|----------|--------|-------|
| | | | | | | | | Worst | Total |
| 2 | B | 3 | SGN | C1-C2 | 2.73 | 1.56 | 1.52 | 5 | 16 |
| 2 | B | 3 | SGN | O6-S2 | 2.27 | 1.50 | 1.56 | 13 | 12 |
| 2 | B | 5 | SGN | O6-S2 | 2.24 | 1.50 | 1.56 | 2 | 12 |
| 2 | B | 1 | SGN | O6-S2 | 2.16 | 1.51 | 1.56 | 16 | 4 |
| 2 | B | 1 | SGN | C1-C2 | 2.14 | 1.55 | 1.52 | 10 | 2 |
| 2 | B | 7 | SGN | O6-S2 | 2.12 | 1.51 | 1.56 | 4 | 8 |
| 2 | B | 2 | IDS | O2-C2 | 2.08 | 1.44 | 1.47 | 16 | 1 |

All unique angle outliers are listed below. They are sorted according to the Z-score of the worst occurrence in the ensemble.

| Mol | Chain | Res | Type | Atoms | Z | Observed(°) | Ideal(°) | Models | |
|-----|-------|-----|------|------------|------|-------------|----------|--------|-------|
| | | | | | | | | Worst | Total |
| 2 | B | 3 | SGN | O6-C6-C5 | 4.92 | 116.79 | 107.62 | 11 | 4 |
| 2 | B | 8 | IDS | O2-C2-C3 | 4.46 | 113.19 | 106.95 | 13 | 7 |
| 2 | B | 5 | SGN | O3-C3-C2 | 4.27 | 100.62 | 109.47 | 11 | 3 |
| 2 | B | 7 | SGN | O1S-S1-O2S | 4.14 | 110.39 | 120.16 | 14 | 9 |
| 2 | B | 4 | IDS | O2-C2-C3 | 4.13 | 112.72 | 106.95 | 11 | 1 |
| 2 | B | 7 | SGN | O6-C6-C5 | 4.12 | 115.31 | 107.62 | 9 | 7 |
| 2 | B | 1 | SGN | O1S-S1-O2S | 4.11 | 110.45 | 120.16 | 2 | 9 |
| 2 | B | 3 | SGN | O1S-S1-O2S | 4.07 | 110.53 | 120.16 | 2 | 12 |
| 2 | B | 5 | SGN | O1S-S1-O2S | 3.98 | 110.77 | 120.16 | 6 | 10 |
| 2 | B | 5 | SGN | O6-C6-C5 | 3.93 | 114.96 | 107.62 | 15 | 4 |
| 2 | B | 1 | SGN | O2S-S1-N2 | 3.79 | 101.95 | 108.87 | 11 | 8 |
| 2 | B | 5 | SGN | O1S-S1-N2 | 3.69 | 102.14 | 108.87 | 7 | 9 |
| 2 | B | 3 | SGN | O2S-S1-N2 | 3.61 | 102.28 | 108.87 | 7 | 13 |
| 2 | B | 1 | SGN | O1S-S1-N2 | 3.49 | 102.50 | 108.87 | 14 | 9 |
| 2 | B | 5 | SGN | O2S-S1-N2 | 3.47 | 102.54 | 108.87 | 1 | 10 |
| 2 | B | 2 | IDS | O2-C2-C3 | 3.45 | 111.78 | 106.95 | 9 | 8 |
| 2 | B | 7 | SGN | O2S-S1-N2 | 3.43 | 102.61 | 108.87 | 7 | 10 |
| 2 | B | 7 | SGN | O1S-S1-N2 | 3.39 | 102.69 | 108.87 | 11 | 11 |
| 2 | B | 3 | SGN | O1S-S1-N2 | 3.37 | 102.72 | 108.87 | 2 | 6 |
| 2 | B | 3 | SGN | C3-C4-C5 | 3.25 | 104.45 | 110.24 | 3 | 14 |
| 2 | B | 3 | SGN | O4-C4-C5 | 3.24 | 117.34 | 109.30 | 1 | 4 |
| 2 | B | 5 | SGN | C3-C4-C5 | 3.11 | 104.70 | 110.24 | 3 | 15 |
| 2 | B | 1 | SGN | O6-C6-C5 | 3.10 | 113.41 | 107.62 | 15 | 9 |
| 2 | B | 2 | IDS | C2-O2-S | 3.06 | 121.90 | 117.91 | 3 | 3 |
| 2 | B | 6 | IDS | C2-O2-S | 2.99 | 121.80 | 117.91 | 10 | 5 |
| 2 | B | 3 | SGN | C3-C2-N2 | 2.77 | 106.68 | 110.32 | 14 | 3 |
| 2 | B | 1 | SGN | O4-C4-C5 | 2.77 | 116.17 | 109.30 | 9 | 2 |
| 2 | B | 5 | SGN | O4-C4-C5 | 2.63 | 115.83 | 109.30 | 5 | 8 |
| 2 | B | 3 | SGN | O3-C3-C2 | 2.57 | 104.14 | 109.47 | 10 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Mol | Chain | Res | Type | Atoms | Z | Observed(°) | Ideal(°) | Models | |
|-----|-------|-----|------|----------|------|-------------|----------|--------|-------|
| | | | | | | | | Worst | Total |
| 2 | B | 3 | SGN | O5-C1-C2 | 2.57 | 115.34 | 111.29 | 6 | 2 |
| 2 | B | 3 | SGN | C4-C3-C2 | 2.54 | 107.30 | 111.02 | 3 | 5 |
| 2 | B | 8 | IDS | C2-O2-S | 2.52 | 121.20 | 117.91 | 1 | 5 |
| 2 | B | 7 | SGN | C3-C4-C5 | 2.50 | 105.78 | 110.24 | 8 | 10 |
| 2 | B | 1 | SGN | C3-C2-N2 | 2.49 | 107.05 | 110.32 | 14 | 2 |
| 2 | B | 4 | IDS | C2-O2-S | 2.47 | 121.13 | 117.91 | 7 | 4 |
| 2 | B | 4 | IDS | C1-C2-C3 | 2.44 | 113.05 | 109.40 | 2 | 2 |
| 2 | B | 7 | SGN | O4-C4-C5 | 2.42 | 115.32 | 109.30 | 9 | 4 |
| 2 | B | 5 | SGN | C3-C2-N2 | 2.42 | 107.14 | 110.32 | 7 | 1 |
| 2 | B | 4 | IDS | O5-C1-C2 | 2.42 | 114.30 | 109.41 | 11 | 1 |
| 2 | B | 3 | SGN | C1-O5-C5 | 2.41 | 115.46 | 112.19 | 6 | 1 |
| 2 | B | 1 | SGN | O4-C4-C3 | 2.40 | 104.81 | 110.35 | 8 | 3 |
| 2 | B | 2 | IDS | C1-C2-C3 | 2.37 | 112.94 | 109.40 | 11 | 1 |
| 2 | B | 6 | IDS | C1-C2-C3 | 2.37 | 112.94 | 109.40 | 11 | 1 |
| 2 | B | 6 | IDS | O2-C2-C3 | 2.36 | 110.25 | 106.95 | 2 | 2 |
| 2 | B | 7 | SGN | C4-C3-C2 | 2.36 | 107.56 | 111.02 | 16 | 2 |
| 2 | B | 7 | SGN | C3-C2-N2 | 2.31 | 107.28 | 110.32 | 10 | 1 |
| 2 | B | 3 | SGN | C6-C5-C4 | 2.30 | 116.90 | 112.09 | 11 | 3 |
| 2 | B | 5 | SGN | C4-C3-C2 | 2.30 | 107.64 | 111.02 | 7 | 5 |
| 2 | B | 7 | SGN | O4-C4-C3 | 2.29 | 115.64 | 110.35 | 5 | 3 |
| 2 | B | 5 | SGN | O4-C4-C3 | 2.29 | 115.63 | 110.35 | 1 | 2 |
| 2 | B | 5 | SGN | O3-C3-C4 | 2.28 | 115.63 | 110.35 | 5 | 2 |
| 2 | B | 1 | SGN | C6-C5-C4 | 2.28 | 116.86 | 112.09 | 8 | 2 |
| 2 | B | 3 | SGN | O4-C4-C3 | 2.24 | 115.54 | 110.35 | 16 | 3 |
| 2 | B | 1 | SGN | C3-C4-C5 | 2.22 | 106.28 | 110.24 | 10 | 1 |
| 2 | B | 5 | SGN | C1-O5-C5 | 2.21 | 115.18 | 112.19 | 13 | 2 |
| 2 | B | 1 | SGN | C4-C3-C2 | 2.15 | 107.86 | 111.02 | 12 | 1 |
| 2 | B | 1 | SGN | O3-C3-C2 | 2.10 | 105.12 | 109.47 | 7 | 1 |
| 2 | B | 6 | IDS | C3-C4-C5 | 2.10 | 105.66 | 109.25 | 11 | 1 |
| 2 | B | 1 | SGN | O5-C1-C2 | 2.09 | 114.59 | 111.29 | 4 | 1 |
| 2 | B | 7 | SGN | O5-C1-C2 | 2.05 | 114.53 | 111.29 | 8 | 1 |
| 2 | B | 2 | IDS | O4-C4-C3 | 2.05 | 115.09 | 110.35 | 6 | 1 |
| 2 | B | 2 | IDS | O5-C1-C2 | 2.01 | 113.48 | 109.41 | 12 | 1 |

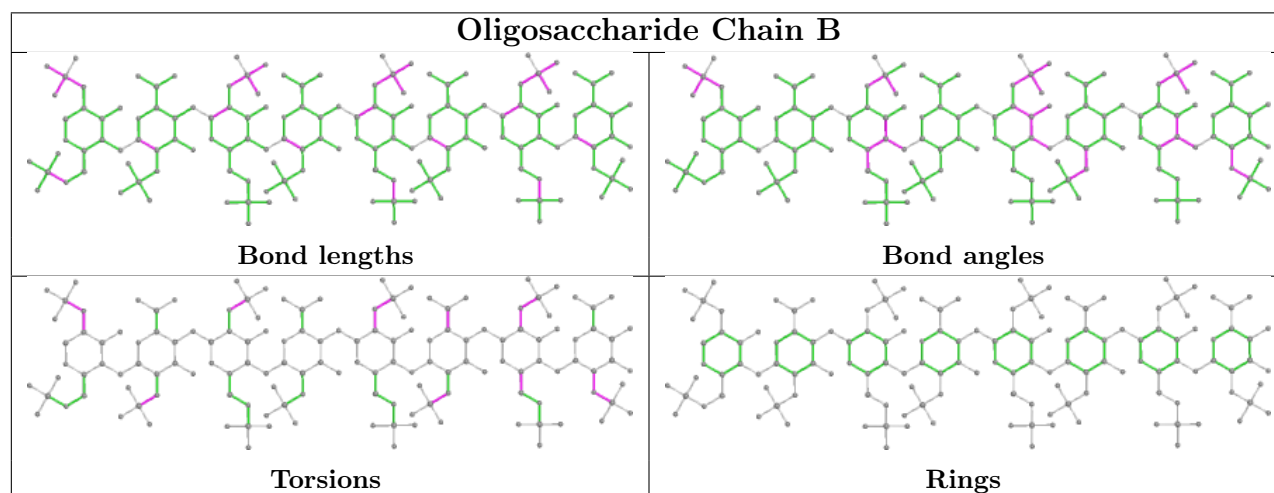
All unique chiral outliers are listed below.

| Mol | Chain | Res | Type | Atoms | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|-------|----------------|
| 2 | B | 6 | IDS | C1 | 1 |

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

The following is a two-dimensional graphical depiction of Mogul quality analysis of bond lengths, bond angles, torsion angles, and ring geometry for oligosaccharide.



6.6 Ligand geometry [i](#)

Of 4 ligands modelled in this entry, 4 are monoatomic - leaving 0 for Mogul analysis.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation (i)

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 86% for the well-defined parts and 83% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *assigned_chem_shift_list_1*

7.1.1 Bookkeeping (i)

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

| | |
|---|------|
| Total number of shifts | 2746 |
| Number of shifts mapped to atoms | 2746 |
| Number of unparsed shifts | 0 |
| Number of shifts with mapping errors | 0 |
| Number of shifts with mapping warnings | 0 |
| Number of shift outliers (ShiftChecker) | 15 |

7.1.2 Chemical shift referencing (i)

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

| Nucleus | # values | Correction \pm precision, ppm | Suggested action |
|------------------------|----------|---------------------------------|-------------------------|
| $^{13}\text{C}_\alpha$ | 236 | -0.28 ± 0.20 | None needed (< 0.5 ppm) |
| $^{13}\text{C}_\beta$ | 212 | 0.28 ± 0.08 | None needed (< 0.5 ppm) |
| $^{13}\text{C}'$ | 232 | 0.03 ± 0.15 | None needed (< 0.5 ppm) |
| ^{15}N | 220 | -0.11 ± 0.26 | None needed (< 0.5 ppm) |

7.1.3 Completeness of resonance assignments (i)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 86%, i.e. 2286 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2646. 0 out of 27 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

| | Total | ^1H | ^{13}C | ^{15}N |
|-----------|-----------------|---------------|-----------------|-----------------|
| Backbone | 952/981 (97%) | 388/403 (96%) | 383/392 (98%) | 181/186 (97%) |
| Sidechain | 1166/1389 (84%) | 789/908 (87%) | 367/431 (85%) | 10/50 (20%) |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| | Total | ¹ H | ¹³ C | ¹⁵ N |
|----------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|
| Aromatic | 168/276 (61%) | 87/138 (63%) | 77/126 (61%) | 4/12 (33%) |
| Overall | 2286/2646 (86%) | 1264/1449 (87%) | 827/949 (87%) | 195/248 (79%) |

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 83%, i.e. 2744 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 3305. 0 out of 31 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

| | Total | ¹ H | ¹³ C | ¹⁵ N |
|-----------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|
| Backbone | 1159/1232 (94%) | 471/505 (93%) | 468/494 (95%) | 220/233 (94%) |
| Sidechain | 1381/1748 (79%) | 929/1134 (82%) | 440/544 (81%) | 12/70 (17%) |
| Aromatic | 204/325 (63%) | 105/161 (65%) | 94/151 (62%) | 5/13 (38%) |
| Overall | 2744/3305 (83%) | 1505/1800 (84%) | 1002/1189 (84%) | 237/316 (75%) |

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

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

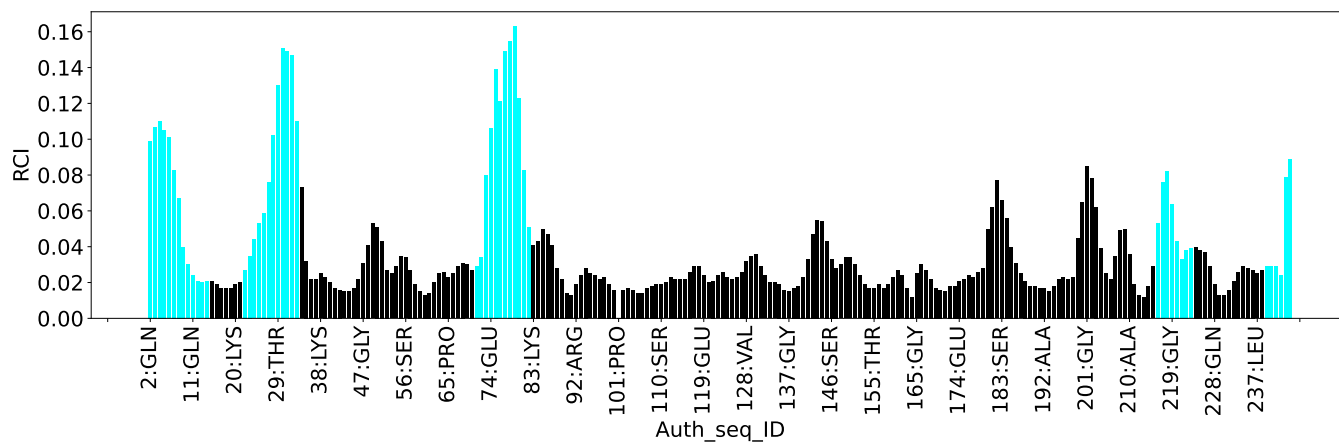
| List Id | Chain | Res | Type | Atom | Shift, ppm | Expected range, ppm | Z-score |
|---------|-------|-----|------|------|------------|---------------------|---------|
| 1 | A | 107 | ARG | NE | 116.85 | 76.53 – 92.65 | 20.0 |
| 1 | A | 57 | ARG | NE | 115.24 | 76.53 – 92.65 | 19.0 |
| 1 | A | 92 | ARG | NE | 114.04 | 76.53 – 92.65 | 18.3 |
| 1 | A | 66 | ARG | NE | 112.31 | 76.53 – 92.65 | 17.2 |
| 1 | A | 162 | PRO | HB2 | -0.32 | 0.37 – 3.78 | -7.0 |
| 1 | A | 60 | GLU | HB2 | 0.60 | 1.00 – 3.05 | -6.9 |
| 1 | A | 247 | LYS | CE | 36.10 | 37.57 – 46.21 | -6.7 |
| 1 | A | 60 | GLU | HB3 | 0.64 | 0.95 – 3.05 | -6.5 |
| 1 | A | 60 | GLU | CG | 43.68 | 30.20 – 42.01 | 6.4 |
| 1 | A | 65 | PRO | HA | 2.44 | 2.78 – 6.00 | -6.1 |
| 1 | A | 3 | GLU | CG | 43.11 | 30.20 – 42.01 | 5.9 |
| 1 | A | 62 | MET | HG2 | 0.38 | 0.65 – 4.19 | -5.8 |
| 1 | A | 242 | SER | N | 135.65 | 99.14 – 133.45 | 5.6 |
| 1 | A | 211 | VAL | H | 11.59 | 4.98 – 11.56 | 5.0 |
| 1 | A | 153 | GLY | H | 11.43 | 5.23 – 11.42 | 5.0 |

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

The image below reports *random coil index* values for the protein chains in the structure. The height of each bar gives a probability of a given residue to be disordered, as predicted from the available chemical shifts and the amino acid sequence. A value above 0.2 is an indication of significant predicted disorder. The colour of the bar shows whether the residue is in the well-

defined core (black) or in the ill-defined residue ranges (cyan), as described in section 2 on ensemble composition. If well-defined core and ill-defined regions are not identified then it is shown as gray bars.

Random coil index (RCI) for chain A:



8 NMR restraints analysis

8.1 Conformationally restricting restraints

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

| Description | Value |
|--|-------|
| Total distance restraints | 2224 |
| Intra-residue ($ i-j =0$) | 427 |
| Sequential ($ i-j =1$) | 543 |
| Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$) | 329 |
| Long range ($ i-j \geq 5$) | 691 |
| Inter-chain | 220 |
| Hydrogen bond restraints | 13 |
| Disulfide bond restraints | 1 |
| Total dihedral-angle restraints | 0 |
| Number of unmapped restraints | 220 |
| Number of restraints per residue | 9.0 |
| Number of long range restraints per residue ¹ | 2.9 |

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

8.2 Residual restraint violations

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

8.2.1 Average number of distance violations per model

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

| Bins (Å) | Average number of violations per model | Max (Å) |
|------------------|--|---------|
| 0.1-0.2 (Small) | 57.3 | 0.2 |
| 0.2-0.5 (Medium) | 102.5 | 0.5 |
| >0.5 (Large) | 52.4 | 2.82 |

8.2.2 Average number of dihedral-angle violations per model

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

9 Distance violation analysis

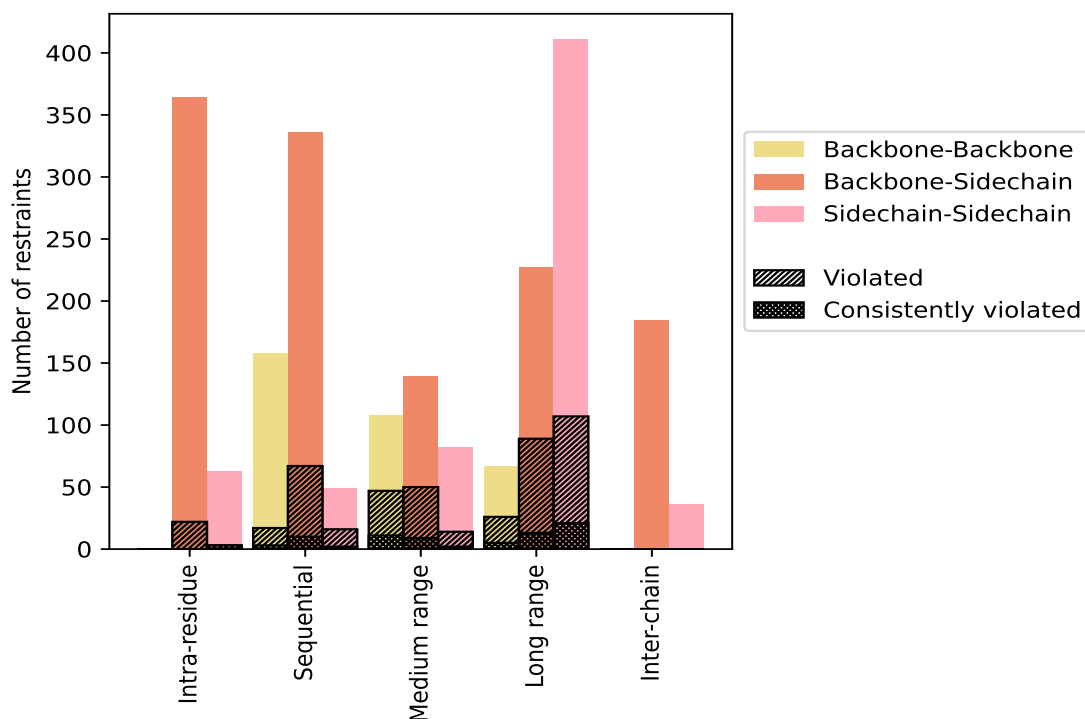
9.1 Summary of distance violations

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

| Restrains type | Count | % ¹ | Violated ³ | | | Consistently Violated ⁴ | | |
|---|-------------|----------------|-----------------------|----------------|----------------|------------------------------------|----------------|----------------|
| | | | Count | % ² | % ¹ | Count | % ² | % ¹ |
| Intra-residue ($i-j =0$) | 427 | 19.2 | 25 | 5.9 | 1.1 | 3 | 0.7 | 0.1 |
| Backbone-Backbone | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 364 | 16.4 | 22 | 6.0 | 1.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Sidechain-Sidechain | 63 | 2.8 | 3 | 4.8 | 0.1 | 3 | 4.8 | 0.1 |
| Sequential ($i-j =1$) | 543 | 24.4 | 100 | 18.4 | 4.5 | 15 | 2.8 | 0.7 |
| Backbone-Backbone | 158 | 7.1 | 17 | 10.8 | 0.8 | 3 | 1.9 | 0.1 |
| Backbone-Sidechain | 336 | 15.1 | 67 | 19.9 | 3.0 | 10 | 3.0 | 0.4 |
| Sidechain-Sidechain | 49 | 2.2 | 16 | 32.7 | 0.7 | 2 | 4.1 | 0.1 |
| Medium range ($i-j >1$ & $i-j <5$) | 329 | 14.8 | 111 | 33.7 | 5.0 | 22 | 6.7 | 1.0 |
| Backbone-Backbone | 108 | 4.9 | 47 | 43.5 | 2.1 | 11 | 10.2 | 0.5 |
| Backbone-Sidechain | 139 | 6.2 | 50 | 36.0 | 2.2 | 9 | 6.5 | 0.4 |
| Sidechain-Sidechain | 82 | 3.7 | 14 | 17.1 | 0.6 | 2 | 2.4 | 0.1 |
| Long range ($i-j \geq 5$) | 691 | 31.1 | 218 | 31.5 | 9.8 | 38 | 5.5 | 1.7 |
| Backbone-Backbone | 55 | 2.5 | 23 | 41.8 | 1.0 | 4 | 7.3 | 0.2 |
| Backbone-Sidechain | 226 | 10.2 | 88 | 38.9 | 4.0 | 13 | 5.8 | 0.6 |
| Sidechain-Sidechain | 410 | 18.4 | 107 | 26.1 | 4.8 | 21 | 5.1 | 0.9 |
| Inter-chain | 220 | 9.9 | 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 | 184 | 8.3 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Sidechain-Sidechain | 36 | 1.6 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Hydrogen bond | 13 | 0.6 | 4 | 30.8 | 0.2 | 1 | 7.7 | 0.0 |
| Disulfide bond | 1 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Total | 2224 | 100.0 | 458 | 20.6 | 20.6 | 79 | 3.6 | 3.6 |
| Backbone-Backbone | 333 | 15.0 | 90 | 27.0 | 4.0 | 19 | 5.7 | 0.9 |
| Backbone-Sidechain | 1250 | 56.2 | 228 | 18.2 | 10.3 | 32 | 2.6 | 1.4 |
| Sidechain-Sidechain | 641 | 28.8 | 140 | 21.8 | 6.3 | 28 | 4.4 | 1.3 |

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

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



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

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

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

| Model ID | Number of violations | | | | | | Mean (Å) | Max (Å) | SD ⁶ (Å) | Median (Å) |
|----------|----------------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-------|----------|---------|---------------------|------------|
| | IR ¹ | SQ ² | MR ³ | LR ⁴ | IC ⁵ | Total | | | | |
| 1 | 7 | 54 | 50 | 98 | 0 | 209 | 0.37 | 1.3 | 0.22 | 0.31 |
| 2 | 10 | 46 | 56 | 93 | 0 | 205 | 0.38 | 1.33 | 0.23 | 0.33 |
| 3 | 9 | 53 | 59 | 99 | 0 | 220 | 0.38 | 1.17 | 0.23 | 0.34 |
| 4 | 11 | 41 | 51 | 93 | 0 | 196 | 0.38 | 1.36 | 0.24 | 0.33 |
| 5 | 8 | 45 | 58 | 98 | 0 | 209 | 0.38 | 1.24 | 0.21 | 0.34 |
| 6 | 12 | 50 | 52 | 114 | 0 | 228 | 0.44 | 2.82 | 0.33 | 0.34 |
| 7 | 10 | 47 | 56 | 101 | 0 | 214 | 0.38 | 1.28 | 0.23 | 0.34 |
| 8 | 10 | 47 | 48 | 110 | 0 | 215 | 0.39 | 1.26 | 0.23 | 0.35 |
| 9 | 8 | 46 | 56 | 109 | 0 | 219 | 0.38 | 1.21 | 0.24 | 0.3 |
| 10 | 10 | 43 | 49 | 106 | 0 | 208 | 0.39 | 1.42 | 0.24 | 0.33 |
| 11 | 10 | 44 | 58 | 100 | 0 | 212 | 0.4 | 1.39 | 0.24 | 0.35 |

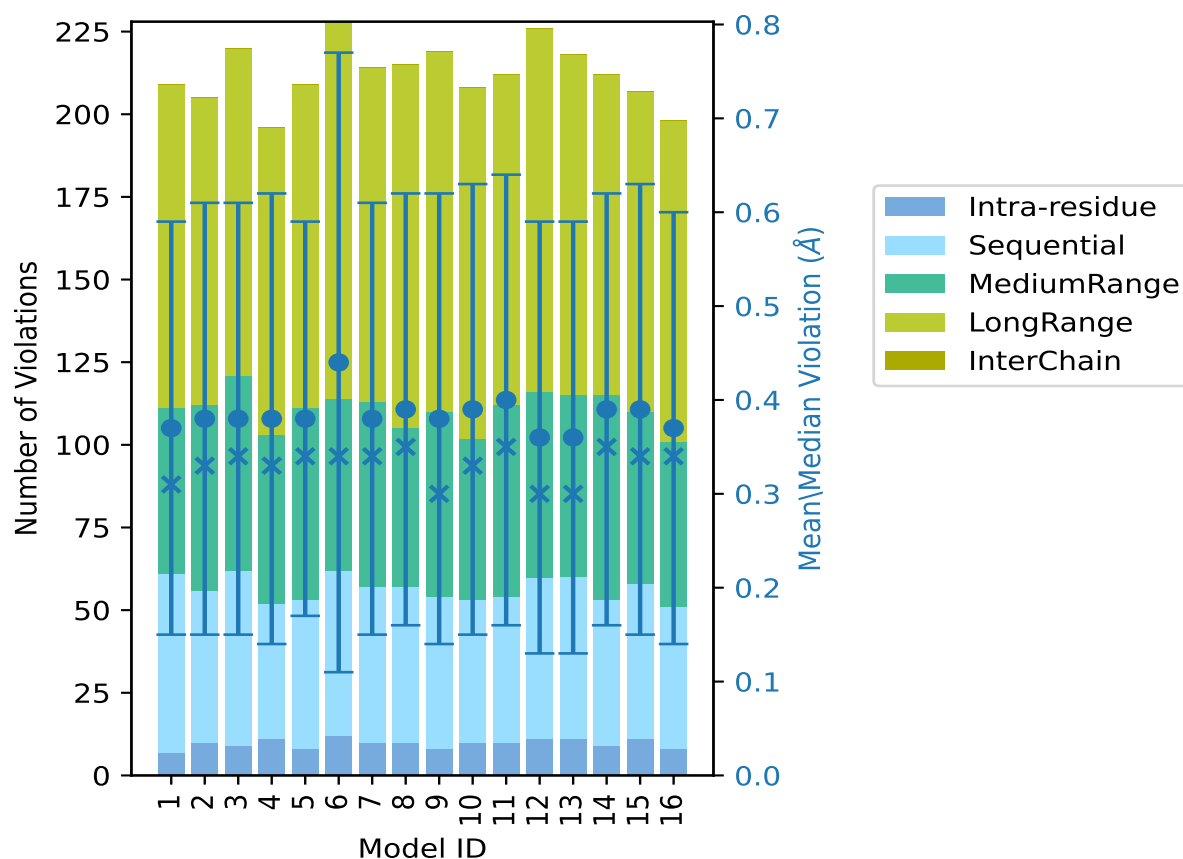
Continued on next page...

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 | 11 | 49 | 56 | 110 | 0 | 226 | 0.36 | 1.31 | 0.23 | 0.3 |
| 13 | 11 | 49 | 55 | 103 | 0 | 218 | 0.36 | 1.24 | 0.23 | 0.3 |
| 14 | 9 | 44 | 62 | 97 | 0 | 212 | 0.39 | 1.26 | 0.23 | 0.35 |
| 15 | 11 | 47 | 52 | 97 | 0 | 207 | 0.39 | 1.25 | 0.24 | 0.34 |
| 16 | 8 | 43 | 50 | 97 | 0 | 198 | 0.37 | 1.44 | 0.23 | 0.34 |

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

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



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

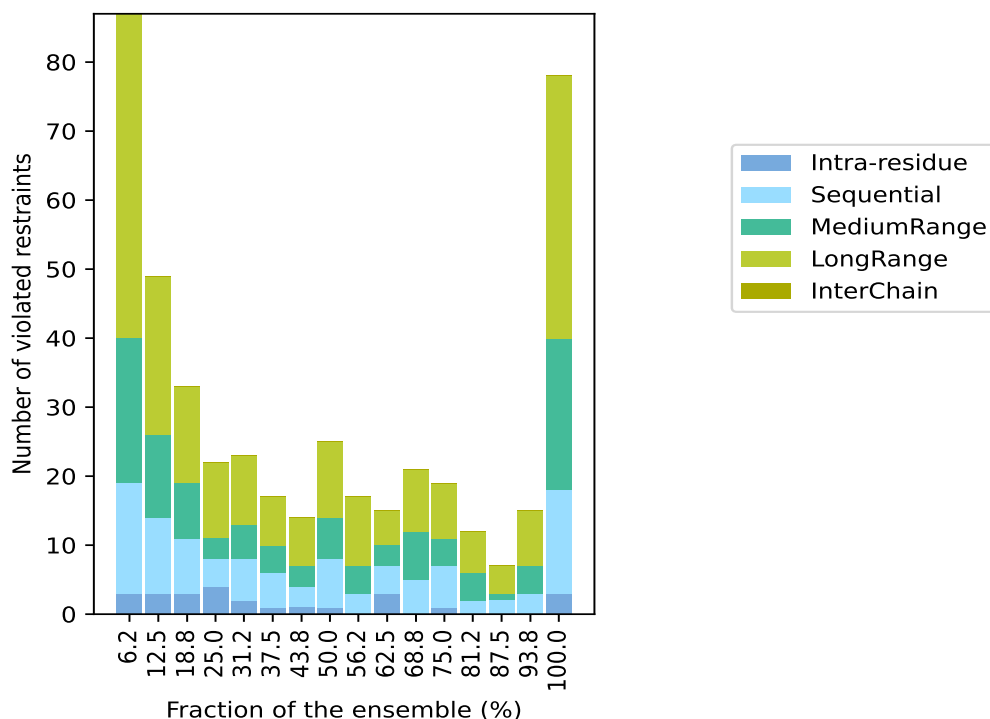
9.3 Distance violation statistics for the ensemble

Violation analysis may find that some restraints are violated in few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of the ensemble. In total, 1756(IR:402, SQ:443, MR:218, LR:473, IC:220) 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 | % |
| 3 | 16 | 21 | 47 | 0 | 87 | 1 | 6.2 |
| 3 | 11 | 12 | 23 | 0 | 49 | 2 | 12.5 |
| 3 | 8 | 8 | 14 | 0 | 33 | 3 | 18.8 |
| 4 | 4 | 3 | 11 | 0 | 22 | 4 | 25.0 |
| 2 | 6 | 5 | 10 | 0 | 23 | 5 | 31.2 |
| 1 | 5 | 4 | 7 | 0 | 17 | 6 | 37.5 |
| 1 | 3 | 3 | 7 | 0 | 14 | 7 | 43.8 |
| 1 | 7 | 6 | 11 | 0 | 25 | 8 | 50.0 |
| 0 | 3 | 4 | 10 | 0 | 17 | 9 | 56.2 |
| 3 | 4 | 3 | 5 | 0 | 15 | 10 | 62.5 |
| 0 | 5 | 7 | 9 | 0 | 21 | 11 | 68.8 |
| 1 | 6 | 4 | 8 | 0 | 19 | 12 | 75.0 |
| 0 | 2 | 4 | 6 | 0 | 12 | 13 | 81.2 |
| 0 | 2 | 1 | 4 | 0 | 7 | 14 | 87.5 |
| 0 | 3 | 4 | 8 | 0 | 15 | 15 | 93.8 |
| 3 | 15 | 22 | 38 | 0 | 78 | 16 | 100.0 |

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

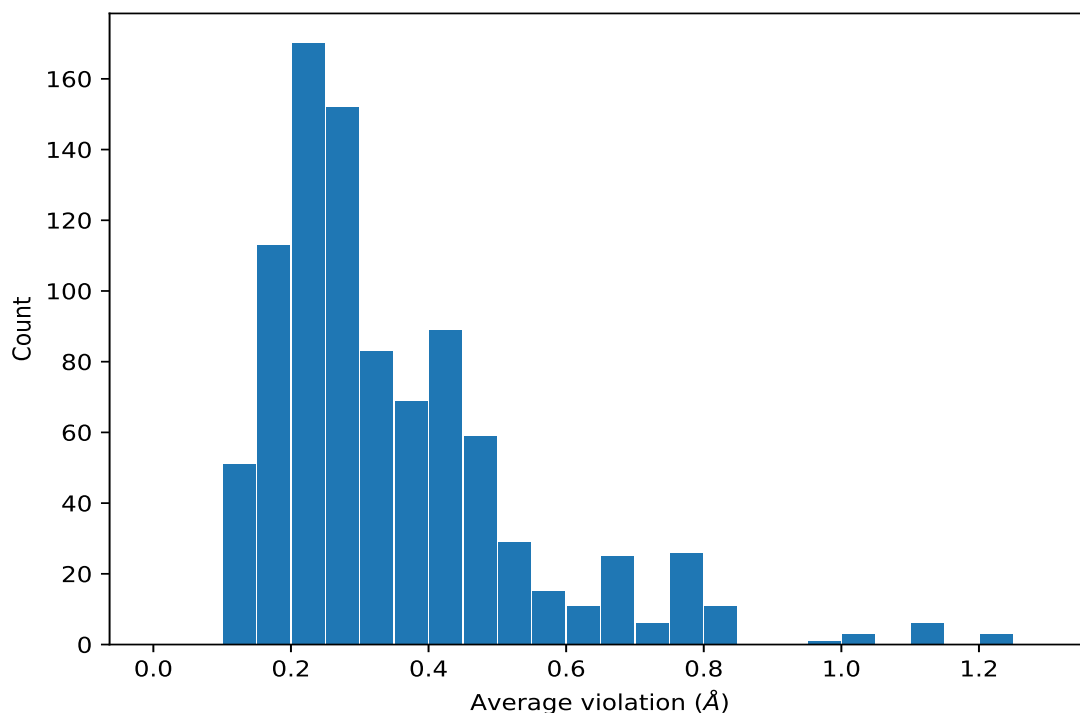
9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble [i](#)



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

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

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



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

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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:186:ILE:H | 16 | 1.22 | 0.12 | 1.25 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:186:ILE:H | 16 | 1.22 | 0.12 | 1.25 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:186:ILE:H | 16 | 1.22 | 0.12 | 1.25 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:HE2 | 16 | 1.15 | 0.12 | 1.15 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:HE3 | 16 | 1.15 | 0.12 | 1.15 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:HE2 | 16 | 1.15 | 0.12 | 1.15 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:HE3 | 16 | 1.15 | 0.12 | 1.15 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:HE2 | 16 | 1.15 | 0.12 | 1.15 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:HE3 | 16 | 1.15 | 0.12 | 1.15 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD11 | 16 | 1.04 | 0.16 | 1.03 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD12 | 16 | 1.04 | 0.16 | 1.03 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD13 | 16 | 1.04 | 0.16 | 1.03 |
| (1,1066) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HG13 | 16 | 0.96 | 0.14 | 0.94 |
| (1,712) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:188:PHE:HD1 | 16 | 0.84 | 0.14 | 0.84 |
| (1,712) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:188:PHE:HD2 | 16 | 0.84 | 0.14 | 0.84 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG2 | 16 | 0.82 | 0.07 | 0.82 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG3 | 16 | 0.82 | 0.07 | 0.82 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG2 | 16 | 0.82 | 0.07 | 0.82 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG3 | 16 | 0.82 | 0.07 | 0.82 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG2 | 16 | 0.82 | 0.07 | 0.82 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG3 | 16 | 0.82 | 0.07 | 0.82 |
| (1,1288) | 1:A:198:HIS:H | 1:A:200:LEU:HG | 16 | 0.79 | 0.07 | 0.8 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD1 | 16 | 0.79 | 0.21 | 0.8 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD2 | 16 | 0.79 | 0.21 | 0.8 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD1 | 16 | 0.79 | 0.21 | 0.8 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD2 | 16 | 0.79 | 0.21 | 0.8 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD1 | 16 | 0.79 | 0.21 | 0.8 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD2 | 16 | 0.79 | 0.21 | 0.8 |
| (1,336) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:MET:HG2 | 16 | 0.78 | 0.26 | 0.81 |
| (1,336) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:MET:HG3 | 16 | 0.78 | 0.26 | 0.81 |
| (1,909) | 1:A:127:VAL:HA | 1:A:129:TRP:HD1 | 16 | 0.77 | 0.2 | 0.79 |
| (1,662) | 1:A:103:ILE:H | 1:A:104:THR:HB | 16 | 0.76 | 0.07 | 0.75 |
| (1,1331) | 1:A:205:SER:H | 1:A:213:TYR:H | 16 | 0.74 | 0.17 | 0.74 |
| (1,766) | 1:A:114:ASN:H | 1:A:115:MET:HB2 | 16 | 0.74 | 0.12 | 0.74 |
| (1,452) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:237:LEU:HG | 16 | 0.73 | 0.26 | 0.7 |
| (1,452) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:237:LEU:HG | 16 | 0.73 | 0.26 | 0.7 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:188:PHE:HE1 | 16 | 0.69 | 0.08 | 0.68 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:188:PHE:HE2 | 16 | 0.69 | 0.08 | 0.68 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:188:PHE:HE1 | 16 | 0.69 | 0.08 | 0.68 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:188:PHE:HE2 | 16 | 0.69 | 0.08 | 0.68 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:188:PHE:HE1 | 16 | 0.69 | 0.08 | 0.68 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:188:PHE:HE2 | 16 | 0.69 | 0.08 | 0.68 |
| (1,1398) | 1:A:228:GLN:H | 1:A:230:ASP:HB2 | 16 | 0.69 | 0.35 | 0.78 |
| (1,1398) | 1:A:228:GLN:H | 1:A:230:ASP:HB3 | 16 | 0.69 | 0.35 | 0.78 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD11 | 16 | 0.68 | 0.18 | 0.66 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD12 | 16 | 0.68 | 0.18 | 0.66 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD13 | 16 | 0.68 | 0.18 | 0.66 |
| (1,1362) | 1:A:211:VAL:H | 1:A:227:SER:HA | 16 | 0.68 | 0.1 | 0.66 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:H | 16 | 0.64 | 0.14 | 0.63 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:H | 16 | 0.64 | 0.14 | 0.63 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:H | 16 | 0.64 | 0.14 | 0.63 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG21 | 16 | 0.63 | 0.05 | 0.63 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG22 | 16 | 0.63 | 0.05 | 0.63 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG23 | 16 | 0.63 | 0.05 | 0.63 |
| (1,244) | 1:A:46:PHE:H | 1:A:48:LEU:H | 16 | 0.61 | 0.15 | 0.6 |
| (1,1217) | 1:A:180:ASP:HB2 | 1:A:182:SER:H | 16 | 0.6 | 0.05 | 0.6 |
| (1,1217) | 1:A:180:ASP:HB3 | 1:A:182:SER:H | 16 | 0.6 | 0.05 | 0.6 |
| (1,725) | 1:A:109:VAL:HA | 1:A:192:ALA:HA | 16 | 0.58 | 0.09 | 0.58 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,347) | 1:A:61:ILE:HA | 1:A:63:GLN:H | 16 | 0.58 | 0.18 | 0.57 |
| (1,1151) | 1:A:172:PHE:HD1 | 1:A:173:ASP:H | 16 | 0.56 | 0.09 | 0.56 |
| (1,1151) | 1:A:172:PHE:HD2 | 1:A:173:ASP:H | 16 | 0.56 | 0.09 | 0.56 |
| (1,1181) | 1:A:177:ARG:H | 1:A:186:ILE:H | 16 | 0.55 | 0.18 | 0.56 |
| (1,1161) | 1:A:173:ASP:H | 1:A:175:ASP:H | 16 | 0.55 | 0.14 | 0.5 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG21 | 1:A:188:PHE:HD1 | 16 | 0.54 | 0.19 | 0.47 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG21 | 1:A:188:PHE:HD2 | 16 | 0.54 | 0.19 | 0.47 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG22 | 1:A:188:PHE:HD1 | 16 | 0.54 | 0.19 | 0.47 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG22 | 1:A:188:PHE:HD2 | 16 | 0.54 | 0.19 | 0.47 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG23 | 1:A:188:PHE:HD1 | 16 | 0.54 | 0.19 | 0.47 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG23 | 1:A:188:PHE:HD2 | 16 | 0.54 | 0.19 | 0.47 |
| (1,480) | 1:A:88:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB2 | 16 | 0.53 | 0.1 | 0.55 |
| (1,480) | 1:A:88:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB3 | 16 | 0.53 | 0.1 | 0.55 |
| (1,1241) | 1:A:189:LEU:H | 1:A:191:ALA:H | 16 | 0.52 | 0.11 | 0.53 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:HB2 | 16 | 0.51 | 0.12 | 0.55 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:HB3 | 16 | 0.51 | 0.12 | 0.55 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:HB2 | 16 | 0.51 | 0.12 | 0.55 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:HB3 | 16 | 0.51 | 0.12 | 0.55 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:HB2 | 16 | 0.51 | 0.12 | 0.55 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:HB3 | 16 | 0.51 | 0.12 | 0.55 |
| (1,1199) | 1:A:178:TRP:HZ2 | 1:A:186:ILE:HG13 | 16 | 0.51 | 0.17 | 0.5 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB2 | 1:A:118:LYS:HE2 | 16 | 0.49 | 0.07 | 0.47 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB2 | 1:A:118:LYS:HE3 | 16 | 0.49 | 0.07 | 0.47 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB3 | 1:A:118:LYS:HE2 | 16 | 0.49 | 0.07 | 0.47 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB3 | 1:A:118:LYS:HE3 | 16 | 0.49 | 0.07 | 0.47 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD11 | 1:A:198:HIS:H | 16 | 0.48 | 0.08 | 0.48 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD12 | 1:A:198:HIS:H | 16 | 0.48 | 0.08 | 0.48 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD13 | 1:A:198:HIS:H | 16 | 0.48 | 0.08 | 0.48 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE2 | 1:A:237:LEU:HB2 | 16 | 0.48 | 0.1 | 0.44 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE2 | 1:A:237:LEU:HB3 | 16 | 0.48 | 0.1 | 0.44 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE3 | 1:A:237:LEU:HB2 | 16 | 0.48 | 0.1 | 0.44 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE3 | 1:A:237:LEU:HB3 | 16 | 0.48 | 0.1 | 0.44 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD11 | 16 | 0.47 | 0.11 | 0.48 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD12 | 16 | 0.47 | 0.11 | 0.48 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD13 | 16 | 0.47 | 0.11 | 0.48 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD11 | 16 | 0.47 | 0.11 | 0.48 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD12 | 16 | 0.47 | 0.11 | 0.48 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD13 | 16 | 0.47 | 0.11 | 0.48 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD11 | 16 | 0.47 | 0.11 | 0.48 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD12 | 16 | 0.47 | 0.11 | 0.48 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD13 | 16 | 0.47 | 0.11 | 0.48 |
| (1,1406) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:HG2 | 16 | 0.46 | 0.17 | 0.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1406) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:HG3 | 16 | 0.46 | 0.17 | 0.41 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB2 | 1:A:125:ARG:HD2 | 16 | 0.45 | 0.05 | 0.46 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB2 | 1:A:125:ARG:HD3 | 16 | 0.45 | 0.05 | 0.46 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB3 | 1:A:125:ARG:HD2 | 16 | 0.45 | 0.05 | 0.46 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB3 | 1:A:125:ARG:HD3 | 16 | 0.45 | 0.05 | 0.46 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG2 | 1:A:163:GLY:HA2 | 16 | 0.45 | 0.12 | 0.46 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG2 | 1:A:163:GLY:HA3 | 16 | 0.45 | 0.12 | 0.46 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG3 | 1:A:163:GLY:HA2 | 16 | 0.45 | 0.12 | 0.46 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG3 | 1:A:163:GLY:HA3 | 16 | 0.45 | 0.12 | 0.46 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG11 | 1:A:138:PHE:H | 16 | 0.44 | 0.14 | 0.44 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG12 | 1:A:138:PHE:H | 16 | 0.44 | 0.14 | 0.44 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG13 | 1:A:138:PHE:H | 16 | 0.44 | 0.14 | 0.44 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:225:LYS:HD2 | 16 | 0.44 | 0.06 | 0.42 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:225:LYS:HD3 | 16 | 0.44 | 0.06 | 0.42 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:225:LYS:HD2 | 16 | 0.44 | 0.06 | 0.42 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:225:LYS:HD3 | 16 | 0.44 | 0.06 | 0.42 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:H | 16 | 0.44 | 0.14 | 0.43 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:H | 16 | 0.44 | 0.14 | 0.43 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:H | 16 | 0.44 | 0.14 | 0.43 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA2 | 1:A:206:SER:HB2 | 16 | 0.44 | 0.06 | 0.43 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA2 | 1:A:206:SER:HB3 | 16 | 0.44 | 0.06 | 0.43 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA3 | 1:A:206:SER:HB2 | 16 | 0.44 | 0.06 | 0.43 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA3 | 1:A:206:SER:HB3 | 16 | 0.44 | 0.06 | 0.43 |
| (4,14) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:171:HIS:ND1 | 16 | 0.44 | 0.16 | 0.4 |
| (1,1050) | 1:A:155:THR:HA | 1:A:157:ALA:H | 16 | 0.42 | 0.14 | 0.41 |
| (1,1413) | 1:A:231:ILE:H | 1:A:232:LYS:HB3 | 16 | 0.42 | 0.15 | 0.39 |
| (1,1434) | 1:A:232:LYS:HB3 | 1:A:233:GLY:H | 16 | 0.42 | 0.06 | 0.44 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD11 | 16 | 0.41 | 0.09 | 0.41 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD12 | 16 | 0.41 | 0.09 | 0.41 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD13 | 16 | 0.41 | 0.09 | 0.41 |
| (1,785) | 1:A:116:TRP:H | 1:A:118:LYS:H | 16 | 0.41 | 0.2 | 0.36 |
| (1,726) | 1:A:109:VAL:HB | 1:A:110:SER:H | 16 | 0.4 | 0.03 | 0.41 |
| (1,44) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:18:TYR:H | 16 | 0.4 | 0.16 | 0.42 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HE1 | 16 | 0.39 | 0.1 | 0.38 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HE2 | 16 | 0.39 | 0.1 | 0.38 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB3 | 1:A:238:TYR:HE1 | 16 | 0.39 | 0.1 | 0.38 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB3 | 1:A:238:TYR:HE2 | 16 | 0.39 | 0.1 | 0.38 |
| (1,1147) | 1:A:172:PHE:HB2 | 1:A:173:ASP:H | 16 | 0.38 | 0.08 | 0.38 |
| (4,23) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:194:HIS:NE2 | 16 | 0.38 | 0.63 | 0.22 |
| (1,486) | 1:A:89:VAL:H | 1:A:123:HIS:HD2 | 16 | 0.37 | 0.13 | 0.4 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG21 | 16 | 0.37 | 0.14 | 0.38 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG22 | 16 | 0.37 | 0.14 | 0.38 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG23 | 16 | 0.37 | 0.14 | 0.38 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG11 | 1:A:137:GLY:HA2 | 16 | 0.36 | 0.1 | 0.34 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG11 | 1:A:137:GLY:HA3 | 16 | 0.36 | 0.1 | 0.34 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG12 | 1:A:137:GLY:HA2 | 16 | 0.36 | 0.1 | 0.34 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG12 | 1:A:137:GLY:HA3 | 16 | 0.36 | 0.1 | 0.34 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG13 | 1:A:137:GLY:HA2 | 16 | 0.36 | 0.1 | 0.34 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG13 | 1:A:137:GLY:HA3 | 16 | 0.36 | 0.1 | 0.34 |
| (1,538) | 1:A:92:ARG:H | 1:A:93:ILE:H | 16 | 0.35 | 0.01 | 0.35 |
| (1,915) | 1:A:128:VAL:HB | 1:A:129:TRP:HD1 | 16 | 0.34 | 0.11 | 0.32 |
| (1,820) | 1:A:117:GLY:HA3 | 1:A:119:GLU:H | 16 | 0.33 | 0.09 | 0.32 |
| (1,1452) | 1:A:234:ILE:HB | 1:A:238:TYR:HD1 | 16 | 0.33 | 0.05 | 0.32 |
| (1,1452) | 1:A:234:ILE:HB | 1:A:238:TYR:HD2 | 16 | 0.33 | 0.05 | 0.32 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:111:LYS:H | 16 | 0.33 | 0.06 | 0.34 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:111:LYS:H | 16 | 0.33 | 0.06 | 0.34 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:111:LYS:H | 16 | 0.33 | 0.06 | 0.34 |
| (1,692) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:106:ASP:HB2 | 16 | 0.33 | 0.08 | 0.33 |
| (1,692) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:106:ASP:HB3 | 16 | 0.33 | 0.08 | 0.33 |
| (1,384) | 1:A:67:CYS:HA | 1:A:69:VAL:H | 16 | 0.32 | 0.11 | 0.31 |
| (1,693) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:107:ARG:H | 16 | 0.31 | 0.12 | 0.31 |
| (1,1041) | 1:A:153:GLY:H | 1:A:154:ASN:H | 16 | 0.3 | 0.03 | 0.3 |
| (1,408) | 1:A:69:VAL:HA | 1:A:70:PRO:HG2 | 16 | 0.28 | 0.02 | 0.28 |
| (1,408) | 1:A:69:VAL:HA | 1:A:70:PRO:HG3 | 16 | 0.28 | 0.02 | 0.28 |
| (4,12) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:158:HIS:NE2 | 16 | 0.27 | 0.28 | 0.2 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG2 | 16 | 0.26 | 0.07 | 0.26 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG3 | 16 | 0.26 | 0.07 | 0.26 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG2 | 16 | 0.26 | 0.07 | 0.26 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG3 | 16 | 0.26 | 0.07 | 0.26 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG2 | 16 | 0.26 | 0.07 | 0.26 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG3 | 16 | 0.26 | 0.07 | 0.26 |
| (1,755) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:114:ASN:H | 16 | 0.25 | 0.08 | 0.24 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG21 | 16 | 0.24 | 0.06 | 0.26 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG22 | 16 | 0.24 | 0.06 | 0.26 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG23 | 16 | 0.24 | 0.06 | 0.26 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB1 | 16 | 0.24 | 0.07 | 0.22 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB2 | 16 | 0.24 | 0.07 | 0.22 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB3 | 16 | 0.24 | 0.07 | 0.22 |
| (4,21) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:198:HIS:NE2 | 16 | 0.24 | 0.21 | 0.18 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD11 | 1:A:186:ILE:H | 16 | 0.24 | 0.08 | 0.24 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD12 | 1:A:186:ILE:H | 16 | 0.24 | 0.08 | 0.24 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD13 | 1:A:186:ILE:H | 16 | 0.24 | 0.08 | 0.24 |
| (4,19) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:204:HIS:NE2 | 16 | 0.23 | 0.13 | 0.2 |
| (4,17) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:143:HIS:NE2 | 16 | 0.22 | 0.11 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,711) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:110:SER:H | 16 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (4,1) | 3:A:301:CA:CA | 1:A:167:GLY:O | 16 | 0.21 | 0.05 | 0.2 |
| (4,16) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:145:ASP:OD2 | 16 | 0.2 | 0.17 | 0.16 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD11 | 15 | 0.68 | 0.09 | 0.65 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD12 | 15 | 0.68 | 0.09 | 0.65 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD13 | 15 | 0.68 | 0.09 | 0.65 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD1 | 15 | 0.65 | 0.15 | 0.64 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD2 | 15 | 0.65 | 0.15 | 0.64 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD1 | 15 | 0.65 | 0.15 | 0.64 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD2 | 15 | 0.65 | 0.15 | 0.64 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD1 | 15 | 0.65 | 0.15 | 0.64 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD2 | 15 | 0.65 | 0.15 | 0.64 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:56:SER:H | 15 | 0.63 | 0.3 | 0.66 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:56:SER:H | 15 | 0.63 | 0.3 | 0.66 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:56:SER:H | 15 | 0.63 | 0.3 | 0.66 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG11 | 15 | 0.53 | 0.16 | 0.56 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG12 | 15 | 0.53 | 0.16 | 0.56 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG13 | 15 | 0.53 | 0.16 | 0.56 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:228:GLN:H | 15 | 0.48 | 0.14 | 0.48 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:228:GLN:H | 15 | 0.48 | 0.14 | 0.48 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:228:GLN:H | 15 | 0.48 | 0.14 | 0.48 |
| (1,468) | 1:A:84:TRP:HE1 | 1:A:200:LEU:H | 15 | 0.43 | 0.2 | 0.51 |
| (1,314) | 1:A:58:VAL:H | 1:A:60:GLU:H | 15 | 0.38 | 0.11 | 0.41 |
| (1,1060) | 1:A:156:LEU:HB3 | 1:A:178:TRP:HH2 | 15 | 0.38 | 0.13 | 0.4 |
| (1,212) | 1:A:43:GLN:H | 1:A:45:PHE:H | 15 | 0.37 | 0.12 | 0.4 |
| (1,1360) | 1:A:211:VAL:H | 1:A:213:TYR:H | 15 | 0.37 | 0.17 | 0.34 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD11 | 1:A:58:VAL:HB | 15 | 0.32 | 0.1 | 0.33 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD12 | 1:A:58:VAL:HB | 15 | 0.32 | 0.1 | 0.33 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD13 | 1:A:58:VAL:HB | 15 | 0.32 | 0.1 | 0.33 |
| (1,169) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:52:GLY:HA2 | 15 | 0.3 | 0.13 | 0.31 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD11 | 1:A:137:GLY:H | 15 | 0.19 | 0.06 | 0.18 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD12 | 1:A:137:GLY:H | 15 | 0.19 | 0.06 | 0.18 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD13 | 1:A:137:GLY:H | 15 | 0.19 | 0.06 | 0.18 |
| (1,1222) | 1:A:184:LEU:HA | 1:A:185:GLY:H | 15 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (3,15) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:171:HIS:CG | 15 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:230:ASP:HA | 14 | 0.48 | 0.16 | 0.48 |
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:230:ASP:HA | 14 | 0.48 | 0.16 | 0.48 |
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:230:ASP:HA | 14 | 0.48 | 0.16 | 0.48 |
| (1,183) | 1:A:42:MET:H | 1:A:44:LYS:H | 14 | 0.36 | 0.14 | 0.33 |
| (1,1024) | 1:A:143:HIS:HE1 | 1:A:160:PHE:HE1 | 14 | 0.32 | 0.12 | 0.32 |
| (1,1024) | 1:A:143:HIS:HE1 | 1:A:160:PHE:HE2 | 14 | 0.32 | 0.12 | 0.32 |
| (1,1402) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HB | 14 | 0.31 | 0.16 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,168) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:52:GLY:H | 14 | 0.28 | 0.09 | 0.26 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG11 | 14 | 0.18 | 0.03 | 0.17 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG12 | 14 | 0.18 | 0.03 | 0.17 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG13 | 14 | 0.18 | 0.03 | 0.17 |
| (1,1176) | 1:A:176:GLU:H | 1:A:177:ARG:H | 14 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1386) | 1:A:223:ASN:H | 1:A:224:PHE:HB2 | 13 | 0.53 | 0.14 | 0.56 |
| (1,1386) | 1:A:223:ASN:H | 1:A:224:PHE:HB3 | 13 | 0.53 | 0.14 | 0.56 |
| (1,94) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:24:LEU:H | 13 | 0.51 | 0.18 | 0.44 |
| (1,606) | 1:A:96:TYR:HA | 1:A:102:HIS:HD2 | 13 | 0.48 | 0.19 | 0.4 |
| (1,102) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:70:PRO:HB2 | 13 | 0.48 | 0.13 | 0.49 |
| (1,102) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:70:PRO:HB3 | 13 | 0.48 | 0.13 | 0.49 |
| (1,53) | 1:A:18:TYR:H | 1:A:21:ARG:HG2 | 13 | 0.36 | 0.1 | 0.38 |
| (1,757) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:115:MET:HB2 | 13 | 0.35 | 0.19 | 0.24 |
| (1,56) | 1:A:18:TYR:HB2 | 1:A:20:LYS:H | 13 | 0.31 | 0.12 | 0.33 |
| (1,56) | 1:A:18:TYR:HB3 | 1:A:20:LYS:H | 13 | 0.31 | 0.12 | 0.33 |
| (1,801) | 1:A:116:TRP:HE1 | 1:A:198:HIS:H | 13 | 0.26 | 0.11 | 0.22 |
| (1,721) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:188:PHE:HE1 | 13 | 0.25 | 0.06 | 0.27 |
| (1,721) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:188:PHE:HE2 | 13 | 0.25 | 0.06 | 0.27 |
| (1,1198) | 1:A:178:TRP:HZ2 | 1:A:186:ILE:HB | 13 | 0.22 | 0.08 | 0.2 |
| (1,1160) | 1:A:173:ASP:H | 1:A:174:GLU:H | 13 | 0.18 | 0.07 | 0.16 |
| (1,610) | 1:A:96:TYR:HB2 | 1:A:102:HIS:HD2 | 13 | 0.14 | 0.03 | 0.14 |
| (1,99) | 1:A:23:TYR:HB2 | 1:A:72:VAL:H | 12 | 0.74 | 0.26 | 0.74 |
| (1,99) | 1:A:23:TYR:HB3 | 1:A:72:VAL:H | 12 | 0.74 | 0.26 | 0.74 |
| (1,1399) | 1:A:228:GLN:HA | 1:A:230:ASP:HB2 | 12 | 0.52 | 0.17 | 0.59 |
| (1,1399) | 1:A:228:GLN:HA | 1:A:230:ASP:HB3 | 12 | 0.52 | 0.17 | 0.59 |
| (1,1098) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:169:ASP:H | 12 | 0.52 | 0.16 | 0.5 |
| (1,1187) | 1:A:178:TRP:H | 1:A:178:TRP:HE1 | 12 | 0.5 | 0.16 | 0.54 |
| (1,1308) | 1:A:202:MET:H | 1:A:234:ILE:HD11 | 12 | 0.46 | 0.2 | 0.5 |
| (1,1308) | 1:A:202:MET:H | 1:A:234:ILE:HD12 | 12 | 0.46 | 0.2 | 0.5 |
| (1,1308) | 1:A:202:MET:H | 1:A:234:ILE:HD13 | 12 | 0.46 | 0.2 | 0.5 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD11 | 12 | 0.41 | 0.16 | 0.37 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD12 | 12 | 0.41 | 0.16 | 0.37 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD13 | 12 | 0.41 | 0.16 | 0.37 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD11 | 12 | 0.41 | 0.16 | 0.37 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD12 | 12 | 0.41 | 0.16 | 0.37 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD13 | 12 | 0.41 | 0.16 | 0.37 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD11 | 12 | 0.41 | 0.16 | 0.37 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD12 | 12 | 0.41 | 0.16 | 0.37 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD13 | 12 | 0.41 | 0.16 | 0.37 |
| (1,891) | 1:A:124:PHE:HD1 | 1:A:125:ARG:H | 12 | 0.4 | 0.09 | 0.4 |
| (1,891) | 1:A:124:PHE:HD2 | 1:A:125:ARG:H | 12 | 0.4 | 0.09 | 0.4 |
| (1,819) | 1:A:117:GLY:HA2 | 1:A:122:LEU:H | 12 | 0.39 | 0.12 | 0.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,882) | 1:A:122:LEU:HG | 1:A:123:HIS:H | 12 | 0.38 | 0.06 | 0.36 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:202:MET:HE1 | 12 | 0.37 | 0.14 | 0.38 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:202:MET:HE2 | 12 | 0.37 | 0.14 | 0.38 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:202:MET:HE3 | 12 | 0.37 | 0.14 | 0.38 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:202:MET:HE1 | 12 | 0.37 | 0.14 | 0.38 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:202:MET:HE2 | 12 | 0.37 | 0.14 | 0.38 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:202:MET:HE3 | 12 | 0.37 | 0.14 | 0.38 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:202:MET:HE1 | 12 | 0.37 | 0.14 | 0.38 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:202:MET:HE2 | 12 | 0.37 | 0.14 | 0.38 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:202:MET:HE3 | 12 | 0.37 | 0.14 | 0.38 |
| (1,694) | 1:A:105:VAL:HA | 1:A:188:PHE:HE1 | 12 | 0.36 | 0.1 | 0.4 |
| (1,694) | 1:A:105:VAL:HA | 1:A:188:PHE:HE2 | 12 | 0.36 | 0.1 | 0.4 |
| (1,166) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:41:GLU:HG2 | 12 | 0.35 | 0.23 | 0.28 |
| (7,417) | 1:A:194:HIS:H | 1:A:211:VAL:HG11 | 12 | 0.34 | 0.13 | 0.3 |
| (7,417) | 1:A:194:HIS:H | 1:A:211:VAL:HG12 | 12 | 0.34 | 0.13 | 0.3 |
| (7,417) | 1:A:194:HIS:H | 1:A:211:VAL:HG13 | 12 | 0.34 | 0.13 | 0.3 |
| (1,272) | 1:A:49:PRO:HG2 | 1:A:50:ILE:HA | 12 | 0.32 | 0.14 | 0.26 |
| (1,1020) | 1:A:142:ALA:HB1 | 1:A:145:ASP:H | 12 | 0.25 | 0.1 | 0.22 |
| (1,1020) | 1:A:142:ALA:HB2 | 1:A:145:ASP:H | 12 | 0.25 | 0.1 | 0.22 |
| (1,1020) | 1:A:142:ALA:HB3 | 1:A:145:ASP:H | 12 | 0.25 | 0.1 | 0.22 |
| (1,730) | 1:A:110:SER:H | 1:A:112:ALA:H | 12 | 0.24 | 0.1 | 0.24 |
| (1,945) | 1:A:134:ILE:H | 1:A:136:ILE:HD11 | 12 | 0.24 | 0.11 | 0.21 |
| (1,945) | 1:A:134:ILE:H | 1:A:136:ILE:HD12 | 12 | 0.24 | 0.11 | 0.21 |
| (1,945) | 1:A:134:ILE:H | 1:A:136:ILE:HD13 | 12 | 0.24 | 0.11 | 0.21 |
| (1,277) | 1:A:50:ILE:H | 1:A:51:THR:H | 12 | 0.2 | 0.05 | 0.21 |
| (1,670) | 1:A:103:ILE:HD11 | 1:A:104:THR:H | 12 | 0.17 | 0.04 | 0.17 |
| (1,670) | 1:A:103:ILE:HD12 | 1:A:104:THR:H | 12 | 0.17 | 0.04 | 0.17 |
| (1,670) | 1:A:103:ILE:HD13 | 1:A:104:THR:H | 12 | 0.17 | 0.04 | 0.17 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG11 | 1:A:160:PHE:HE1 | 11 | 0.76 | 0.2 | 0.71 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG11 | 1:A:160:PHE:HE2 | 11 | 0.76 | 0.2 | 0.71 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG12 | 1:A:160:PHE:HE1 | 11 | 0.76 | 0.2 | 0.71 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG12 | 1:A:160:PHE:HE2 | 11 | 0.76 | 0.2 | 0.71 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG13 | 1:A:160:PHE:HE1 | 11 | 0.76 | 0.2 | 0.71 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG13 | 1:A:160:PHE:HE2 | 11 | 0.76 | 0.2 | 0.71 |
| (1,213) | 1:A:43:GLN:HA | 1:A:48:LEU:H | 11 | 0.47 | 0.19 | 0.52 |
| (1,630) | 1:A:98:ARG:H | 1:A:99:ASP:HB2 | 11 | 0.47 | 0.06 | 0.45 |
| (1,630) | 1:A:98:ARG:H | 1:A:99:ASP:HB3 | 11 | 0.47 | 0.06 | 0.45 |
| (1,257) | 1:A:46:PHE:HE1 | 1:A:61:ILE:HA | 11 | 0.44 | 0.18 | 0.47 |
| (1,257) | 1:A:46:PHE:HE2 | 1:A:61:ILE:HA | 11 | 0.44 | 0.18 | 0.47 |
| (1,400) | 1:A:68:GLY:H | 1:A:158:HIS:HB3 | 11 | 0.39 | 0.11 | 0.45 |
| (1,304) | 1:A:57:ARG:H | 1:A:59:ILE:H | 11 | 0.38 | 0.18 | 0.36 |
| (1,461) | 1:A:84:TRP:H | 1:A:234:ILE:HD11 | 11 | 0.34 | 0.16 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,461) | 1:A:84:TRP:H | 1:A:234:ILE:HD12 | 11 | 0.34 | 0.16 | 0.3 |
| (1,461) | 1:A:84:TRP:H | 1:A:234:ILE:HD13 | 11 | 0.34 | 0.16 | 0.3 |
| (1,27) | 1:A:14:GLN:H | 1:A:16:GLN:H | 11 | 0.32 | 0.13 | 0.32 |
| (7,159) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:90:THR:H | 11 | 0.3 | 0.12 | 0.27 |
| (7,159) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:90:THR:H | 11 | 0.3 | 0.12 | 0.27 |
| (7,159) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:90:THR:H | 11 | 0.3 | 0.12 | 0.27 |
| (1,451) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:234:ILE:HG13 | 11 | 0.27 | 0.07 | 0.26 |
| (1,451) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:234:ILE:HG13 | 11 | 0.27 | 0.07 | 0.26 |
| (1,443) | 1:A:82:PRO:HD2 | 1:A:83:LYS:HG2 | 11 | 0.25 | 0.08 | 0.25 |
| (1,443) | 1:A:82:PRO:HD2 | 1:A:83:LYS:HG3 | 11 | 0.25 | 0.08 | 0.25 |
| (7,301) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:196:LEU:HD11 | 11 | 0.24 | 0.1 | 0.21 |
| (7,301) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:196:LEU:HD12 | 11 | 0.24 | 0.1 | 0.21 |
| (7,301) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:196:LEU:HD13 | 11 | 0.24 | 0.1 | 0.21 |
| (1,994) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:139:ALA:H | 11 | 0.24 | 0.1 | 0.2 |
| (1,994) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:139:ALA:H | 11 | 0.24 | 0.1 | 0.2 |
| (1,1295) | 1:A:199:SER:H | 1:A:201:GLY:H | 11 | 0.24 | 0.04 | 0.24 |
| (7,241) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG11 | 11 | 0.23 | 0.07 | 0.19 |
| (7,241) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG12 | 11 | 0.23 | 0.07 | 0.19 |
| (7,241) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG13 | 11 | 0.23 | 0.07 | 0.19 |
| (1,1440) | 1:A:233:GLY:HA2 | 1:A:235:GLN:H | 11 | 0.21 | 0.08 | 0.19 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:136:ILE:HD11 | 11 | 0.2 | 0.09 | 0.21 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:136:ILE:HD12 | 11 | 0.2 | 0.09 | 0.21 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:136:ILE:HD13 | 11 | 0.2 | 0.09 | 0.21 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:136:ILE:HD11 | 11 | 0.2 | 0.09 | 0.21 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:136:ILE:HD12 | 11 | 0.2 | 0.09 | 0.21 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:136:ILE:HD13 | 11 | 0.2 | 0.09 | 0.21 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:136:ILE:HD11 | 11 | 0.2 | 0.09 | 0.21 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:136:ILE:HD12 | 11 | 0.2 | 0.09 | 0.21 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:136:ILE:HD13 | 11 | 0.2 | 0.09 | 0.21 |
| (1,1058) | 1:A:156:LEU:HB2 | 1:A:178:TRP:HH2 | 11 | 0.2 | 0.06 | 0.2 |
| (1,1058) | 1:A:156:LEU:HB3 | 1:A:178:TRP:HH2 | 11 | 0.2 | 0.06 | 0.2 |
| (1,11) | 1:A:10:LEU:H | 1:A:13:GLU:H | 11 | 0.17 | 0.06 | 0.16 |
| (1,420) | 1:A:73:ALA:H | 1:A:74:GLU:H | 11 | 0.17 | 0.03 | 0.18 |
| (1,877) | 1:A:122:LEU:H | 1:A:123:HIS:H | 11 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,46) | 1:A:16:GLN:HE21 | 1:A:35:LEU:H | 10 | 0.46 | 0.24 | 0.44 |
| (1,46) | 1:A:16:GLN:HE22 | 1:A:35:LEU:H | 10 | 0.46 | 0.24 | 0.44 |
| (1,1080) | 1:A:158:HIS:H | 1:A:158:HIS:HE1 | 10 | 0.4 | 0.12 | 0.4 |
| (1,1126) | 1:A:165:GLY:HA2 | 1:A:167:GLY:H | 10 | 0.35 | 0.14 | 0.4 |
| (1,1126) | 1:A:165:GLY:HA3 | 1:A:167:GLY:H | 10 | 0.35 | 0.14 | 0.4 |
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:188:PHE:HE1 | 10 | 0.32 | 0.06 | 0.36 |
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:188:PHE:HE2 | 10 | 0.32 | 0.06 | 0.36 |
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:188:PHE:HE1 | 10 | 0.32 | 0.06 | 0.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:188:PHE:HE2 | 10 | 0.32 | 0.06 | 0.36 |
| (1,738) | 1:A:111:LYS:HA | 1:A:113:LEU:H | 10 | 0.31 | 0.06 | 0.29 |
| (1,1095) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:160:PHE:HD1 | 10 | 0.31 | 0.08 | 0.3 |
| (1,1095) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:160:PHE:HD2 | 10 | 0.31 | 0.08 | 0.3 |
| (1,1100) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:198:HIS:HB2 | 10 | 0.3 | 0.12 | 0.24 |
| (1,901) | 1:A:126:LYS:HD2 | 1:A:127:VAL:HB | 10 | 0.29 | 0.11 | 0.33 |
| (1,901) | 1:A:126:LYS:HD3 | 1:A:127:VAL:HB | 10 | 0.29 | 0.11 | 0.33 |
| (7,15) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:72:VAL:HG21 | 10 | 0.26 | 0.17 | 0.19 |
| (7,15) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:72:VAL:HG22 | 10 | 0.26 | 0.17 | 0.19 |
| (7,15) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:72:VAL:HG23 | 10 | 0.26 | 0.17 | 0.19 |
| (1,108) | 1:A:25:TYR:HB3 | 1:A:26:ASP:HA | 10 | 0.19 | 0.03 | 0.2 |
| (1,75) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:22:PHE:H | 10 | 0.18 | 0.06 | 0.15 |
| (1,920) | 1:A:129:TRP:HB2 | 1:A:130:GLY:H | 10 | 0.17 | 0.05 | 0.16 |
| (1,920) | 1:A:129:TRP:HB3 | 1:A:130:GLY:H | 10 | 0.17 | 0.05 | 0.16 |
| (1,519) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:134:ILE:HG21 | 10 | 0.16 | 0.05 | 0.14 |
| (1,519) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:134:ILE:HG22 | 10 | 0.16 | 0.05 | 0.14 |
| (1,519) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:134:ILE:HG23 | 10 | 0.16 | 0.05 | 0.14 |
| (1,230) | 1:A:45:PHE:H | 1:A:45:PHE:HD1 | 10 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (1,230) | 1:A:45:PHE:H | 1:A:45:PHE:HD2 | 10 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (7,207) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:95:SER:H | 10 | 0.14 | 0.02 | 0.15 |
| (7,207) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:95:SER:H | 10 | 0.14 | 0.02 | 0.15 |
| (7,207) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:95:SER:H | 10 | 0.14 | 0.02 | 0.15 |
| (7,256) | 1:A:107:ARG:HG2 | 1:A:108:LEU:HD21 | 9 | 0.75 | 0.39 | 1.01 |
| (7,256) | 1:A:107:ARG:HG2 | 1:A:108:LEU:HD22 | 9 | 0.75 | 0.39 | 1.01 |
| (7,256) | 1:A:107:ARG:HG2 | 1:A:108:LEU:HD23 | 9 | 0.75 | 0.39 | 1.01 |
| (1,780) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HA | 9 | 0.57 | 0.26 | 0.69 |
| (1,780) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HA | 9 | 0.57 | 0.26 | 0.69 |
| (1,780) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HA | 9 | 0.57 | 0.26 | 0.69 |
| (1,401) | 1:A:68:GLY:H | 1:A:159:ALA:H | 9 | 0.41 | 0.14 | 0.36 |
| (1,561) | 1:A:92:ARG:HD2 | 1:A:132:ALA:H | 9 | 0.41 | 0.31 | 0.27 |
| (1,561) | 1:A:92:ARG:HD3 | 1:A:132:ALA:H | 9 | 0.41 | 0.31 | 0.27 |
| (7,364) | 1:A:127:VAL:HG11 | 1:A:129:TRP:H | 9 | 0.38 | 0.06 | 0.4 |
| (7,364) | 1:A:127:VAL:HG12 | 1:A:129:TRP:H | 9 | 0.38 | 0.06 | 0.4 |
| (7,364) | 1:A:127:VAL:HG13 | 1:A:129:TRP:H | 9 | 0.38 | 0.06 | 0.4 |
| (7,368) | 1:A:127:VAL:HG11 | 1:A:129:TRP:H | 9 | 0.38 | 0.06 | 0.4 |
| (7,368) | 1:A:127:VAL:HG12 | 1:A:129:TRP:H | 9 | 0.38 | 0.06 | 0.4 |
| (7,368) | 1:A:127:VAL:HG13 | 1:A:129:TRP:H | 9 | 0.38 | 0.06 | 0.4 |
| (1,1392) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:226:LEU:HA | 9 | 0.33 | 0.13 | 0.35 |
| (1,1392) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:226:LEU:HA | 9 | 0.33 | 0.13 | 0.35 |
| (1,568) | 1:A:92:ARG:HE | 1:A:127:VAL:HB | 9 | 0.33 | 0.17 | 0.25 |
| (1,448) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:202:MET:HA | 9 | 0.32 | 0.1 | 0.35 |
| (1,448) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:202:MET:HA | 9 | 0.32 | 0.1 | 0.35 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,485) | 1:A:89:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB2 | 9 | 0.31 | 0.1 | 0.33 |
| (1,485) | 1:A:89:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB3 | 9 | 0.31 | 0.1 | 0.33 |
| (1,292) | 1:A:55:ASN:H | 1:A:58:VAL:H | 9 | 0.28 | 0.13 | 0.21 |
| (1,802) | 1:A:116:TRP:HE1 | 1:A:202:MET:HB2 | 9 | 0.27 | 0.15 | 0.25 |
| (1,802) | 1:A:116:TRP:HE1 | 1:A:202:MET:HB3 | 9 | 0.27 | 0.15 | 0.25 |
| (7,242) | 1:A:102:HIS:HD2 | 1:A:105:VAL:HG11 | 9 | 0.27 | 0.08 | 0.26 |
| (7,242) | 1:A:102:HIS:HD2 | 1:A:105:VAL:HG12 | 9 | 0.27 | 0.08 | 0.26 |
| (7,242) | 1:A:102:HIS:HD2 | 1:A:105:VAL:HG13 | 9 | 0.27 | 0.08 | 0.26 |
| (1,1097) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:168:GLY:HA2 | 9 | 0.27 | 0.09 | 0.23 |
| (6,1) | 1:A:155:THR:HG1 | 1:A:154:ASN:OD1 | 9 | 0.24 | 0.14 | 0.2 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:238:TYR:HB2 | 9 | 0.21 | 0.05 | 0.19 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:238:TYR:HB3 | 9 | 0.21 | 0.05 | 0.19 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:238:TYR:HB2 | 9 | 0.21 | 0.05 | 0.19 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:238:TYR:HB3 | 9 | 0.21 | 0.05 | 0.19 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:238:TYR:HB2 | 9 | 0.21 | 0.05 | 0.19 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:238:TYR:HB3 | 9 | 0.21 | 0.05 | 0.19 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:173:ASP:HB2 | 9 | 0.2 | 0.08 | 0.16 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:173:ASP:HB3 | 9 | 0.2 | 0.08 | 0.16 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:173:ASP:HB2 | 9 | 0.2 | 0.08 | 0.16 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:173:ASP:HB3 | 9 | 0.2 | 0.08 | 0.16 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:173:ASP:HB2 | 9 | 0.2 | 0.08 | 0.16 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:173:ASP:HB3 | 9 | 0.2 | 0.08 | 0.16 |
| (1,470) | 1:A:84:TRP:HZ2 | 1:A:168:GLY:HA2 | 8 | 0.68 | 0.2 | 0.73 |
| (1,903) | 1:A:126:LYS:HD2 | 1:A:127:VAL:HB | 8 | 0.61 | 0.17 | 0.63 |
| (1,467) | 1:A:84:TRP:HE1 | 1:A:199:SER:HA | 8 | 0.56 | 0.09 | 0.52 |
| (7,65) | 1:A:56:SER:H | 1:A:58:VAL:HG21 | 8 | 0.42 | 0.2 | 0.46 |
| (7,65) | 1:A:56:SER:H | 1:A:58:VAL:HG22 | 8 | 0.42 | 0.2 | 0.46 |
| (7,65) | 1:A:56:SER:H | 1:A:58:VAL:HG23 | 8 | 0.42 | 0.2 | 0.46 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE1 | 1:A:43:GLN:HG2 | 8 | 0.41 | 0.24 | 0.32 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE1 | 1:A:43:GLN:HG3 | 8 | 0.41 | 0.24 | 0.32 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE2 | 1:A:43:GLN:HG2 | 8 | 0.41 | 0.24 | 0.32 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE2 | 1:A:43:GLN:HG3 | 8 | 0.41 | 0.24 | 0.32 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE3 | 1:A:43:GLN:HG2 | 8 | 0.41 | 0.24 | 0.32 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE3 | 1:A:43:GLN:HG3 | 8 | 0.41 | 0.24 | 0.32 |
| (1,1018) | 1:A:141:GLY:H | 1:A:150:ASP:H | 8 | 0.39 | 0.15 | 0.44 |
| (7,341) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:226:LEU:HD21 | 8 | 0.39 | 0.14 | 0.4 |
| (7,341) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:226:LEU:HD22 | 8 | 0.39 | 0.14 | 0.4 |
| (7,341) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:226:LEU:HD23 | 8 | 0.39 | 0.14 | 0.4 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HB2 | 8 | 0.36 | 0.14 | 0.34 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HB3 | 8 | 0.36 | 0.14 | 0.34 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HB2 | 8 | 0.36 | 0.14 | 0.34 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HB3 | 8 | 0.36 | 0.14 | 0.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HB2 | 8 | 0.36 | 0.14 | 0.34 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HB3 | 8 | 0.36 | 0.14 | 0.34 |
| (1,1307) | 1:A:202:MET:H | 1:A:202:MET:HE1 | 8 | 0.36 | 0.16 | 0.37 |
| (1,1307) | 1:A:202:MET:H | 1:A:202:MET:HE2 | 8 | 0.36 | 0.16 | 0.37 |
| (1,1307) | 1:A:202:MET:H | 1:A:202:MET:HE3 | 8 | 0.36 | 0.16 | 0.37 |
| (1,951) | 1:A:134:ILE:HD11 | 1:A:135:MET:H | 8 | 0.34 | 0.11 | 0.32 |
| (1,951) | 1:A:134:ILE:HD12 | 1:A:135:MET:H | 8 | 0.34 | 0.11 | 0.32 |
| (1,951) | 1:A:134:ILE:HD13 | 1:A:135:MET:H | 8 | 0.34 | 0.11 | 0.32 |
| (1,514) | 1:A:91:TYR:H | 1:A:126:LYS:HA | 8 | 0.32 | 0.14 | 0.27 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG11 | 1:A:124:PHE:HE1 | 8 | 0.32 | 0.07 | 0.34 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG11 | 1:A:124:PHE:HE2 | 8 | 0.32 | 0.07 | 0.34 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG12 | 1:A:124:PHE:HE1 | 8 | 0.32 | 0.07 | 0.34 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG12 | 1:A:124:PHE:HE2 | 8 | 0.32 | 0.07 | 0.34 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG13 | 1:A:124:PHE:HE1 | 8 | 0.32 | 0.07 | 0.34 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG13 | 1:A:124:PHE:HE2 | 8 | 0.32 | 0.07 | 0.34 |
| (1,61) | 1:A:18:TYR:HB3 | 1:A:20:LYS:H | 8 | 0.32 | 0.12 | 0.28 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG21 | 1:A:53:MET:HB2 | 8 | 0.27 | 0.14 | 0.19 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG21 | 1:A:53:MET:HB3 | 8 | 0.27 | 0.14 | 0.19 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG22 | 1:A:53:MET:HB2 | 8 | 0.27 | 0.14 | 0.19 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG22 | 1:A:53:MET:HB3 | 8 | 0.27 | 0.14 | 0.19 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG23 | 1:A:53:MET:HB2 | 8 | 0.27 | 0.14 | 0.19 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG23 | 1:A:53:MET:HB3 | 8 | 0.27 | 0.14 | 0.19 |
| (1,87) | 1:A:21:ARG:H | 1:A:22:PHE:HB2 | 8 | 0.26 | 0.12 | 0.23 |
| (1,87) | 1:A:21:ARG:H | 1:A:22:PHE:HB3 | 8 | 0.26 | 0.12 | 0.23 |
| (1,698) | 1:A:106:ASP:H | 1:A:107:ARG:HG2 | 8 | 0.26 | 0.08 | 0.24 |
| (1,698) | 1:A:106:ASP:H | 1:A:107:ARG:HG3 | 8 | 0.26 | 0.08 | 0.24 |
| (1,1193) | 1:A:178:TRP:HE3 | 1:A:188:PHE:H | 8 | 0.26 | 0.1 | 0.24 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:134:ILE:HD11 | 8 | 0.26 | 0.1 | 0.26 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:134:ILE:HD12 | 8 | 0.26 | 0.1 | 0.26 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:134:ILE:HD13 | 8 | 0.26 | 0.1 | 0.26 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:134:ILE:HD11 | 8 | 0.26 | 0.1 | 0.26 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:134:ILE:HD12 | 8 | 0.26 | 0.1 | 0.26 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:134:ILE:HD13 | 8 | 0.26 | 0.1 | 0.26 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:134:ILE:HD11 | 8 | 0.26 | 0.1 | 0.26 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:134:ILE:HD12 | 8 | 0.26 | 0.1 | 0.26 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:134:ILE:HD13 | 8 | 0.26 | 0.1 | 0.26 |
| (1,270) | 1:A:49:PRO:HB2 | 1:A:50:ILE:HG21 | 8 | 0.26 | 0.15 | 0.18 |
| (1,270) | 1:A:49:PRO:HB2 | 1:A:50:ILE:HG22 | 8 | 0.26 | 0.15 | 0.18 |
| (1,270) | 1:A:49:PRO:HB2 | 1:A:50:ILE:HG23 | 8 | 0.26 | 0.15 | 0.18 |
| (1,631) | 1:A:98:ARG:H | 1:A:100:LEU:H | 8 | 0.25 | 0.09 | 0.24 |
| (1,406) | 1:A:69:VAL:H | 1:A:159:ALA:H | 8 | 0.22 | 0.08 | 0.2 |
| (1,406) | 1:A:69:VAL:H | 1:A:159:ALA:H | 8 | 0.22 | 0.08 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (7,433) | 1:A:200:LEU:HD11 | 1:A:201:GLY:H | 8 | 0.22 | 0.05 | 0.22 |
| (7,433) | 1:A:200:LEU:HD12 | 1:A:201:GLY:H | 8 | 0.22 | 0.05 | 0.22 |
| (7,433) | 1:A:200:LEU:HD13 | 1:A:201:GLY:H | 8 | 0.22 | 0.05 | 0.22 |
| (1,156) | 1:A:38:LYS:HA | 1:A:41:GLU:HG3 | 8 | 0.2 | 0.08 | 0.18 |
| (1,985) | 1:A:137:GLY:H | 1:A:170:ALA:H | 8 | 0.19 | 0.06 | 0.16 |
| (7,428) | 1:A:198:HIS:H | 1:A:200:LEU:HG | 8 | 0.17 | 0.03 | 0.16 |
| (1,559) | 1:A:92:ARG:HD2 | 1:A:128:VAL:H | 7 | 0.48 | 0.13 | 0.49 |
| (1,559) | 1:A:92:ARG:HD3 | 1:A:128:VAL:H | 7 | 0.48 | 0.13 | 0.49 |
| (5,2) | 1:A:66:ARG:NH2 | 1:A:71:ASP:OD1 | 7 | 0.46 | 0.41 | 0.32 |
| (1,192) | 1:A:42:MET:HE1 | 1:A:61:ILE:HB | 7 | 0.36 | 0.14 | 0.31 |
| (1,192) | 1:A:42:MET:HE2 | 1:A:61:ILE:HB | 7 | 0.36 | 0.14 | 0.31 |
| (1,192) | 1:A:42:MET:HE3 | 1:A:61:ILE:HB | 7 | 0.36 | 0.14 | 0.31 |
| (1,1305) | 1:A:201:GLY:H | 1:A:202:MET:HB2 | 7 | 0.34 | 0.15 | 0.44 |
| (1,1305) | 1:A:201:GLY:H | 1:A:202:MET:HB3 | 7 | 0.34 | 0.15 | 0.44 |
| (1,232) | 1:A:45:PHE:H | 1:A:46:PHE:HD1 | 7 | 0.32 | 0.11 | 0.33 |
| (1,232) | 1:A:45:PHE:H | 1:A:46:PHE:HD2 | 7 | 0.32 | 0.11 | 0.33 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:238:TYR:HD1 | 7 | 0.32 | 0.12 | 0.35 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:238:TYR:HD2 | 7 | 0.32 | 0.12 | 0.35 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:238:TYR:HD1 | 7 | 0.32 | 0.12 | 0.35 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:238:TYR:HD2 | 7 | 0.32 | 0.12 | 0.35 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:238:TYR:HD1 | 7 | 0.32 | 0.12 | 0.35 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:238:TYR:HD2 | 7 | 0.32 | 0.12 | 0.35 |
| (1,1405) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:H | 7 | 0.28 | 0.1 | 0.27 |
| (1,1405) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:H | 7 | 0.28 | 0.1 | 0.27 |
| (1,981) | 1:A:136:ILE:HG21 | 1:A:170:ALA:H | 7 | 0.22 | 0.05 | 0.23 |
| (1,981) | 1:A:136:ILE:HG22 | 1:A:170:ALA:H | 7 | 0.22 | 0.05 | 0.23 |
| (1,981) | 1:A:136:ILE:HG23 | 1:A:170:ALA:H | 7 | 0.22 | 0.05 | 0.23 |
| (7,373) | 1:A:128:VAL:HA | 1:A:127:VAL:HG21 | 7 | 0.2 | 0.03 | 0.19 |
| (7,373) | 1:A:128:VAL:HA | 1:A:127:VAL:HG22 | 7 | 0.2 | 0.03 | 0.19 |
| (7,373) | 1:A:128:VAL:HA | 1:A:127:VAL:HG23 | 7 | 0.2 | 0.03 | 0.19 |
| (7,12) | 1:A:23:TYR:H | 1:A:72:VAL:HG21 | 7 | 0.19 | 0.07 | 0.17 |
| (7,12) | 1:A:23:TYR:H | 1:A:72:VAL:HG22 | 7 | 0.19 | 0.07 | 0.17 |
| (7,12) | 1:A:23:TYR:H | 1:A:72:VAL:HG23 | 7 | 0.19 | 0.07 | 0.17 |
| (1,344) | 1:A:61:ILE:H | 1:A:63:GLN:HG2 | 7 | 0.19 | 0.07 | 0.19 |
| (1,344) | 1:A:61:ILE:H | 1:A:63:GLN:HG3 | 7 | 0.19 | 0.07 | 0.19 |
| (1,33) | 1:A:15:ALA:H | 1:A:59:ILE:HD11 | 7 | 0.16 | 0.05 | 0.13 |
| (1,33) | 1:A:15:ALA:H | 1:A:59:ILE:HD12 | 7 | 0.16 | 0.05 | 0.13 |
| (1,33) | 1:A:15:ALA:H | 1:A:59:ILE:HD13 | 7 | 0.16 | 0.05 | 0.13 |
| (1,1030) | 1:A:147:TYR:HA | 1:A:147:TYR:HE1 | 7 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1030) | 1:A:147:TYR:HA | 1:A:147:TYR:HE2 | 7 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,145) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:39:LEU:H | 7 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (5,1) | 1:A:66:ARG:NH1 | 1:A:71:ASP:OD2 | 6 | 0.67 | 0.27 | 0.6 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1341) | 1:A:207:ASP:H | 1:A:213:TYR:HE1 | 6 | 0.53 | 0.22 | 0.65 |
| (1,1341) | 1:A:207:ASP:H | 1:A:213:TYR:HE2 | 6 | 0.53 | 0.22 | 0.65 |
| (1,1038) | 1:A:150:ASP:H | 1:A:151:GLY:H | 6 | 0.48 | 0.15 | 0.43 |
| (1,42) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:16:GLN:HE21 | 6 | 0.42 | 0.25 | 0.38 |
| (1,42) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:16:GLN:HE22 | 6 | 0.42 | 0.25 | 0.38 |
| (1,58) | 1:A:18:TYR:HB2 | 1:A:20:LYS:H | 6 | 0.38 | 0.19 | 0.36 |
| (1,1125) | 1:A:165:GLY:H | 1:A:167:GLY:H | 6 | 0.34 | 0.15 | 0.29 |
| (1,532) | 1:A:91:TYR:HD1 | 1:A:126:LYS:HA | 6 | 0.33 | 0.19 | 0.3 |
| (1,532) | 1:A:91:TYR:HD2 | 1:A:126:LYS:HA | 6 | 0.33 | 0.19 | 0.3 |
| (1,1054) | 1:A:155:THR:HG21 | 1:A:158:HIS:HA | 6 | 0.3 | 0.16 | 0.24 |
| (1,1054) | 1:A:155:THR:HG22 | 1:A:158:HIS:HA | 6 | 0.3 | 0.16 | 0.24 |
| (1,1054) | 1:A:155:THR:HG23 | 1:A:158:HIS:HA | 6 | 0.3 | 0.16 | 0.24 |
| (7,190) | 1:A:91:TYR:HE1 | 1:A:113:LEU:HD11 | 6 | 0.25 | 0.07 | 0.24 |
| (7,190) | 1:A:91:TYR:HE1 | 1:A:113:LEU:HD12 | 6 | 0.25 | 0.07 | 0.24 |
| (7,190) | 1:A:91:TYR:HE1 | 1:A:113:LEU:HD13 | 6 | 0.25 | 0.07 | 0.24 |
| (7,190) | 1:A:91:TYR:HE2 | 1:A:113:LEU:HD11 | 6 | 0.25 | 0.07 | 0.24 |
| (7,190) | 1:A:91:TYR:HE2 | 1:A:113:LEU:HD12 | 6 | 0.25 | 0.07 | 0.24 |
| (7,190) | 1:A:91:TYR:HE2 | 1:A:113:LEU:HD13 | 6 | 0.25 | 0.07 | 0.24 |
| (1,1208) | 1:A:179:THR:HB | 1:A:185:GLY:H | 6 | 0.25 | 0.12 | 0.22 |
| (1,777) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:224:PHE:HB2 | 6 | 0.23 | 0.07 | 0.25 |
| (1,777) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:224:PHE:HB3 | 6 | 0.23 | 0.07 | 0.25 |
| (1,777) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:224:PHE:HB2 | 6 | 0.23 | 0.07 | 0.25 |
| (1,777) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:224:PHE:HB3 | 6 | 0.23 | 0.07 | 0.25 |
| (1,777) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:224:PHE:HB2 | 6 | 0.23 | 0.07 | 0.25 |
| (1,777) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:224:PHE:HB3 | 6 | 0.23 | 0.07 | 0.25 |
| (1,4) | 1:A:4:ALA:HB1 | 1:A:59:ILE:HB | 6 | 0.22 | 0.09 | 0.2 |
| (1,4) | 1:A:4:ALA:HB2 | 1:A:59:ILE:HB | 6 | 0.22 | 0.09 | 0.2 |
| (1,4) | 1:A:4:ALA:HB3 | 1:A:59:ILE:HB | 6 | 0.22 | 0.09 | 0.2 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD11 | 1:A:104:THR:HG21 | 6 | 0.21 | 0.05 | 0.21 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD11 | 1:A:104:THR:HG22 | 6 | 0.21 | 0.05 | 0.21 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD11 | 1:A:104:THR:HG23 | 6 | 0.21 | 0.05 | 0.21 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD12 | 1:A:104:THR:HG21 | 6 | 0.21 | 0.05 | 0.21 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD12 | 1:A:104:THR:HG22 | 6 | 0.21 | 0.05 | 0.21 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD12 | 1:A:104:THR:HG23 | 6 | 0.21 | 0.05 | 0.21 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD13 | 1:A:104:THR:HG21 | 6 | 0.21 | 0.05 | 0.21 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD13 | 1:A:104:THR:HG22 | 6 | 0.21 | 0.05 | 0.21 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD13 | 1:A:104:THR:HG23 | 6 | 0.21 | 0.05 | 0.21 |
| (1,1485) | 1:A:237:LEU:HG | 1:A:238:TYR:H | 6 | 0.18 | 0.04 | 0.17 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:211:VAL:HG11 | 6 | 0.18 | 0.07 | 0.16 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:211:VAL:HG12 | 6 | 0.18 | 0.07 | 0.16 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:211:VAL:HG13 | 6 | 0.18 | 0.07 | 0.16 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:211:VAL:HG11 | 6 | 0.18 | 0.07 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:211:VAL:HG12 | 6 | 0.18 | 0.07 | 0.16 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:211:VAL:HG13 | 6 | 0.18 | 0.07 | 0.16 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:211:VAL:HG11 | 6 | 0.18 | 0.07 | 0.16 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:211:VAL:HG12 | 6 | 0.18 | 0.07 | 0.16 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:211:VAL:HG13 | 6 | 0.18 | 0.07 | 0.16 |
| (1,371) | 1:A:63:GLN:HB2 | 1:A:64:LYS:H | 6 | 0.15 | 0.05 | 0.14 |
| (1,371) | 1:A:63:GLN:HB3 | 1:A:64:LYS:H | 6 | 0.15 | 0.05 | 0.14 |
| (7,424) | 1:A:196:LEU:HD11 | 1:A:197:GLY:H | 6 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (7,424) | 1:A:196:LEU:HD12 | 1:A:197:GLY:H | 6 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (7,424) | 1:A:196:LEU:HD13 | 1:A:197:GLY:H | 6 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,1111) | 1:A:161:ALA:H | 1:A:163:GLY:H | 5 | 0.53 | 0.25 | 0.47 |
| (1,62) | 1:A:18:TYR:HB3 | 1:A:62:MET:HE1 | 5 | 0.44 | 0.24 | 0.46 |
| (1,62) | 1:A:18:TYR:HB3 | 1:A:62:MET:HE2 | 5 | 0.44 | 0.24 | 0.46 |
| (1,62) | 1:A:18:TYR:HB3 | 1:A:62:MET:HE3 | 5 | 0.44 | 0.24 | 0.46 |
| (1,196) | 1:A:42:MET:HE1 | 1:A:62:MET:HB2 | 5 | 0.4 | 0.21 | 0.47 |
| (1,196) | 1:A:42:MET:HE1 | 1:A:62:MET:HB3 | 5 | 0.4 | 0.21 | 0.47 |
| (1,196) | 1:A:42:MET:HE2 | 1:A:62:MET:HB2 | 5 | 0.4 | 0.21 | 0.47 |
| (1,196) | 1:A:42:MET:HE2 | 1:A:62:MET:HB3 | 5 | 0.4 | 0.21 | 0.47 |
| (1,196) | 1:A:42:MET:HE3 | 1:A:62:MET:HB2 | 5 | 0.4 | 0.21 | 0.47 |
| (1,196) | 1:A:42:MET:HE3 | 1:A:62:MET:HB3 | 5 | 0.4 | 0.21 | 0.47 |
| (1,1473) | 1:A:236:LYS:HG2 | 1:A:237:LEU:H | 5 | 0.37 | 0.08 | 0.35 |
| (1,1473) | 1:A:236:LYS:HG3 | 1:A:237:LEU:H | 5 | 0.37 | 0.08 | 0.35 |
| (8,2) | 1:A:35:LEU:H | 1:A:39:LEU:HD21 | 5 | 0.36 | 0.18 | 0.38 |
| (8,2) | 1:A:35:LEU:H | 1:A:39:LEU:HD22 | 5 | 0.36 | 0.18 | 0.38 |
| (8,2) | 1:A:35:LEU:H | 1:A:39:LEU:HD23 | 5 | 0.36 | 0.18 | 0.38 |
| (1,1022) | 1:A:143:HIS:H | 1:A:145:ASP:H | 5 | 0.35 | 0.11 | 0.33 |
| (1,1022) | 1:A:143:HIS:H | 1:A:145:ASP:H | 5 | 0.35 | 0.11 | 0.33 |
| (1,1467) | 1:A:236:LYS:H | 1:A:236:LYS:HG2 | 5 | 0.33 | 0.03 | 0.35 |
| (1,1467) | 1:A:236:LYS:H | 1:A:236:LYS:HG3 | 5 | 0.33 | 0.03 | 0.35 |
| (1,327) | 1:A:59:ILE:HB | 1:A:60:GLU:H | 5 | 0.33 | 0.05 | 0.33 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HD11 | 5 | 0.3 | 0.14 | 0.24 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HD12 | 5 | 0.3 | 0.14 | 0.24 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HD13 | 5 | 0.3 | 0.14 | 0.24 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HD11 | 5 | 0.3 | 0.14 | 0.24 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HD12 | 5 | 0.3 | 0.14 | 0.24 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HD13 | 5 | 0.3 | 0.14 | 0.24 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HD11 | 5 | 0.3 | 0.14 | 0.24 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HD12 | 5 | 0.3 | 0.14 | 0.24 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HD13 | 5 | 0.3 | 0.14 | 0.24 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:59:ILE:HG21 | 5 | 0.29 | 0.07 | 0.3 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:59:ILE:HG22 | 5 | 0.29 | 0.07 | 0.3 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:59:ILE:HG23 | 5 | 0.29 | 0.07 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:59:ILE:HG21 | 5 | 0.29 | 0.07 | 0.3 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:59:ILE:HG22 | 5 | 0.29 | 0.07 | 0.3 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:59:ILE:HG23 | 5 | 0.29 | 0.07 | 0.3 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:59:ILE:HG21 | 5 | 0.29 | 0.07 | 0.3 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:59:ILE:HG22 | 5 | 0.29 | 0.07 | 0.3 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:59:ILE:HG23 | 5 | 0.29 | 0.07 | 0.3 |
| (1,1) | 1:A:2:GLN:HG2 | 1:A:3:GLU:H | 5 | 0.27 | 0.1 | 0.29 |
| (1,1) | 1:A:2:GLN:HG3 | 1:A:3:GLU:H | 5 | 0.27 | 0.1 | 0.29 |
| (1,434) | 1:A:78:PHE:H | 1:A:78:PHE:HD1 | 5 | 0.24 | 0.11 | 0.24 |
| (1,434) | 1:A:78:PHE:H | 1:A:78:PHE:HD2 | 5 | 0.24 | 0.11 | 0.24 |
| (1,1311) | 1:A:202:MET:HA | 1:A:234:ILE:HD11 | 5 | 0.23 | 0.08 | 0.21 |
| (1,1311) | 1:A:202:MET:HA | 1:A:234:ILE:HD12 | 5 | 0.23 | 0.08 | 0.21 |
| (1,1311) | 1:A:202:MET:HA | 1:A:234:ILE:HD13 | 5 | 0.23 | 0.08 | 0.21 |
| (1,248) | 1:A:46:PHE:HA | 1:A:48:LEU:H | 5 | 0.22 | 0.13 | 0.16 |
| (1,402) | 1:A:68:GLY:H | 1:A:198:HIS:HD2 | 5 | 0.21 | 0.06 | 0.2 |
| (1,1163) | 1:A:173:ASP:H | 1:A:178:TRP:HE1 | 5 | 0.2 | 0.07 | 0.17 |
| (1,161) | 1:A:39:LEU:H | 1:A:41:GLU:H | 5 | 0.18 | 0.05 | 0.18 |
| (7,109) | 1:A:84:TRP:HD1 | 1:A:200:LEU:HD21 | 5 | 0.17 | 0.05 | 0.18 |
| (7,109) | 1:A:84:TRP:HD1 | 1:A:200:LEU:HD22 | 5 | 0.17 | 0.05 | 0.18 |
| (7,109) | 1:A:84:TRP:HD1 | 1:A:200:LEU:HD23 | 5 | 0.17 | 0.05 | 0.18 |
| (7,238) | 1:A:100:LEU:HD21 | 1:A:188:PHE:H | 5 | 0.16 | 0.03 | 0.17 |
| (7,238) | 1:A:100:LEU:HD22 | 1:A:188:PHE:H | 5 | 0.16 | 0.03 | 0.17 |
| (7,238) | 1:A:100:LEU:HD23 | 1:A:188:PHE:H | 5 | 0.16 | 0.03 | 0.17 |
| (7,166) | 1:A:89:VAL:HG11 | 1:A:124:PHE:HE1 | 5 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (7,166) | 1:A:89:VAL:HG11 | 1:A:124:PHE:HE2 | 5 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (7,166) | 1:A:89:VAL:HG12 | 1:A:124:PHE:HE1 | 5 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (7,166) | 1:A:89:VAL:HG12 | 1:A:124:PHE:HE2 | 5 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (7,166) | 1:A:89:VAL:HG13 | 1:A:124:PHE:HE1 | 5 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (7,166) | 1:A:89:VAL:HG13 | 1:A:124:PHE:HE2 | 5 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (1,924) | 1:A:129:TRP:HB3 | 1:A:130:GLY:H | 5 | 0.15 | 0.03 | 0.16 |
| (1,959) | 1:A:135:MET:H | 1:A:136:ILE:H | 5 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1135) | 1:A:171:HIS:H | 1:A:172:PHE:HD1 | 5 | 0.14 | 0.04 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:171:HIS:H | 1:A:172:PHE:HD2 | 5 | 0.14 | 0.04 | 0.12 |
| (1,1330) | 1:A:205:SER:H | 1:A:212:MET:H | 4 | 0.49 | 0.18 | 0.53 |
| (6,2) | 1:A:90:THR:HG1 | 1:A:133:ASP:OD2 | 4 | 0.48 | 0.31 | 0.43 |
| (1,171) | 1:A:40:LYS:HB2 | 1:A:52:GLY:H | 4 | 0.36 | 0.15 | 0.29 |
| (1,171) | 1:A:40:LYS:HB3 | 1:A:52:GLY:H | 4 | 0.36 | 0.15 | 0.29 |
| (1,1347) | 1:A:209:ASN:HD21 | 1:A:210:ALA:HB1 | 4 | 0.3 | 0.16 | 0.22 |
| (1,1347) | 1:A:209:ASN:HD21 | 1:A:210:ALA:HB2 | 4 | 0.3 | 0.16 | 0.22 |
| (1,1347) | 1:A:209:ASN:HD21 | 1:A:210:ALA:HB3 | 4 | 0.3 | 0.16 | 0.22 |
| (1,1347) | 1:A:209:ASN:HD22 | 1:A:210:ALA:HB1 | 4 | 0.3 | 0.16 | 0.22 |
| (1,1347) | 1:A:209:ASN:HD22 | 1:A:210:ALA:HB2 | 4 | 0.3 | 0.16 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1347) | 1:A:209:ASN:HD22 | 1:A:210:ALA:HB3 | 4 | 0.3 | 0.16 | 0.22 |
| (1,278) | 1:A:50:ILE:H | 1:A:51:THR:HG21 | 4 | 0.3 | 0.11 | 0.25 |
| (1,278) | 1:A:50:ILE:H | 1:A:51:THR:HG22 | 4 | 0.3 | 0.11 | 0.25 |
| (1,278) | 1:A:50:ILE:H | 1:A:51:THR:HG23 | 4 | 0.3 | 0.11 | 0.25 |
| (1,79) | 1:A:20:LYS:HG2 | 1:A:21:ARG:H | 4 | 0.26 | 0.07 | 0.29 |
| (1,79) | 1:A:20:LYS:HG3 | 1:A:21:ARG:H | 4 | 0.26 | 0.07 | 0.29 |
| (1,1290) | 1:A:198:HIS:HE1 | 1:A:204:HIS:H | 4 | 0.26 | 0.09 | 0.24 |
| (1,1326) | 1:A:204:HIS:HA | 1:A:214:PRO:HD3 | 4 | 0.26 | 0.11 | 0.22 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD11 | 4 | 0.24 | 0.15 | 0.16 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD12 | 4 | 0.24 | 0.15 | 0.16 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD13 | 4 | 0.24 | 0.15 | 0.16 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD11 | 4 | 0.24 | 0.15 | 0.16 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD12 | 4 | 0.24 | 0.15 | 0.16 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD13 | 4 | 0.24 | 0.15 | 0.16 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD11 | 4 | 0.24 | 0.15 | 0.16 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD12 | 4 | 0.24 | 0.15 | 0.16 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD13 | 4 | 0.24 | 0.15 | 0.16 |
| (1,818) | 1:A:117:GLY:HA2 | 1:A:120:ILE:HG21 | 4 | 0.23 | 0.06 | 0.23 |
| (1,818) | 1:A:117:GLY:HA2 | 1:A:120:ILE:HG22 | 4 | 0.23 | 0.06 | 0.23 |
| (1,818) | 1:A:117:GLY:HA2 | 1:A:120:ILE:HG23 | 4 | 0.23 | 0.06 | 0.23 |
| (1,818) | 1:A:117:GLY:HA2 | 1:A:120:ILE:HG21 | 4 | 0.23 | 0.06 | 0.23 |
| (1,818) | 1:A:117:GLY:HA2 | 1:A:120:ILE:HG22 | 4 | 0.23 | 0.06 | 0.23 |
| (1,818) | 1:A:117:GLY:HA2 | 1:A:120:ILE:HG23 | 4 | 0.23 | 0.06 | 0.23 |
| (7,329) | 1:A:116:TRP:H | 1:A:200:LEU:HD11 | 4 | 0.23 | 0.07 | 0.23 |
| (7,329) | 1:A:116:TRP:H | 1:A:200:LEU:HD12 | 4 | 0.23 | 0.07 | 0.23 |
| (7,329) | 1:A:116:TRP:H | 1:A:200:LEU:HD13 | 4 | 0.23 | 0.07 | 0.23 |
| (1,269) | 1:A:48:LEU:HG | 1:A:215:THR:HG21 | 4 | 0.21 | 0.06 | 0.2 |
| (1,269) | 1:A:48:LEU:HG | 1:A:215:THR:HG22 | 4 | 0.21 | 0.06 | 0.2 |
| (1,269) | 1:A:48:LEU:HG | 1:A:215:THR:HG23 | 4 | 0.21 | 0.06 | 0.2 |
| (1,105) | 1:A:25:TYR:H | 1:A:25:TYR:HD1 | 4 | 0.21 | 0.05 | 0.22 |
| (1,105) | 1:A:25:TYR:H | 1:A:25:TYR:HD2 | 4 | 0.21 | 0.05 | 0.22 |
| (7,31) | 1:A:43:GLN:H | 1:A:48:LEU:HD11 | 4 | 0.21 | 0.11 | 0.16 |
| (7,31) | 1:A:43:GLN:H | 1:A:48:LEU:HD12 | 4 | 0.21 | 0.11 | 0.16 |
| (7,31) | 1:A:43:GLN:H | 1:A:48:LEU:HD13 | 4 | 0.21 | 0.11 | 0.16 |
| (1,412) | 1:A:70:PRO:HD2 | 1:A:147:TYR:HD1 | 4 | 0.19 | 0.08 | 0.15 |
| (1,412) | 1:A:70:PRO:HD2 | 1:A:147:TYR:HD2 | 4 | 0.19 | 0.08 | 0.15 |
| (1,412) | 1:A:70:PRO:HD3 | 1:A:147:TYR:HD1 | 4 | 0.19 | 0.08 | 0.15 |
| (1,412) | 1:A:70:PRO:HD3 | 1:A:147:TYR:HD2 | 4 | 0.19 | 0.08 | 0.15 |
| (1,1037) | 1:A:149:PHE:HB3 | 1:A:150:ASP:H | 4 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (7,1) | 1:A:10:LEU:H | 1:A:10:LEU:HD11 | 4 | 0.18 | 0.05 | 0.19 |
| (7,1) | 1:A:10:LEU:H | 1:A:10:LEU:HD12 | 4 | 0.18 | 0.05 | 0.19 |
| (7,1) | 1:A:10:LEU:H | 1:A:10:LEU:HD13 | 4 | 0.18 | 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) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (7,1) | 1:A:10:LEU:H | 1:A:10:LEU:HD21 | 4 | 0.18 | 0.05 | 0.19 |
| (7,1) | 1:A:10:LEU:H | 1:A:10:LEU:HD22 | 4 | 0.18 | 0.05 | 0.19 |
| (7,1) | 1:A:10:LEU:H | 1:A:10:LEU:HD23 | 4 | 0.18 | 0.05 | 0.19 |
| (1,687) | 1:A:104:THR:HG21 | 1:A:108:LEU:HG | 4 | 0.18 | 0.06 | 0.15 |
| (1,687) | 1:A:104:THR:HG22 | 1:A:108:LEU:HG | 4 | 0.18 | 0.06 | 0.15 |
| (1,687) | 1:A:104:THR:HG23 | 1:A:108:LEU:HG | 4 | 0.18 | 0.06 | 0.15 |
| (7,5) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:54:LEU:HD11 | 4 | 0.17 | 0.11 | 0.11 |
| (7,5) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:54:LEU:HD12 | 4 | 0.17 | 0.11 | 0.11 |
| (7,5) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:54:LEU:HD13 | 4 | 0.17 | 0.11 | 0.11 |
| (1,305) | 1:A:57:ARG:HA | 1:A:57:ARG:HD2 | 4 | 0.16 | 0.02 | 0.17 |
| (1,305) | 1:A:57:ARG:HA | 1:A:57:ARG:HD3 | 4 | 0.16 | 0.02 | 0.17 |
| (1,547) | 1:A:92:ARG:HA | 1:A:92:ARG:HE | 4 | 0.16 | 0.04 | 0.14 |
| (1,22) | 1:A:13:GLU:H | 1:A:15:ALA:H | 4 | 0.14 | 0.04 | 0.13 |
| (7,84) | 1:A:69:VAL:HG21 | 1:A:198:HIS:HD2 | 3 | 0.82 | 0.23 | 0.95 |
| (7,84) | 1:A:69:VAL:HG22 | 1:A:198:HIS:HD2 | 3 | 0.82 | 0.23 | 0.95 |
| (7,84) | 1:A:69:VAL:HG23 | 1:A:198:HIS:HD2 | 3 | 0.82 | 0.23 | 0.95 |
| (1,260) | 1:A:46:PHE:HE1 | 1:A:215:THR:HG21 | 3 | 0.79 | 0.1 | 0.85 |
| (1,260) | 1:A:46:PHE:HE1 | 1:A:215:THR:HG22 | 3 | 0.79 | 0.1 | 0.85 |
| (1,260) | 1:A:46:PHE:HE1 | 1:A:215:THR:HG23 | 3 | 0.79 | 0.1 | 0.85 |
| (1,260) | 1:A:46:PHE:HE2 | 1:A:215:THR:HG21 | 3 | 0.79 | 0.1 | 0.85 |
| (1,260) | 1:A:46:PHE:HE2 | 1:A:215:THR:HG22 | 3 | 0.79 | 0.1 | 0.85 |
| (1,260) | 1:A:46:PHE:HE2 | 1:A:215:THR:HG23 | 3 | 0.79 | 0.1 | 0.85 |
| (1,1004) | 1:A:139:ALA:HA | 1:A:140:ARG:HG2 | 3 | 0.69 | 0.22 | 0.68 |
| (1,1004) | 1:A:139:ALA:HA | 1:A:140:ARG:HG3 | 3 | 0.69 | 0.22 | 0.68 |
| (2,3) | 1:A:231:ILE:HD11 | 1:A:232:LYS:HB3 | 3 | 0.58 | 0.26 | 0.72 |
| (2,3) | 1:A:231:ILE:HD12 | 1:A:232:LYS:HB3 | 3 | 0.58 | 0.26 | 0.72 |
| (2,3) | 1:A:231:ILE:HD13 | 1:A:232:LYS:HB3 | 3 | 0.58 | 0.26 | 0.72 |
| (1,615) | 1:A:97:THR:HG21 | 1:A:97:THR:H | 3 | 0.48 | 0.01 | 0.49 |
| (1,615) | 1:A:97:THR:HG22 | 1:A:97:THR:H | 3 | 0.48 | 0.01 | 0.49 |
| (1,615) | 1:A:97:THR:HG23 | 1:A:97:THR:H | 3 | 0.48 | 0.01 | 0.49 |
| (1,1291) | 1:A:198:HIS:HE1 | 1:A:204:HIS:HA | 3 | 0.43 | 0.16 | 0.48 |
| (7,18) | 1:A:24:LEU:HD21 | 1:A:72:VAL:HB | 3 | 0.42 | 0.17 | 0.51 |
| (7,18) | 1:A:24:LEU:HD22 | 1:A:72:VAL:HB | 3 | 0.42 | 0.17 | 0.51 |
| (7,18) | 1:A:24:LEU:HD23 | 1:A:72:VAL:HB | 3 | 0.42 | 0.17 | 0.51 |
| (7,73) | 1:A:58:VAL:HG11 | 1:A:62:MET:HE1 | 3 | 0.41 | 0.12 | 0.42 |
| (7,73) | 1:A:58:VAL:HG11 | 1:A:62:MET:HE2 | 3 | 0.41 | 0.12 | 0.42 |
| (7,73) | 1:A:58:VAL:HG11 | 1:A:62:MET:HE3 | 3 | 0.41 | 0.12 | 0.42 |
| (7,73) | 1:A:58:VAL:HG12 | 1:A:62:MET:HE1 | 3 | 0.41 | 0.12 | 0.42 |
| (7,73) | 1:A:58:VAL:HG12 | 1:A:62:MET:HE2 | 3 | 0.41 | 0.12 | 0.42 |
| (7,73) | 1:A:58:VAL:HG12 | 1:A:62:MET:HE3 | 3 | 0.41 | 0.12 | 0.42 |
| (7,73) | 1:A:58:VAL:HG13 | 1:A:62:MET:HE1 | 3 | 0.41 | 0.12 | 0.42 |
| (7,73) | 1:A:58:VAL:HG13 | 1:A:62:MET:HE2 | 3 | 0.41 | 0.12 | 0.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (7,73) | 1:A:58:VAL:HG13 | 1:A:62:MET:HE3 | 3 | 0.41 | 0.12 | 0.42 |
| (1,506) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:133:ASP:H | 3 | 0.39 | 0.2 | 0.42 |
| (1,13) | 1:A:11:GLN:H | 1:A:11:GLN:HE21 | 3 | 0.35 | 0.3 | 0.15 |
| (1,13) | 1:A:11:GLN:H | 1:A:11:GLN:HE22 | 3 | 0.35 | 0.3 | 0.15 |
| (3,4) | 3:A:301:CA:CA | 1:A:169:ASP:OD2 | 3 | 0.33 | 0.16 | 0.25 |
| (1,299) | 1:A:56:SER:HB2 | 1:A:58:VAL:H | 3 | 0.31 | 0.19 | 0.23 |
| (1,761) | 1:A:113:LEU:HB2 | 1:A:124:PHE:HD1 | 3 | 0.31 | 0.01 | 0.32 |
| (1,761) | 1:A:113:LEU:HB2 | 1:A:124:PHE:HD2 | 3 | 0.31 | 0.01 | 0.32 |
| (1,761) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:124:PHE:HD1 | 3 | 0.31 | 0.01 | 0.32 |
| (1,761) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:124:PHE:HD2 | 3 | 0.31 | 0.01 | 0.32 |
| (1,353) | 1:A:61:ILE:HB | 1:A:215:THR:HG21 | 3 | 0.3 | 0.01 | 0.31 |
| (1,353) | 1:A:61:ILE:HB | 1:A:215:THR:HG22 | 3 | 0.3 | 0.01 | 0.31 |
| (1,353) | 1:A:61:ILE:HB | 1:A:215:THR:HG23 | 3 | 0.3 | 0.01 | 0.31 |
| (7,24) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:39:LEU:HD11 | 3 | 0.3 | 0.06 | 0.28 |
| (7,24) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:39:LEU:HD12 | 3 | 0.3 | 0.06 | 0.28 |
| (7,24) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:39:LEU:HD13 | 3 | 0.3 | 0.06 | 0.28 |
| (7,282) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:113:LEU:HD11 | 3 | 0.3 | 0.11 | 0.23 |
| (7,282) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:113:LEU:HD12 | 3 | 0.3 | 0.11 | 0.23 |
| (7,282) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:113:LEU:HD13 | 3 | 0.3 | 0.11 | 0.23 |
| (7,282) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:113:LEU:HD11 | 3 | 0.3 | 0.11 | 0.23 |
| (7,282) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:113:LEU:HD12 | 3 | 0.3 | 0.11 | 0.23 |
| (7,282) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:113:LEU:HD13 | 3 | 0.3 | 0.11 | 0.23 |
| (7,282) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:113:LEU:HD11 | 3 | 0.3 | 0.11 | 0.23 |
| (7,282) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:113:LEU:HD12 | 3 | 0.3 | 0.11 | 0.23 |
| (7,282) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:113:LEU:HD13 | 3 | 0.3 | 0.11 | 0.23 |
| (1,1131) | 1:A:170:ALA:H | 1:A:171:HIS:HD2 | 3 | 0.29 | 0.12 | 0.37 |
| (1,170) | 1:A:40:LYS:HB2 | 1:A:41:GLU:HA | 3 | 0.26 | 0.0 | 0.26 |
| (1,170) | 1:A:40:LYS:HB3 | 1:A:41:GLU:HA | 3 | 0.26 | 0.0 | 0.26 |
| (1,395) | 1:A:68:GLY:H | 1:A:155:THR:HA | 3 | 0.25 | 0.08 | 0.29 |
| (1,32) | 1:A:15:ALA:H | 1:A:17:ASP:H | 3 | 0.23 | 0.08 | 0.2 |
| (1,129) | 1:A:34:SER:HA | 1:A:36:GLU:H | 3 | 0.22 | 0.04 | 0.24 |
| (1,549) | 1:A:92:ARG:HB2 | 1:A:131:THR:HA | 3 | 0.21 | 0.13 | 0.12 |
| (1,549) | 1:A:92:ARG:HB3 | 1:A:131:THR:HA | 3 | 0.21 | 0.13 | 0.12 |
| (7,332) | 1:A:116:TRP:HB2 | 1:A:226:LEU:HD11 | 3 | 0.2 | 0.1 | 0.14 |
| (7,332) | 1:A:116:TRP:HB2 | 1:A:226:LEU:HD12 | 3 | 0.2 | 0.1 | 0.14 |
| (7,332) | 1:A:116:TRP:HB2 | 1:A:226:LEU:HD13 | 3 | 0.2 | 0.1 | 0.14 |
| (1,326) | 1:A:59:ILE:HA | 1:A:62:MET:HE1 | 3 | 0.2 | 0.12 | 0.12 |
| (1,326) | 1:A:59:ILE:HA | 1:A:62:MET:HE2 | 3 | 0.2 | 0.12 | 0.12 |
| (1,326) | 1:A:59:ILE:HA | 1:A:62:MET:HE3 | 3 | 0.2 | 0.12 | 0.12 |
| (7,440) | 1:A:211:VAL:HG21 | 1:A:226:LEU:HD21 | 3 | 0.19 | 0.07 | 0.15 |
| (7,440) | 1:A:211:VAL:HG21 | 1:A:226:LEU:HD22 | 3 | 0.19 | 0.07 | 0.15 |
| (7,440) | 1:A:211:VAL:HG21 | 1:A:226:LEU:HD23 | 3 | 0.19 | 0.07 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (7,440) | 1:A:211:VAL:HG22 | 1:A:226:LEU:HD21 | 3 | 0.19 | 0.07 | 0.15 |
| (7,440) | 1:A:211:VAL:HG22 | 1:A:226:LEU:HD22 | 3 | 0.19 | 0.07 | 0.15 |
| (7,440) | 1:A:211:VAL:HG22 | 1:A:226:LEU:HD23 | 3 | 0.19 | 0.07 | 0.15 |
| (7,440) | 1:A:211:VAL:HG23 | 1:A:226:LEU:HD21 | 3 | 0.19 | 0.07 | 0.15 |
| (7,440) | 1:A:211:VAL:HG23 | 1:A:226:LEU:HD22 | 3 | 0.19 | 0.07 | 0.15 |
| (7,440) | 1:A:211:VAL:HG23 | 1:A:226:LEU:HD23 | 3 | 0.19 | 0.07 | 0.15 |
| (1,545) | 1:A:92:ARG:H | 1:A:136:ILE:HD11 | 3 | 0.18 | 0.04 | 0.19 |
| (1,545) | 1:A:92:ARG:H | 1:A:136:ILE:HD12 | 3 | 0.18 | 0.04 | 0.19 |
| (1,545) | 1:A:92:ARG:H | 1:A:136:ILE:HD13 | 3 | 0.18 | 0.04 | 0.19 |
| (1,769) | 1:A:114:ASN:HA | 1:A:118:LYS:H | 3 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (1,970) | 1:A:136:ILE:H | 1:A:137:GLY:H | 3 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1482) | 1:A:237:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HD1 | 3 | 0.16 | 0.03 | 0.14 |
| (1,1482) | 1:A:237:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HD2 | 3 | 0.16 | 0.03 | 0.14 |
| (1,267) | 1:A:48:LEU:HB2 | 1:A:58:VAL:HA | 3 | 0.14 | 0.02 | 0.15 |
| (1,267) | 1:A:48:LEU:HB3 | 1:A:58:VAL:HA | 3 | 0.14 | 0.02 | 0.15 |
| (1,107) | 1:A:25:TYR:HA | 1:A:25:TYR:HE1 | 3 | 0.13 | 0.02 | 0.11 |
| (1,107) | 1:A:25:TYR:HA | 1:A:25:TYR:HE2 | 3 | 0.13 | 0.02 | 0.11 |
| (1,1035) | 1:A:149:PHE:HB2 | 1:A:150:ASP:H | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1345) | 1:A:209:ASN:H | 1:A:210:ALA:HB1 | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1345) | 1:A:209:ASN:H | 1:A:210:ALA:HB2 | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1345) | 1:A:209:ASN:H | 1:A:210:ALA:HB3 | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (7,2) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:54:LEU:HD21 | 2 | 0.45 | 0.26 | 0.45 |
| (7,2) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:54:LEU:HD22 | 2 | 0.45 | 0.26 | 0.45 |
| (7,2) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:54:LEU:HD23 | 2 | 0.45 | 0.26 | 0.45 |
| (1,1039) | 1:A:150:ASP:HB2 | 1:A:155:THR:HG21 | 2 | 0.44 | 0.09 | 0.44 |
| (1,1039) | 1:A:150:ASP:HB2 | 1:A:155:THR:HG22 | 2 | 0.44 | 0.09 | 0.44 |
| (1,1039) | 1:A:150:ASP:HB2 | 1:A:155:THR:HG23 | 2 | 0.44 | 0.09 | 0.44 |
| (1,1039) | 1:A:150:ASP:HB3 | 1:A:155:THR:HG21 | 2 | 0.44 | 0.09 | 0.44 |
| (1,1039) | 1:A:150:ASP:HB3 | 1:A:155:THR:HG22 | 2 | 0.44 | 0.09 | 0.44 |
| (1,1039) | 1:A:150:ASP:HB3 | 1:A:155:THR:HG23 | 2 | 0.44 | 0.09 | 0.44 |
| (6,3) | 1:A:84:TRP:O | 1:A:238:TYR:HH | 2 | 0.43 | 0.24 | 0.43 |
| (1,1084) | 1:A:158:HIS:HD2 | 1:A:171:HIS:H | 2 | 0.41 | 0.12 | 0.41 |
| (1,449) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:202:MET:HE1 | 2 | 0.4 | 0.07 | 0.4 |
| (1,449) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:202:MET:HE2 | 2 | 0.4 | 0.07 | 0.4 |
| (1,449) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:202:MET:HE3 | 2 | 0.4 | 0.07 | 0.4 |
| (1,449) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:202:MET:HE1 | 2 | 0.4 | 0.07 | 0.4 |
| (1,449) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:202:MET:HE2 | 2 | 0.4 | 0.07 | 0.4 |
| (1,449) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:202:MET:HE3 | 2 | 0.4 | 0.07 | 0.4 |
| (1,375) | 1:A:66:ARG:H | 1:A:22:PHE:HZ | 2 | 0.39 | 0.09 | 0.39 |
| (1,301) | 1:A:56:SER:HB3 | 1:A:58:VAL:H | 2 | 0.3 | 0.05 | 0.3 |
| (1,160) | 1:A:39:LEU:H | 1:A:40:LYS:HB2 | 2 | 0.29 | 0.01 | 0.29 |
| (1,160) | 1:A:39:LEU:H | 1:A:40:LYS:HB3 | 2 | 0.29 | 0.01 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,454) | 1:A:83:LYS:HE2 | 1:A:202:MET:HE1 | 2 | 0.28 | 0.04 | 0.28 |
| (1,454) | 1:A:83:LYS:HE2 | 1:A:202:MET:HE2 | 2 | 0.28 | 0.04 | 0.28 |
| (1,454) | 1:A:83:LYS:HE2 | 1:A:202:MET:HE3 | 2 | 0.28 | 0.04 | 0.28 |
| (1,454) | 1:A:83:LYS:HE3 | 1:A:202:MET:HE1 | 2 | 0.28 | 0.04 | 0.28 |
| (1,454) | 1:A:83:LYS:HE3 | 1:A:202:MET:HE2 | 2 | 0.28 | 0.04 | 0.28 |
| (1,454) | 1:A:83:LYS:HE3 | 1:A:202:MET:HE3 | 2 | 0.28 | 0.04 | 0.28 |
| (7,353) | 1:A:122:LEU:HD21 | 1:A:238:TYR:HD1 | 2 | 0.28 | 0.1 | 0.28 |
| (7,353) | 1:A:122:LEU:HD21 | 1:A:238:TYR:HD2 | 2 | 0.28 | 0.1 | 0.28 |
| (7,353) | 1:A:122:LEU:HD22 | 1:A:238:TYR:HD1 | 2 | 0.28 | 0.1 | 0.28 |
| (7,353) | 1:A:122:LEU:HD22 | 1:A:238:TYR:HD2 | 2 | 0.28 | 0.1 | 0.28 |
| (7,353) | 1:A:122:LEU:HD23 | 1:A:238:TYR:HD1 | 2 | 0.28 | 0.1 | 0.28 |
| (7,353) | 1:A:122:LEU:HD23 | 1:A:238:TYR:HD2 | 2 | 0.28 | 0.1 | 0.28 |
| (1,1389) | 1:A:224:PHE:HE1 | 1:A:225:LYS:H | 2 | 0.27 | 0.0 | 0.27 |
| (1,1389) | 1:A:224:PHE:HE2 | 1:A:225:LYS:H | 2 | 0.27 | 0.0 | 0.27 |
| (7,3) | 1:A:12:TRP:HH2 | 1:A:39:LEU:HD11 | 2 | 0.27 | 0.08 | 0.27 |
| (7,3) | 1:A:12:TRP:HH2 | 1:A:39:LEU:HD12 | 2 | 0.27 | 0.08 | 0.27 |
| (7,3) | 1:A:12:TRP:HH2 | 1:A:39:LEU:HD13 | 2 | 0.27 | 0.08 | 0.27 |
| (1,376) | 1:A:66:ARG:H | 1:A:66:ARG:HE | 2 | 0.26 | 0.14 | 0.26 |
| (1,996) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:178:TRP:HE1 | 2 | 0.26 | 0.06 | 0.26 |
| (1,996) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:178:TRP:HE1 | 2 | 0.26 | 0.06 | 0.26 |
| (1,1289) | 1:A:198:HIS:H | 1:A:202:MET:HB2 | 2 | 0.26 | 0.01 | 0.26 |
| (1,1289) | 1:A:198:HIS:H | 1:A:202:MET:HB3 | 2 | 0.26 | 0.01 | 0.26 |
| (7,205) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HE1 | 2 | 0.23 | 0.07 | 0.23 |
| (7,205) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HE2 | 2 | 0.23 | 0.07 | 0.23 |
| (7,205) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HE3 | 2 | 0.23 | 0.07 | 0.23 |
| (7,205) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HE1 | 2 | 0.23 | 0.07 | 0.23 |
| (7,205) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HE2 | 2 | 0.23 | 0.07 | 0.23 |
| (7,205) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HE3 | 2 | 0.23 | 0.07 | 0.23 |
| (7,205) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HE1 | 2 | 0.23 | 0.07 | 0.23 |
| (7,205) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HE2 | 2 | 0.23 | 0.07 | 0.23 |
| (7,205) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HE3 | 2 | 0.23 | 0.07 | 0.23 |
| (1,603) | 1:A:95:SER:HB2 | 1:A:138:PHE:HD1 | 2 | 0.22 | 0.08 | 0.22 |
| (1,603) | 1:A:95:SER:HB2 | 1:A:138:PHE:HD2 | 2 | 0.22 | 0.08 | 0.22 |
| (1,603) | 1:A:95:SER:HB3 | 1:A:138:PHE:HD1 | 2 | 0.22 | 0.08 | 0.22 |
| (1,603) | 1:A:95:SER:HB3 | 1:A:138:PHE:HD2 | 2 | 0.22 | 0.08 | 0.22 |
| (1,47) | 1:A:16:GLN:HG2 | 1:A:17:ASP:H | 2 | 0.22 | 0.03 | 0.22 |
| (1,47) | 1:A:16:GLN:HG3 | 1:A:17:ASP:H | 2 | 0.22 | 0.03 | 0.22 |
| (7,19) | 1:A:24:LEU:HD21 | 1:A:70:PRO:HG2 | 2 | 0.22 | 0.09 | 0.22 |
| (7,19) | 1:A:24:LEU:HD21 | 1:A:70:PRO:HG3 | 2 | 0.22 | 0.09 | 0.22 |
| (7,19) | 1:A:24:LEU:HD22 | 1:A:70:PRO:HG2 | 2 | 0.22 | 0.09 | 0.22 |
| (7,19) | 1:A:24:LEU:HD22 | 1:A:70:PRO:HG3 | 2 | 0.22 | 0.09 | 0.22 |
| (7,19) | 1:A:24:LEU:HD23 | 1:A:70:PRO:HG2 | 2 | 0.22 | 0.09 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (7,19) | 1:A:24:LEU:HD23 | 1:A:70:PRO:HG3 | 2 | 0.22 | 0.09 | 0.22 |
| (1,205) | 1:A:42:MET:HG3 | 1:A:46:PHE:HD1 | 2 | 0.22 | 0.04 | 0.22 |
| (1,205) | 1:A:42:MET:HG3 | 1:A:46:PHE:HD2 | 2 | 0.22 | 0.04 | 0.22 |
| (1,1027) | 1:A:147:TYR:H | 1:A:147:TYR:HD1 | 2 | 0.22 | 0.01 | 0.22 |
| (1,1027) | 1:A:147:TYR:H | 1:A:147:TYR:HD2 | 2 | 0.22 | 0.01 | 0.22 |
| (1,296) | 1:A:56:SER:H | 1:A:58:VAL:HB | 2 | 0.21 | 0.01 | 0.21 |
| (1,333) | 1:A:59:ILE:HG21 | 1:A:63:GLN:HE21 | 2 | 0.21 | 0.07 | 0.21 |
| (1,333) | 1:A:59:ILE:HG21 | 1:A:63:GLN:HE22 | 2 | 0.21 | 0.07 | 0.21 |
| (1,333) | 1:A:59:ILE:HG22 | 1:A:63:GLN:HE21 | 2 | 0.21 | 0.07 | 0.21 |
| (1,333) | 1:A:59:ILE:HG22 | 1:A:63:GLN:HE22 | 2 | 0.21 | 0.07 | 0.21 |
| (1,333) | 1:A:59:ILE:HG23 | 1:A:63:GLN:HE21 | 2 | 0.21 | 0.07 | 0.21 |
| (1,333) | 1:A:59:ILE:HG23 | 1:A:63:GLN:HE22 | 2 | 0.21 | 0.07 | 0.21 |
| (1,106) | 1:A:25:TYR:H | 1:A:26:ASP:H | 2 | 0.2 | 0.03 | 0.2 |
| (1,1064) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:178:TRP:HZ3 | 2 | 0.2 | 0.08 | 0.2 |
| (1,309) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:58:VAL:H | 2 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (1,309) | 1:A:57:ARG:HG3 | 1:A:58:VAL:H | 2 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (1,1477) | 1:A:237:LEU:H | 1:A:238:TYR:HD1 | 2 | 0.2 | 0.01 | 0.2 |
| (1,1477) | 1:A:237:LEU:H | 1:A:238:TYR:HD2 | 2 | 0.2 | 0.01 | 0.2 |
| (1,564) | 1:A:92:ARG:HD2 | 1:A:132:ALA:HB1 | 2 | 0.2 | 0.08 | 0.2 |
| (1,564) | 1:A:92:ARG:HD2 | 1:A:132:ALA:HB2 | 2 | 0.2 | 0.08 | 0.2 |
| (1,564) | 1:A:92:ARG:HD2 | 1:A:132:ALA:HB3 | 2 | 0.2 | 0.08 | 0.2 |
| (1,887) | 1:A:124:PHE:H | 1:A:124:PHE:HD1 | 2 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (1,887) | 1:A:124:PHE:H | 1:A:124:PHE:HD2 | 2 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (7,441) | 1:A:211:VAL:HG21 | 1:A:227:SER:H | 2 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (7,441) | 1:A:211:VAL:HG22 | 1:A:227:SER:H | 2 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (7,441) | 1:A:211:VAL:HG23 | 1:A:227:SER:H | 2 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (7,334) | 1:A:116:TRP:HB3 | 1:A:226:LEU:HD11 | 2 | 0.18 | 0.07 | 0.18 |
| (7,334) | 1:A:116:TRP:HB3 | 1:A:226:LEU:HD12 | 2 | 0.18 | 0.07 | 0.18 |
| (7,334) | 1:A:116:TRP:HB3 | 1:A:226:LEU:HD13 | 2 | 0.18 | 0.07 | 0.18 |
| (1,35) | 1:A:15:ALA:HA | 1:A:19:LEU:H | 2 | 0.18 | 0.03 | 0.18 |
| (1,633) | 1:A:98:ARG:HA | 1:A:100:LEU:H | 2 | 0.18 | 0.03 | 0.18 |
| (1,1396) | 1:A:227:SER:H | 1:A:231:ILE:H | 2 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (7,117) | 1:A:88:VAL:H | 1:A:89:VAL:HG21 | 2 | 0.18 | 0.0 | 0.18 |
| (7,117) | 1:A:88:VAL:H | 1:A:89:VAL:HG22 | 2 | 0.18 | 0.0 | 0.18 |
| (7,117) | 1:A:88:VAL:H | 1:A:89:VAL:HG23 | 2 | 0.18 | 0.0 | 0.18 |
| (1,123) | 1:A:29:THR:HG21 | 1:A:38:LYS:H | 2 | 0.17 | 0.06 | 0.17 |
| (1,123) | 1:A:29:THR:HG22 | 1:A:38:LYS:H | 2 | 0.17 | 0.06 | 0.17 |
| (1,123) | 1:A:29:THR:HG23 | 1:A:38:LYS:H | 2 | 0.17 | 0.06 | 0.17 |
| (1,544) | 1:A:92:ARG:H | 1:A:136:ILE:H | 2 | 0.17 | 0.04 | 0.17 |
| (4,4) | 3:A:301:CA:CA | 1:A:169:ASP:OD2 | 2 | 0.17 | 0.05 | 0.17 |
| (1,315) | 1:A:58:VAL:HA | 1:A:61:ILE:HB | 2 | 0.16 | 0.01 | 0.16 |
| (1,97) | 1:A:23:TYR:HB2 | 1:A:24:LEU:H | 2 | 0.16 | 0.01 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

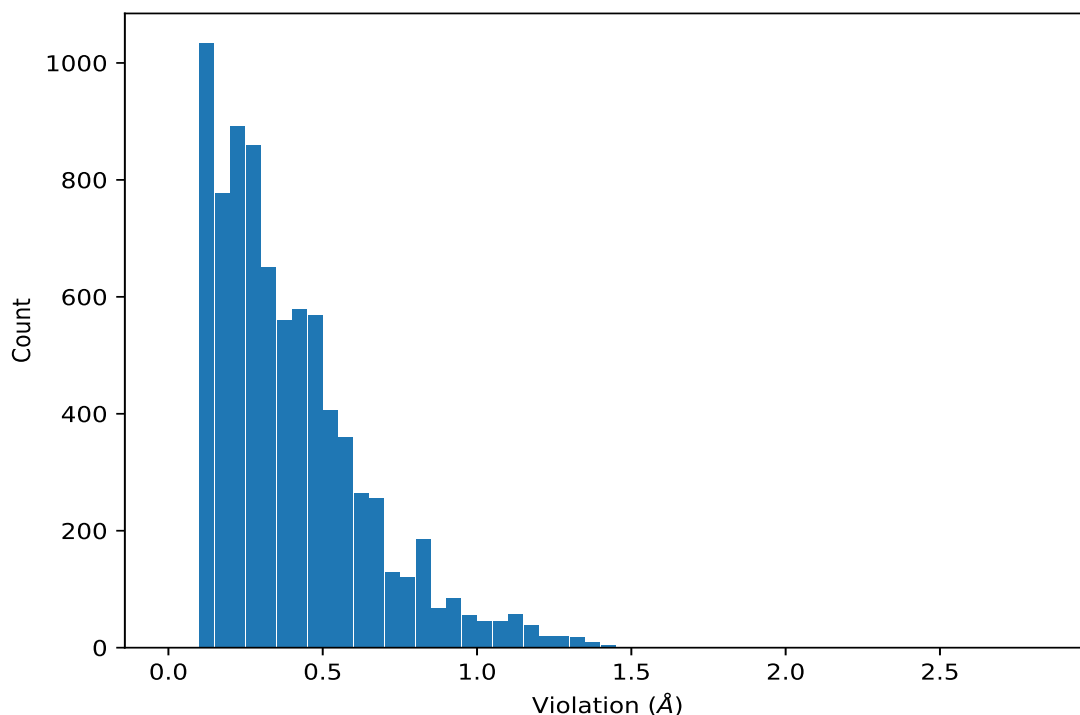
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|---------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,97) | 1:A:23:TYR:HB3 | 1:A:24:LEU:H | 2 | 0.16 | 0.01 | 0.16 |
| (1,473) | 1:A:85:THR:HA | 1:A:86:SER:H | 2 | 0.16 | 0.01 | 0.16 |
| (1,499) | 1:A:90:THR:H | 1:A:134:ILE:H | 2 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (1,246) | 1:A:46:PHE:H | 1:A:214:PRO:HG2 | 2 | 0.15 | 0.01 | 0.15 |
| (1,246) | 1:A:46:PHE:H | 1:A:214:PRO:HG3 | 2 | 0.15 | 0.01 | 0.15 |
| (7,239) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG11 | 2 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (7,239) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG12 | 2 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (7,239) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG13 | 2 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,91) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:19:LEU:HD21 | 2 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (1,91) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:19:LEU:HD22 | 2 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (1,91) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:19:LEU:HD23 | 2 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (1,577) | 1:A:93:ILE:HB | 1:A:94:VAL:H | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,288) | 1:A:52:GLY:H | 1:A:53:MET:HG2 | 2 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,288) | 1:A:52:GLY:H | 1:A:53:MET:HG3 | 2 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,437) | 1:A:79:PRO:HD2 | 1:A:163:GLY:HA2 | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,437) | 1:A:79:PRO:HD2 | 1:A:163:GLY:HA3 | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,437) | 1:A:79:PRO:HD3 | 1:A:163:GLY:HA2 | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,437) | 1:A:79:PRO:HD3 | 1:A:163:GLY:HA3 | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,1) | 1:A:134:ILE:HD11 | 1:A:170:ALA:H | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,1) | 1:A:134:ILE:HD12 | 1:A:170:ALA:H | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,1) | 1:A:134:ILE:HD13 | 1:A:170:ALA:H | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (7,291) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:113:LEU:H | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (7,291) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:113:LEU:H | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (7,291) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:113:LEU:H | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |

¹Number of violated models, ²Standard deviation

9.5 All violated distance restraints [i](#)

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

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



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

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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (4,23) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:194:HIS:NE2 | 6 | 2.82 |
| (4,24) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:194:HIS:CG | 6 | 2.39 |
| (5,2) | 1:A:66:ARG:NH2 | 1:A:71:ASP:OD1 | 16 | 1.44 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:186:ILE:H | 10 | 1.42 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:186:ILE:H | 10 | 1.42 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:186:ILE:H | 10 | 1.42 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:186:ILE:H | 11 | 1.39 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:186:ILE:H | 11 | 1.39 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:186:ILE:H | 11 | 1.39 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:HE2 | 4 | 1.36 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:HE3 | 4 | 1.36 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:HE2 | 4 | 1.36 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:HE3 | 4 | 1.36 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:HE2 | 4 | 1.36 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:HE3 | 4 | 1.36 |
| (4,12) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:158:HIS:NE2 | 6 | 1.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:186:ILE:H | 2 | 1.33 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:186:ILE:H | 2 | 1.33 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:186:ILE:H | 2 | 1.33 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD11 | 4 | 1.33 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD12 | 4 | 1.33 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD13 | 4 | 1.33 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:186:ILE:H | 12 | 1.31 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:186:ILE:H | 12 | 1.31 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:186:ILE:H | 12 | 1.31 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:186:ILE:H | 1 | 1.3 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:186:ILE:H | 1 | 1.3 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:186:ILE:H | 1 | 1.3 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:HE2 | 11 | 1.3 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:HE3 | 11 | 1.3 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:HE2 | 11 | 1.3 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:HE3 | 11 | 1.3 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:HE2 | 11 | 1.3 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:HE3 | 11 | 1.3 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:HE2 | 6 | 1.29 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:HE3 | 6 | 1.29 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:HE2 | 6 | 1.29 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:HE3 | 6 | 1.29 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:HE2 | 6 | 1.29 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:HE3 | 6 | 1.29 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:186:ILE:H | 7 | 1.28 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:186:ILE:H | 7 | 1.28 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:186:ILE:H | 7 | 1.28 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:186:ILE:H | 8 | 1.26 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:186:ILE:H | 8 | 1.26 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:186:ILE:H | 8 | 1.26 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:186:ILE:H | 14 | 1.26 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:186:ILE:H | 14 | 1.26 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:186:ILE:H | 14 | 1.26 |
| (5,1) | 1:A:66:ARG:NH1 | 1:A:71:ASP:OD2 | 16 | 1.26 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD11 | 15 | 1.25 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD12 | 15 | 1.25 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD13 | 15 | 1.25 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:186:ILE:H | 15 | 1.24 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:186:ILE:H | 15 | 1.24 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:186:ILE:H | 15 | 1.24 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:HE2 | 5 | 1.24 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:HE3 | 5 | 1.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:HE2 | 5 | 1.24 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:HE3 | 5 | 1.24 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:HE2 | 5 | 1.24 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:HE3 | 5 | 1.24 |
| (1,99) | 1:A:23:TYR:HB2 | 1:A:72:VAL:H | 13 | 1.24 |
| (1,99) | 1:A:23:TYR:HB3 | 1:A:72:VAL:H | 13 | 1.24 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD11 | 6 | 1.22 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD12 | 6 | 1.22 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD13 | 6 | 1.22 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:186:ILE:H | 4 | 1.21 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:186:ILE:H | 4 | 1.21 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:186:ILE:H | 4 | 1.21 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:186:ILE:H | 9 | 1.21 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:186:ILE:H | 9 | 1.21 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:186:ILE:H | 9 | 1.21 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:HE2 | 15 | 1.2 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:HE3 | 15 | 1.2 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:HE2 | 15 | 1.2 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:HE3 | 15 | 1.2 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:HE2 | 15 | 1.2 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:HE3 | 15 | 1.2 |
| (7,256) | 1:A:107:ARG:HG2 | 1:A:108:LEU:HD21 | 4 | 1.2 |
| (7,256) | 1:A:107:ARG:HG2 | 1:A:108:LEU:HD22 | 4 | 1.2 |
| (7,256) | 1:A:107:ARG:HG2 | 1:A:108:LEU:HD23 | 4 | 1.2 |
| (1,452) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:237:LEU:HG | 12 | 1.19 |
| (1,452) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:237:LEU:HG | 12 | 1.19 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD11 | 11 | 1.18 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD12 | 11 | 1.18 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD13 | 11 | 1.18 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:HE2 | 7 | 1.18 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:HE3 | 7 | 1.18 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:HE2 | 7 | 1.18 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:HE3 | 7 | 1.18 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:HE2 | 7 | 1.18 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:HE3 | 7 | 1.18 |
| (7,256) | 1:A:107:ARG:HG2 | 1:A:108:LEU:HD21 | 15 | 1.18 |
| (7,256) | 1:A:107:ARG:HG2 | 1:A:108:LEU:HD22 | 15 | 1.18 |
| (7,256) | 1:A:107:ARG:HG2 | 1:A:108:LEU:HD23 | 15 | 1.18 |
| (1,1066) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HG13 | 7 | 1.18 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:HE2 | 3 | 1.17 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:HE3 | 3 | 1.17 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:HE2 | 3 | 1.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:HE3 | 3 | 1.17 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:HE2 | 3 | 1.17 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:HE3 | 3 | 1.17 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:186:ILE:H | 6 | 1.16 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:186:ILE:H | 6 | 1.16 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:186:ILE:H | 6 | 1.16 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:HE2 | 1 | 1.16 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:HE3 | 1 | 1.16 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:HE2 | 1 | 1.16 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:HE3 | 1 | 1.16 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:HE2 | 1 | 1.16 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:HE3 | 1 | 1.16 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:56:SER:H | 6 | 1.15 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:56:SER:H | 6 | 1.15 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:56:SER:H | 6 | 1.15 |
| (1,336) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:MET:HG2 | 2 | 1.15 |
| (1,336) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:MET:HG3 | 2 | 1.15 |
| (1,336) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:MET:HG2 | 3 | 1.15 |
| (1,336) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:MET:HG3 | 3 | 1.15 |
| (1,1066) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HG13 | 12 | 1.15 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG11 | 1:A:160:PHE:HE1 | 12 | 1.14 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG11 | 1:A:160:PHE:HE2 | 12 | 1.14 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG12 | 1:A:160:PHE:HE1 | 12 | 1.14 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG12 | 1:A:160:PHE:HE2 | 12 | 1.14 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG13 | 1:A:160:PHE:HE1 | 12 | 1.14 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG13 | 1:A:160:PHE:HE2 | 12 | 1.14 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:HE2 | 10 | 1.14 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:HE3 | 10 | 1.14 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:HE2 | 10 | 1.14 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:HE3 | 10 | 1.14 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:HE2 | 10 | 1.14 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:HE3 | 10 | 1.14 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:HE2 | 14 | 1.13 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:HE3 | 14 | 1.13 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:HE2 | 14 | 1.13 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:HE3 | 14 | 1.13 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:HE2 | 14 | 1.13 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:HE3 | 14 | 1.13 |
| (1,336) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:MET:HG2 | 11 | 1.13 |
| (1,336) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:MET:HG3 | 11 | 1.13 |
| (1,1398) | 1:A:228:GLN:H | 1:A:230:ASP:HB2 | 8 | 1.13 |
| (1,1398) | 1:A:228:GLN:H | 1:A:230:ASP:HB3 | 8 | 1.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1066) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HG13 | 10 | 1.13 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:186:ILE:H | 13 | 1.12 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:186:ILE:H | 13 | 1.12 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:186:ILE:H | 13 | 1.12 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD11 | 10 | 1.12 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD12 | 10 | 1.12 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD13 | 10 | 1.12 |
| (1,909) | 1:A:127:VAL:HA | 1:A:129:TRP:HD1 | 9 | 1.12 |
| (1,1066) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HG13 | 2 | 1.12 |
| (1,712) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:188:PHE:HD1 | 10 | 1.11 |
| (1,712) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:188:PHE:HD2 | 10 | 1.11 |
| (1,561) | 1:A:92:ARG:HD2 | 1:A:132:ALA:H | 15 | 1.11 |
| (1,561) | 1:A:92:ARG:HD3 | 1:A:132:ALA:H | 15 | 1.11 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:HE2 | 12 | 1.1 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:HE3 | 12 | 1.1 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:HE2 | 12 | 1.1 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:HE3 | 12 | 1.1 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:HE2 | 12 | 1.1 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:HE3 | 12 | 1.1 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:HE2 | 13 | 1.1 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:HE3 | 13 | 1.1 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:HE2 | 13 | 1.1 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:HE3 | 13 | 1.1 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:HE2 | 13 | 1.1 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:HE3 | 13 | 1.1 |
| (1,99) | 1:A:23:TYR:HB2 | 1:A:72:VAL:H | 5 | 1.1 |
| (1,99) | 1:A:23:TYR:HB3 | 1:A:72:VAL:H | 5 | 1.1 |
| (1,1398) | 1:A:228:GLN:H | 1:A:230:ASP:HB2 | 10 | 1.09 |
| (1,1398) | 1:A:228:GLN:H | 1:A:230:ASP:HB3 | 10 | 1.09 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:186:ILE:H | 3 | 1.08 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:186:ILE:H | 3 | 1.08 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:186:ILE:H | 3 | 1.08 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD11 | 3 | 1.08 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD12 | 3 | 1.08 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD13 | 3 | 1.08 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:HE2 | 2 | 1.08 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:HE3 | 2 | 1.08 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:HE2 | 2 | 1.08 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:HE3 | 2 | 1.08 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:HE2 | 2 | 1.08 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:HE3 | 2 | 1.08 |
| (1,712) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:188:PHE:HD1 | 5 | 1.08 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,712) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:188:PHE:HD2 | 5 | 1.08 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD1 | 11 | 1.07 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD2 | 11 | 1.07 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD1 | 11 | 1.07 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD2 | 11 | 1.07 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD1 | 11 | 1.07 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD2 | 11 | 1.07 |
| (1,452) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:237:LEU:HG | 6 | 1.07 |
| (1,452) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:237:LEU:HG | 6 | 1.07 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD11 | 8 | 1.06 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD12 | 8 | 1.06 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD13 | 8 | 1.06 |
| (1,452) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:237:LEU:HG | 13 | 1.06 |
| (1,452) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:237:LEU:HG | 13 | 1.06 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:56:SER:H | 11 | 1.05 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:56:SER:H | 11 | 1.05 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:56:SER:H | 11 | 1.05 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:HE2 | 9 | 1.05 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:HE3 | 9 | 1.05 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:HE2 | 9 | 1.05 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:HE3 | 9 | 1.05 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:HE2 | 9 | 1.05 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:HE3 | 9 | 1.05 |
| (4,21) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:198:HIS:NE2 | 6 | 1.05 |
| (1,909) | 1:A:127:VAL:HA | 1:A:129:TRP:HD1 | 4 | 1.05 |
| (1,1398) | 1:A:228:GLN:H | 1:A:230:ASP:HB2 | 15 | 1.05 |
| (1,1398) | 1:A:228:GLN:H | 1:A:230:ASP:HB3 | 15 | 1.05 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD11 | 6 | 1.05 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD12 | 6 | 1.05 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD13 | 6 | 1.05 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:186:ILE:H | 5 | 1.04 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:186:ILE:H | 5 | 1.04 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:186:ILE:H | 5 | 1.04 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD11 | 13 | 1.04 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD12 | 13 | 1.04 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD13 | 13 | 1.04 |
| (4,14) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:171:HIS:ND1 | 6 | 1.04 |
| (1,1331) | 1:A:205:SER:H | 1:A:213:TYR:H | 15 | 1.03 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD11 | 2 | 1.02 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD12 | 2 | 1.02 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD13 | 2 | 1.02 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD11 | 12 | 1.02 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD12 | 12 | 1.02 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD13 | 12 | 1.02 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD11 | 16 | 1.02 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD12 | 16 | 1.02 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD13 | 16 | 1.02 |
| (7,256) | 1:A:107:ARG:HG2 | 1:A:108:LEU:HD21 | 1 | 1.02 |
| (7,256) | 1:A:107:ARG:HG2 | 1:A:108:LEU:HD22 | 1 | 1.02 |
| (7,256) | 1:A:107:ARG:HG2 | 1:A:108:LEU:HD23 | 1 | 1.02 |
| (7,256) | 1:A:107:ARG:HG2 | 1:A:108:LEU:HD21 | 8 | 1.02 |
| (7,256) | 1:A:107:ARG:HG2 | 1:A:108:LEU:HD22 | 8 | 1.02 |
| (7,256) | 1:A:107:ARG:HG2 | 1:A:108:LEU:HD23 | 8 | 1.02 |
| (1,244) | 1:A:46:PHE:H | 1:A:48:LEU:H | 9 | 1.02 |
| (1,1066) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HG13 | 8 | 1.02 |
| (7,84) | 1:A:69:VAL:HG21 | 1:A:198:HIS:HD2 | 11 | 1.01 |
| (7,84) | 1:A:69:VAL:HG22 | 1:A:198:HIS:HD2 | 11 | 1.01 |
| (7,84) | 1:A:69:VAL:HG23 | 1:A:198:HIS:HD2 | 11 | 1.01 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD1 | 10 | 1.01 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD2 | 10 | 1.01 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD1 | 10 | 1.01 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD2 | 10 | 1.01 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD1 | 10 | 1.01 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD2 | 10 | 1.01 |
| (7,256) | 1:A:107:ARG:HG2 | 1:A:108:LEU:HD21 | 2 | 1.01 |
| (7,256) | 1:A:107:ARG:HG2 | 1:A:108:LEU:HD22 | 2 | 1.01 |
| (7,256) | 1:A:107:ARG:HG2 | 1:A:108:LEU:HD23 | 2 | 1.01 |
| (1,336) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:MET:HG2 | 8 | 1.01 |
| (1,336) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:MET:HG3 | 8 | 1.01 |
| (1,166) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:41:GLU:HG2 | 13 | 1.01 |
| (1,452) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:237:LEU:HG | 14 | 1.0 |
| (1,452) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:237:LEU:HG | 14 | 1.0 |
| (1,1398) | 1:A:228:GLN:H | 1:A:230:ASP:HB2 | 7 | 1.0 |
| (1,1398) | 1:A:228:GLN:H | 1:A:230:ASP:HB3 | 7 | 1.0 |
| (1,1398) | 1:A:228:GLN:H | 1:A:230:ASP:HB2 | 14 | 1.0 |
| (1,1398) | 1:A:228:GLN:H | 1:A:230:ASP:HB3 | 14 | 1.0 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG11 | 1:A:160:PHE:HE1 | 7 | 0.99 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG11 | 1:A:160:PHE:HE2 | 7 | 0.99 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG12 | 1:A:160:PHE:HE1 | 7 | 0.99 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG12 | 1:A:160:PHE:HE2 | 7 | 0.99 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG13 | 1:A:160:PHE:HE1 | 7 | 0.99 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG13 | 1:A:160:PHE:HE2 | 7 | 0.99 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD1 | 13 | 0.99 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD2 | 13 | 0.99 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD1 | 13 | 0.99 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD2 | 13 | 0.99 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD1 | 13 | 0.99 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD2 | 13 | 0.99 |
| (1,909) | 1:A:127:VAL:HA | 1:A:129:TRP:HD1 | 6 | 0.99 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:186:ILE:H | 16 | 0.98 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:186:ILE:H | 16 | 0.98 |
| (7,401) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:186:ILE:H | 16 | 0.98 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD11 | 9 | 0.98 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD12 | 9 | 0.98 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD13 | 9 | 0.98 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:HE2 | 8 | 0.98 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:HE3 | 8 | 0.98 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:HE2 | 8 | 0.98 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:HE3 | 8 | 0.98 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:HE2 | 8 | 0.98 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:HE3 | 8 | 0.98 |
| (1,1331) | 1:A:205:SER:H | 1:A:213:TYR:H | 9 | 0.98 |
| (1,1066) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HG13 | 1 | 0.98 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD1 | 3 | 0.97 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD2 | 3 | 0.97 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD1 | 3 | 0.97 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD2 | 3 | 0.97 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD1 | 3 | 0.97 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD2 | 3 | 0.97 |
| (1,766) | 1:A:114:ASN:H | 1:A:115:MET:HB2 | 3 | 0.97 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:56:SER:H | 8 | 0.96 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:56:SER:H | 8 | 0.96 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:56:SER:H | 8 | 0.96 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:56:SER:H | 10 | 0.96 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:56:SER:H | 10 | 0.96 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:56:SER:H | 10 | 0.96 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD11 | 1 | 0.96 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD12 | 1 | 0.96 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD13 | 1 | 0.96 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD1 | 6 | 0.96 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD2 | 6 | 0.96 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD1 | 6 | 0.96 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD2 | 6 | 0.96 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD1 | 6 | 0.96 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD2 | 6 | 0.96 |
| (1,1398) | 1:A:228:GLN:H | 1:A:230:ASP:HB2 | 2 | 0.96 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1398) | 1:A:228:GLN:H | 1:A:230:ASP:HB3 | 2 | 0.96 |
| (1,1398) | 1:A:228:GLN:H | 1:A:230:ASP:HB2 | 9 | 0.96 |
| (1,1398) | 1:A:228:GLN:H | 1:A:230:ASP:HB3 | 9 | 0.96 |
| (1,1004) | 1:A:139:ALA:HA | 1:A:140:ARG:HG2 | 16 | 0.96 |
| (1,1004) | 1:A:139:ALA:HA | 1:A:140:ARG:HG3 | 16 | 0.96 |
| (7,84) | 1:A:69:VAL:HG21 | 1:A:198:HIS:HD2 | 15 | 0.95 |
| (7,84) | 1:A:69:VAL:HG22 | 1:A:198:HIS:HD2 | 15 | 0.95 |
| (7,84) | 1:A:69:VAL:HG23 | 1:A:198:HIS:HD2 | 15 | 0.95 |
| (1,99) | 1:A:23:TYR:HB2 | 1:A:72:VAL:H | 15 | 0.95 |
| (1,99) | 1:A:23:TYR:HB3 | 1:A:72:VAL:H | 15 | 0.95 |
| (1,909) | 1:A:127:VAL:HA | 1:A:129:TRP:HD1 | 2 | 0.95 |
| (1,909) | 1:A:127:VAL:HA | 1:A:129:TRP:HD1 | 12 | 0.95 |
| (1,1066) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HG13 | 4 | 0.95 |
| (1,1066) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HG13 | 15 | 0.95 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG11 | 1:A:160:PHE:HE1 | 9 | 0.94 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG11 | 1:A:160:PHE:HE2 | 9 | 0.94 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG12 | 1:A:160:PHE:HE1 | 9 | 0.94 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG12 | 1:A:160:PHE:HE2 | 9 | 0.94 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG13 | 1:A:160:PHE:HE1 | 9 | 0.94 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG13 | 1:A:160:PHE:HE2 | 9 | 0.94 |
| (1,909) | 1:A:127:VAL:HA | 1:A:129:TRP:HD1 | 5 | 0.94 |
| (1,785) | 1:A:116:TRP:H | 1:A:118:LYS:H | 13 | 0.94 |
| (1,712) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:188:PHE:HD1 | 4 | 0.94 |
| (1,712) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:188:PHE:HD2 | 4 | 0.94 |
| (1,712) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:188:PHE:HD1 | 15 | 0.94 |
| (1,712) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:188:PHE:HD2 | 15 | 0.94 |
| (1,1066) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HG13 | 11 | 0.94 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG2 | 6 | 0.93 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG3 | 6 | 0.93 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG2 | 6 | 0.93 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG3 | 6 | 0.93 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG2 | 6 | 0.93 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG3 | 6 | 0.93 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG2 | 12 | 0.93 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG3 | 12 | 0.93 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG2 | 12 | 0.93 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG3 | 12 | 0.93 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG2 | 12 | 0.93 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG3 | 12 | 0.93 |
| (6,2) | 1:A:90:THR:HG1 | 1:A:133:ASP:OD2 | 6 | 0.93 |
| (1,336) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:MET:HG2 | 5 | 0.93 |
| (1,336) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:MET:HG3 | 5 | 0.93 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1398) | 1:A:228:GLN:H | 1:A:230:ASP:HB2 | 5 | 0.93 |
| (1,1398) | 1:A:228:GLN:H | 1:A:230:ASP:HB3 | 5 | 0.93 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD11 | 9 | 0.93 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD12 | 9 | 0.93 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD13 | 9 | 0.93 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD1 | 14 | 0.92 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD2 | 14 | 0.92 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD1 | 14 | 0.92 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD2 | 14 | 0.92 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD1 | 14 | 0.92 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD2 | 14 | 0.92 |
| (1,766) | 1:A:114:ASN:H | 1:A:115:MET:HB2 | 6 | 0.92 |
| (1,1066) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HG13 | 14 | 0.92 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG11 | 1:A:160:PHE:HE1 | 1 | 0.91 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG11 | 1:A:160:PHE:HE2 | 1 | 0.91 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG12 | 1:A:160:PHE:HE1 | 1 | 0.91 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG12 | 1:A:160:PHE:HE2 | 1 | 0.91 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG13 | 1:A:160:PHE:HE1 | 1 | 0.91 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG13 | 1:A:160:PHE:HE2 | 1 | 0.91 |
| (1,712) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:188:PHE:HD1 | 7 | 0.91 |
| (1,712) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:188:PHE:HD2 | 7 | 0.91 |
| (1,470) | 1:A:84:TRP:HZ2 | 1:A:168:GLY:HA2 | 8 | 0.91 |
| (1,336) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:MET:HG2 | 7 | 0.91 |
| (1,336) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:MET:HG3 | 7 | 0.91 |
| (1,1331) | 1:A:205:SER:H | 1:A:213:TYR:H | 14 | 0.91 |
| (1,1066) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HG13 | 3 | 0.91 |
| (1,1066) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HG13 | 9 | 0.91 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD1 | 11 | 0.9 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD2 | 11 | 0.9 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD1 | 11 | 0.9 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD2 | 11 | 0.9 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD1 | 11 | 0.9 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD2 | 11 | 0.9 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG21 | 1:A:188:PHE:HD1 | 11 | 0.9 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG21 | 1:A:188:PHE:HD2 | 11 | 0.9 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG22 | 1:A:188:PHE:HD1 | 11 | 0.9 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG22 | 1:A:188:PHE:HD2 | 11 | 0.9 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG23 | 1:A:188:PHE:HD1 | 11 | 0.9 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG23 | 1:A:188:PHE:HD2 | 11 | 0.9 |
| (1,452) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:237:LEU:HG | 10 | 0.9 |
| (1,452) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:237:LEU:HG | 10 | 0.9 |
| (1,1288) | 1:A:198:HIS:H | 1:A:200:LEU:HG | 5 | 0.9 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1288) | 1:A:198:HIS:H | 1:A:200:LEU:HG | 10 | 0.9 |
| (1,1199) | 1:A:178:TRP:HZ2 | 1:A:186:ILE:HG13 | 3 | 0.9 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD11 | 3 | 0.9 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD12 | 3 | 0.9 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD13 | 3 | 0.9 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:HE2 | 16 | 0.89 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:HE3 | 16 | 0.89 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:HE2 | 16 | 0.89 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:HE3 | 16 | 0.89 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:HE2 | 16 | 0.89 |
| (7,261) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:HE3 | 16 | 0.89 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG2 | 15 | 0.89 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG3 | 15 | 0.89 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG2 | 15 | 0.89 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG3 | 15 | 0.89 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG2 | 15 | 0.89 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG3 | 15 | 0.89 |
| (1,712) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:188:PHE:HD1 | 12 | 0.89 |
| (1,712) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:188:PHE:HD2 | 12 | 0.89 |
| (1,46) | 1:A:16:GLN:HE21 | 1:A:35:LEU:H | 14 | 0.89 |
| (1,46) | 1:A:16:GLN:HE22 | 1:A:35:LEU:H | 14 | 0.89 |
| (1,347) | 1:A:61:ILE:HA | 1:A:63:GLN:H | 6 | 0.89 |
| (1,1161) | 1:A:173:ASP:H | 1:A:175:ASP:H | 2 | 0.89 |
| (1,1066) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HG13 | 6 | 0.89 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG2 | 5 | 0.88 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG3 | 5 | 0.88 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG2 | 5 | 0.88 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG3 | 5 | 0.88 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG2 | 5 | 0.88 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG3 | 5 | 0.88 |
| (1,662) | 1:A:103:ILE:H | 1:A:104:THR:HB | 2 | 0.88 |
| (1,452) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:237:LEU:HG | 9 | 0.88 |
| (1,452) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:237:LEU:HG | 9 | 0.88 |
| (1,336) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:MET:HG2 | 1 | 0.88 |
| (1,336) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:MET:HG3 | 1 | 0.88 |
| (1,1181) | 1:A:177:ARG:H | 1:A:186:ILE:H | 12 | 0.88 |
| (1,1066) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HG13 | 5 | 0.88 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD11 | 7 | 0.87 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD12 | 7 | 0.87 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD13 | 7 | 0.87 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:H | 4 | 0.87 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:H | 4 | 0.87 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:H | 4 | 0.87 |
| (1,94) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:24:LEU:H | 6 | 0.87 |
| (1,766) | 1:A:114:ASN:H | 1:A:115:MET:HB2 | 2 | 0.87 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG21 | 1:A:188:PHE:HD1 | 3 | 0.87 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG21 | 1:A:188:PHE:HD2 | 3 | 0.87 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG22 | 1:A:188:PHE:HD1 | 3 | 0.87 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG22 | 1:A:188:PHE:HD2 | 3 | 0.87 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG23 | 1:A:188:PHE:HD1 | 3 | 0.87 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG23 | 1:A:188:PHE:HD2 | 3 | 0.87 |
| (1,260) | 1:A:46:PHE:HE1 | 1:A:215:THR:HG21 | 7 | 0.87 |
| (1,260) | 1:A:46:PHE:HE1 | 1:A:215:THR:HG22 | 7 | 0.87 |
| (1,260) | 1:A:46:PHE:HE1 | 1:A:215:THR:HG23 | 7 | 0.87 |
| (1,260) | 1:A:46:PHE:HE2 | 1:A:215:THR:HG21 | 7 | 0.87 |
| (1,260) | 1:A:46:PHE:HE2 | 1:A:215:THR:HG22 | 7 | 0.87 |
| (1,260) | 1:A:46:PHE:HE2 | 1:A:215:THR:HG23 | 7 | 0.87 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG2 | 3 | 0.86 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG3 | 3 | 0.86 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG2 | 3 | 0.86 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG3 | 3 | 0.86 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG2 | 3 | 0.86 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG3 | 3 | 0.86 |
| (1,712) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:188:PHE:HD1 | 14 | 0.86 |
| (1,712) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:188:PHE:HD2 | 14 | 0.86 |
| (1,662) | 1:A:103:ILE:H | 1:A:104:THR:HB | 4 | 0.86 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE1 | 1:A:43:GLN:HG2 | 10 | 0.86 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE1 | 1:A:43:GLN:HG3 | 10 | 0.86 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE2 | 1:A:43:GLN:HG2 | 10 | 0.86 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE2 | 1:A:43:GLN:HG3 | 10 | 0.86 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE3 | 1:A:43:GLN:HG2 | 10 | 0.86 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE3 | 1:A:43:GLN:HG3 | 10 | 0.86 |
| (1,1288) | 1:A:198:HIS:H | 1:A:200:LEU:HG | 12 | 0.86 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:H | 9 | 0.85 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:H | 9 | 0.85 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:H | 9 | 0.85 |
| (4,16) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:145:ASP:OD2 | 6 | 0.85 |
| (1,662) | 1:A:103:ILE:H | 1:A:104:THR:HB | 16 | 0.85 |
| (1,260) | 1:A:46:PHE:HE1 | 1:A:215:THR:HG21 | 8 | 0.85 |
| (1,260) | 1:A:46:PHE:HE1 | 1:A:215:THR:HG22 | 8 | 0.85 |
| (1,260) | 1:A:46:PHE:HE1 | 1:A:215:THR:HG23 | 8 | 0.85 |
| (1,260) | 1:A:46:PHE:HE2 | 1:A:215:THR:HG21 | 8 | 0.85 |
| (1,260) | 1:A:46:PHE:HE2 | 1:A:215:THR:HG22 | 8 | 0.85 |
| (1,260) | 1:A:46:PHE:HE2 | 1:A:215:THR:HG23 | 8 | 0.85 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1406) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:HG2 | 14 | 0.85 |
| (1,1406) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:HG3 | 14 | 0.85 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD11 | 6 | 0.85 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD12 | 6 | 0.85 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD13 | 6 | 0.85 |
| (1,1362) | 1:A:211:VAL:H | 1:A:227:SER:HA | 6 | 0.85 |
| (1,1288) | 1:A:198:HIS:H | 1:A:200:LEU:HG | 4 | 0.85 |
| (1,1111) | 1:A:161:ALA:H | 1:A:163:GLY:H | 9 | 0.85 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD11 | 5 | 0.84 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD12 | 5 | 0.84 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD13 | 5 | 0.84 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD11 | 5 | 0.84 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD12 | 5 | 0.84 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD13 | 5 | 0.84 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD11 | 5 | 0.84 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD12 | 5 | 0.84 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD13 | 5 | 0.84 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD1 | 10 | 0.84 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD2 | 10 | 0.84 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD1 | 10 | 0.84 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD2 | 10 | 0.84 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD1 | 10 | 0.84 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD2 | 10 | 0.84 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG2 | 4 | 0.84 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG3 | 4 | 0.84 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG2 | 4 | 0.84 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG3 | 4 | 0.84 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG2 | 4 | 0.84 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG3 | 4 | 0.84 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG2 | 11 | 0.84 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG3 | 11 | 0.84 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG2 | 11 | 0.84 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG3 | 11 | 0.84 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG2 | 11 | 0.84 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG3 | 11 | 0.84 |
| (1,712) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:188:PHE:HD1 | 9 | 0.84 |
| (1,712) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:188:PHE:HD2 | 9 | 0.84 |
| (1,470) | 1:A:84:TRP:HZ2 | 1:A:168:GLY:HA2 | 11 | 0.84 |
| (1,42) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:16:GLN:HE21 | 8 | 0.84 |
| (1,42) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:16:GLN:HE22 | 8 | 0.84 |
| (1,336) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:MET:HG2 | 14 | 0.84 |
| (1,336) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:MET:HG3 | 14 | 0.84 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1288) | 1:A:198:HIS:H | 1:A:200:LEU:HG | 9 | 0.84 |
| (1,1098) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:169:ASP:H | 10 | 0.84 |
| (1,1066) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HG13 | 16 | 0.84 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG2 | 2 | 0.83 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG3 | 2 | 0.83 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG2 | 2 | 0.83 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG3 | 2 | 0.83 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG2 | 2 | 0.83 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG3 | 2 | 0.83 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:H | 15 | 0.83 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:H | 15 | 0.83 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:H | 15 | 0.83 |
| (1,712) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:188:PHE:HD1 | 6 | 0.83 |
| (1,712) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:188:PHE:HD2 | 6 | 0.83 |
| (1,712) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:188:PHE:HD1 | 11 | 0.83 |
| (1,712) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:188:PHE:HD2 | 11 | 0.83 |
| (1,662) | 1:A:103:ILE:H | 1:A:104:THR:HB | 1 | 0.83 |
| (1,347) | 1:A:61:ILE:HA | 1:A:63:GLN:H | 13 | 0.83 |
| (1,1331) | 1:A:205:SER:H | 1:A:213:TYR:H | 8 | 0.83 |
| (1,1288) | 1:A:198:HIS:H | 1:A:200:LEU:HG | 7 | 0.83 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD11 | 14 | 0.82 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD12 | 14 | 0.82 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD13 | 14 | 0.82 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:188:PHE:HE1 | 4 | 0.82 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:188:PHE:HE2 | 4 | 0.82 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:188:PHE:HE1 | 4 | 0.82 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:188:PHE:HE2 | 4 | 0.82 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:188:PHE:HE1 | 4 | 0.82 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:188:PHE:HE2 | 4 | 0.82 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:188:PHE:HE1 | 15 | 0.82 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:188:PHE:HE2 | 15 | 0.82 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:188:PHE:HE1 | 15 | 0.82 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:188:PHE:HE2 | 15 | 0.82 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:188:PHE:HE1 | 15 | 0.82 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:188:PHE:HE2 | 15 | 0.82 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD1 | 13 | 0.82 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD2 | 13 | 0.82 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD1 | 13 | 0.82 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD2 | 13 | 0.82 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD1 | 13 | 0.82 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD2 | 13 | 0.82 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG2 | 1 | 0.82 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG3 | 1 | 0.82 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG2 | 1 | 0.82 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG3 | 1 | 0.82 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG2 | 1 | 0.82 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG3 | 1 | 0.82 |
| (1,99) | 1:A:23:TYR:HB2 | 1:A:72:VAL:H | 7 | 0.82 |
| (1,99) | 1:A:23:TYR:HB3 | 1:A:72:VAL:H | 7 | 0.82 |
| (1,99) | 1:A:23:TYR:HB2 | 1:A:72:VAL:H | 9 | 0.82 |
| (1,99) | 1:A:23:TYR:HB3 | 1:A:72:VAL:H | 9 | 0.82 |
| (1,909) | 1:A:127:VAL:HA | 1:A:129:TRP:HD1 | 7 | 0.82 |
| (1,780) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HA | 11 | 0.82 |
| (1,780) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HA | 11 | 0.82 |
| (1,780) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HA | 11 | 0.82 |
| (1,662) | 1:A:103:ILE:H | 1:A:104:THR:HB | 6 | 0.82 |
| (1,1362) | 1:A:211:VAL:H | 1:A:227:SER:HA | 1 | 0.82 |
| (1,1288) | 1:A:198:HIS:H | 1:A:200:LEU:HG | 11 | 0.82 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD1 | 2 | 0.81 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD2 | 2 | 0.81 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD1 | 2 | 0.81 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD2 | 2 | 0.81 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD1 | 2 | 0.81 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD2 | 2 | 0.81 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD1 | 9 | 0.81 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD2 | 9 | 0.81 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD1 | 9 | 0.81 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD2 | 9 | 0.81 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD1 | 9 | 0.81 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD2 | 9 | 0.81 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG2 | 10 | 0.81 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG3 | 10 | 0.81 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG2 | 10 | 0.81 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG3 | 10 | 0.81 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG2 | 10 | 0.81 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG3 | 10 | 0.81 |
| (1,780) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HA | 10 | 0.81 |
| (1,780) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HA | 10 | 0.81 |
| (1,780) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HA | 10 | 0.81 |
| (1,766) | 1:A:114:ASN:H | 1:A:115:MET:HB2 | 7 | 0.81 |
| (1,766) | 1:A:114:ASN:H | 1:A:115:MET:HB2 | 8 | 0.81 |
| (1,468) | 1:A:84:TRP:HE1 | 1:A:200:LEU:H | 10 | 0.81 |
| (1,452) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:237:LEU:HG | 1 | 0.81 |
| (1,452) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:237:LEU:HG | 1 | 0.81 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1331) | 1:A:205:SER:H | 1:A:213:TYR:H | 10 | 0.81 |
| (1,1288) | 1:A:198:HIS:H | 1:A:200:LEU:HG | 6 | 0.81 |
| (1,1181) | 1:A:177:ARG:H | 1:A:186:ILE:H | 7 | 0.81 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD11 | 1 | 0.81 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD12 | 1 | 0.81 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD13 | 1 | 0.81 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD11 | 15 | 0.81 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD12 | 15 | 0.81 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD13 | 15 | 0.81 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:56:SER:H | 13 | 0.8 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:56:SER:H | 13 | 0.8 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:56:SER:H | 13 | 0.8 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG11 | 4 | 0.8 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG12 | 4 | 0.8 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG13 | 4 | 0.8 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD1 | 3 | 0.8 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD2 | 3 | 0.8 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD1 | 3 | 0.8 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD2 | 3 | 0.8 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD1 | 3 | 0.8 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD2 | 3 | 0.8 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG2 | 7 | 0.8 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG3 | 7 | 0.8 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG2 | 7 | 0.8 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG3 | 7 | 0.8 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG2 | 7 | 0.8 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG3 | 7 | 0.8 |
| (4,8) | 3:A:302:CA:CA | 1:A:173:ASP:OD2 | 6 | 0.8 |
| (2,3) | 1:A:231:ILE:HD11 | 1:A:232:LYS:HB3 | 14 | 0.8 |
| (2,3) | 1:A:231:ILE:HD12 | 1:A:232:LYS:HB3 | 14 | 0.8 |
| (2,3) | 1:A:231:ILE:HD13 | 1:A:232:LYS:HB3 | 14 | 0.8 |
| (1,909) | 1:A:127:VAL:HA | 1:A:129:TRP:HD1 | 13 | 0.8 |
| (1,780) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HA | 3 | 0.8 |
| (1,780) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HA | 3 | 0.8 |
| (1,780) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HA | 3 | 0.8 |
| (1,780) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HA | 8 | 0.8 |
| (1,780) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HA | 8 | 0.8 |
| (1,780) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HA | 8 | 0.8 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG21 | 1:A:188:PHE:HD1 | 13 | 0.8 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG21 | 1:A:188:PHE:HD2 | 13 | 0.8 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG22 | 1:A:188:PHE:HD1 | 13 | 0.8 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG22 | 1:A:188:PHE:HD2 | 13 | 0.8 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG23 | 1:A:188:PHE:HD1 | 13 | 0.8 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG23 | 1:A:188:PHE:HD2 | 13 | 0.8 |
| (1,662) | 1:A:103:ILE:H | 1:A:104:THR:HB | 10 | 0.8 |
| (1,606) | 1:A:96:TYR:HA | 1:A:102:HIS:HD2 | 7 | 0.8 |
| (1,1386) | 1:A:223:ASN:H | 1:A:224:PHE:HB2 | 13 | 0.8 |
| (1,1386) | 1:A:223:ASN:H | 1:A:224:PHE:HB3 | 13 | 0.8 |
| (1,1038) | 1:A:150:ASP:H | 1:A:151:GLY:H | 6 | 0.8 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD1 | 6 | 0.79 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD2 | 6 | 0.79 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD1 | 6 | 0.79 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD2 | 6 | 0.79 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD1 | 6 | 0.79 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD2 | 6 | 0.79 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG2 | 9 | 0.79 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG3 | 9 | 0.79 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG2 | 9 | 0.79 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG3 | 9 | 0.79 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG2 | 9 | 0.79 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG3 | 9 | 0.79 |
| (1,99) | 1:A:23:TYR:HB2 | 1:A:72:VAL:H | 1 | 0.79 |
| (1,99) | 1:A:23:TYR:HB3 | 1:A:72:VAL:H | 1 | 0.79 |
| (1,244) | 1:A:46:PHE:H | 1:A:48:LEU:H | 16 | 0.79 |
| (1,213) | 1:A:43:GLN:HA | 1:A:48:LEU:H | 9 | 0.79 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD11 | 12 | 0.79 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD12 | 12 | 0.79 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD13 | 12 | 0.79 |
| (1,1331) | 1:A:205:SER:H | 1:A:213:TYR:H | 2 | 0.79 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD11 | 14 | 0.79 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD12 | 14 | 0.79 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD13 | 14 | 0.79 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:188:PHE:HE1 | 2 | 0.78 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:188:PHE:HE2 | 2 | 0.78 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:188:PHE:HE1 | 2 | 0.78 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:188:PHE:HE2 | 2 | 0.78 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:188:PHE:HE1 | 2 | 0.78 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:188:PHE:HE2 | 2 | 0.78 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD1 | 7 | 0.78 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD2 | 7 | 0.78 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD1 | 7 | 0.78 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD2 | 7 | 0.78 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD1 | 7 | 0.78 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD2 | 7 | 0.78 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,909) | 1:A:127:VAL:HA | 1:A:129:TRP:HD1 | 15 | 0.78 |
| (1,903) | 1:A:126:LYS:HD2 | 1:A:127:VAL:HB | 7 | 0.78 |
| (1,903) | 1:A:126:LYS:HD2 | 1:A:127:VAL:HB | 15 | 0.78 |
| (1,62) | 1:A:18:TYR:HB3 | 1:A:62:MET:HE1 | 16 | 0.78 |
| (1,62) | 1:A:18:TYR:HB3 | 1:A:62:MET:HE2 | 16 | 0.78 |
| (1,62) | 1:A:18:TYR:HB3 | 1:A:62:MET:HE3 | 16 | 0.78 |
| (1,336) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:MET:HG2 | 10 | 0.78 |
| (1,336) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:MET:HG3 | 10 | 0.78 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD11 | 11 | 0.78 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD12 | 11 | 0.78 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD13 | 11 | 0.78 |
| (1,1288) | 1:A:198:HIS:H | 1:A:200:LEU:HG | 3 | 0.78 |
| (1,1288) | 1:A:198:HIS:H | 1:A:200:LEU:HG | 8 | 0.78 |
| (1,1111) | 1:A:161:ALA:H | 1:A:163:GLY:H | 8 | 0.78 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG2 | 13 | 0.77 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG3 | 13 | 0.77 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG2 | 13 | 0.77 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG3 | 13 | 0.77 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG2 | 13 | 0.77 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG3 | 13 | 0.77 |
| (1,94) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:24:LEU:H | 2 | 0.77 |
| (1,766) | 1:A:114:ASN:H | 1:A:115:MET:HB2 | 11 | 0.77 |
| (1,766) | 1:A:114:ASN:H | 1:A:115:MET:HB2 | 14 | 0.77 |
| (1,662) | 1:A:103:ILE:H | 1:A:104:THR:HB | 11 | 0.77 |
| (1,467) | 1:A:84:TRP:HE1 | 1:A:199:SER:HA | 15 | 0.77 |
| (1,347) | 1:A:61:ILE:HA | 1:A:63:GLN:H | 3 | 0.77 |
| (1,1406) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:HG2 | 6 | 0.77 |
| (1,1406) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:HG3 | 6 | 0.77 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD11 | 8 | 0.77 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD12 | 8 | 0.77 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD13 | 8 | 0.77 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD11 | 14 | 0.77 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD12 | 14 | 0.77 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD13 | 14 | 0.77 |
| (1,1362) | 1:A:211:VAL:H | 1:A:227:SER:HA | 8 | 0.77 |
| (1,1362) | 1:A:211:VAL:H | 1:A:227:SER:HA | 12 | 0.77 |
| (1,13) | 1:A:11:GLN:H | 1:A:11:GLN:HE21 | 7 | 0.77 |
| (1,13) | 1:A:11:GLN:H | 1:A:11:GLN:HE22 | 7 | 0.77 |
| (1,1288) | 1:A:198:HIS:H | 1:A:200:LEU:HG | 1 | 0.77 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:188:PHE:HE1 | 8 | 0.76 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:188:PHE:HE2 | 8 | 0.76 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:188:PHE:HE1 | 8 | 0.76 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:188:PHE:HE2 | 8 | 0.76 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:188:PHE:HE1 | 8 | 0.76 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:188:PHE:HE2 | 8 | 0.76 |
| (1,94) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:24:LEU:H | 4 | 0.76 |
| (1,903) | 1:A:126:LYS:HD2 | 1:A:127:VAL:HB | 12 | 0.76 |
| (1,725) | 1:A:109:VAL:HA | 1:A:192:ALA:HA | 14 | 0.76 |
| (1,712) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:188:PHE:HD1 | 2 | 0.76 |
| (1,712) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:188:PHE:HD2 | 2 | 0.76 |
| (1,662) | 1:A:103:ILE:H | 1:A:104:THR:HB | 8 | 0.76 |
| (1,561) | 1:A:92:ARG:HD2 | 1:A:132:ALA:H | 6 | 0.76 |
| (1,561) | 1:A:92:ARG:HD3 | 1:A:132:ALA:H | 6 | 0.76 |
| (1,470) | 1:A:84:TRP:HZ2 | 1:A:168:GLY:HA2 | 13 | 0.76 |
| (1,347) | 1:A:61:ILE:HA | 1:A:63:GLN:H | 11 | 0.76 |
| (1,1360) | 1:A:211:VAL:H | 1:A:213:TYR:H | 13 | 0.76 |
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:230:ASP:HA | 6 | 0.76 |
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:230:ASP:HA | 6 | 0.76 |
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:230:ASP:HA | 6 | 0.76 |
| (1,1288) | 1:A:198:HIS:H | 1:A:200:LEU:HG | 2 | 0.76 |
| (1,1187) | 1:A:178:TRP:H | 1:A:178:TRP:HE1 | 11 | 0.76 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD11 | 11 | 0.76 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD12 | 11 | 0.76 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD13 | 11 | 0.76 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD1 | 14 | 0.75 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD2 | 14 | 0.75 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD1 | 14 | 0.75 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD2 | 14 | 0.75 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD1 | 14 | 0.75 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD2 | 14 | 0.75 |
| (1,766) | 1:A:114:ASN:H | 1:A:115:MET:HB2 | 10 | 0.75 |
| (1,725) | 1:A:109:VAL:HA | 1:A:192:ALA:HA | 12 | 0.75 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG21 | 1:A:188:PHE:HD1 | 14 | 0.75 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG21 | 1:A:188:PHE:HD2 | 14 | 0.75 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG22 | 1:A:188:PHE:HD1 | 14 | 0.75 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG22 | 1:A:188:PHE:HD2 | 14 | 0.75 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG23 | 1:A:188:PHE:HD1 | 14 | 0.75 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG23 | 1:A:188:PHE:HD2 | 14 | 0.75 |
| (1,606) | 1:A:96:TYR:HA | 1:A:102:HIS:HD2 | 14 | 0.75 |
| (1,257) | 1:A:46:PHE:HE1 | 1:A:61:ILE:HA | 8 | 0.75 |
| (1,257) | 1:A:46:PHE:HE2 | 1:A:61:ILE:HA | 8 | 0.75 |
| (1,1362) | 1:A:211:VAL:H | 1:A:227:SER:HA | 10 | 0.75 |
| (1,1341) | 1:A:207:ASP:H | 1:A:213:TYR:HE1 | 12 | 0.75 |
| (1,1341) | 1:A:207:ASP:H | 1:A:213:TYR:HE2 | 12 | 0.75 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1331) | 1:A:205:SER:H | 1:A:213:TYR:H | 5 | 0.75 |
| (1,1331) | 1:A:205:SER:H | 1:A:213:TYR:H | 16 | 0.75 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG11 | 1:A:160:PHE:HE1 | 16 | 0.74 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG11 | 1:A:160:PHE:HE2 | 16 | 0.74 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG12 | 1:A:160:PHE:HE1 | 16 | 0.74 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG12 | 1:A:160:PHE:HE2 | 16 | 0.74 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG13 | 1:A:160:PHE:HE1 | 16 | 0.74 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG13 | 1:A:160:PHE:HE2 | 16 | 0.74 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:188:PHE:HE1 | 6 | 0.74 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:188:PHE:HE2 | 6 | 0.74 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:188:PHE:HE1 | 6 | 0.74 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:188:PHE:HE2 | 6 | 0.74 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:188:PHE:HE1 | 6 | 0.74 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:188:PHE:HE2 | 6 | 0.74 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD1 | 5 | 0.74 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD2 | 5 | 0.74 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD1 | 5 | 0.74 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD2 | 5 | 0.74 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD1 | 5 | 0.74 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD2 | 5 | 0.74 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:H | 6 | 0.74 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:H | 6 | 0.74 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:H | 6 | 0.74 |
| (1,712) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:188:PHE:HD1 | 3 | 0.74 |
| (1,712) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:188:PHE:HD2 | 3 | 0.74 |
| (1,712) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:188:PHE:HD1 | 8 | 0.74 |
| (1,712) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:188:PHE:HD2 | 8 | 0.74 |
| (1,662) | 1:A:103:ILE:H | 1:A:104:THR:HB | 5 | 0.74 |
| (1,470) | 1:A:84:TRP:HZ2 | 1:A:168:GLY:HA2 | 12 | 0.74 |
| (1,336) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:MET:HG2 | 6 | 0.74 |
| (1,336) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:MET:HG3 | 6 | 0.74 |
| (1,213) | 1:A:43:GLN:HA | 1:A:48:LEU:H | 15 | 0.74 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE2 | 1:A:237:LEU:HB2 | 8 | 0.74 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE2 | 1:A:237:LEU:HB3 | 8 | 0.74 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE3 | 1:A:237:LEU:HB2 | 8 | 0.74 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE3 | 1:A:237:LEU:HB3 | 8 | 0.74 |
| (1,1399) | 1:A:228:GLN:HA | 1:A:230:ASP:HB2 | 8 | 0.74 |
| (1,1399) | 1:A:228:GLN:HA | 1:A:230:ASP:HB3 | 8 | 0.74 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:228:GLN:H | 7 | 0.74 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:228:GLN:H | 7 | 0.74 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:228:GLN:H | 7 | 0.74 |
| (1,1331) | 1:A:205:SER:H | 1:A:213:TYR:H | 4 | 0.74 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:188:PHE:HE1 | 9 | 0.73 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:188:PHE:HE2 | 9 | 0.73 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:188:PHE:HE1 | 9 | 0.73 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:188:PHE:HE2 | 9 | 0.73 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:188:PHE:HE1 | 9 | 0.73 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:188:PHE:HE2 | 9 | 0.73 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG2 | 16 | 0.73 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG3 | 16 | 0.73 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG2 | 16 | 0.73 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG3 | 16 | 0.73 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG2 | 16 | 0.73 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG3 | 16 | 0.73 |
| (1,766) | 1:A:114:ASN:H | 1:A:115:MET:HB2 | 9 | 0.73 |
| (1,662) | 1:A:103:ILE:H | 1:A:104:THR:HB | 13 | 0.73 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD11 | 4 | 0.73 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD12 | 4 | 0.73 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD13 | 4 | 0.73 |
| (1,1362) | 1:A:211:VAL:H | 1:A:227:SER:HA | 14 | 0.73 |
| (1,1331) | 1:A:205:SER:H | 1:A:213:TYR:H | 7 | 0.73 |
| (1,1288) | 1:A:198:HIS:H | 1:A:200:LEU:HG | 13 | 0.73 |
| (1,1181) | 1:A:177:ARG:H | 1:A:186:ILE:H | 4 | 0.73 |
| (1,1161) | 1:A:173:ASP:H | 1:A:175:ASP:H | 3 | 0.73 |
| (7,2) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:54:LEU:HD21 | 12 | 0.72 |
| (7,2) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:54:LEU:HD22 | 12 | 0.72 |
| (7,2) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:54:LEU:HD23 | 12 | 0.72 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:H | 10 | 0.72 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:H | 10 | 0.72 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:H | 10 | 0.72 |
| (4,19) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:204:HIS:NE2 | 6 | 0.72 |
| (2,3) | 1:A:231:ILE:HD11 | 1:A:232:LYS:HB3 | 3 | 0.72 |
| (2,3) | 1:A:231:ILE:HD12 | 1:A:232:LYS:HB3 | 3 | 0.72 |
| (2,3) | 1:A:231:ILE:HD13 | 1:A:232:LYS:HB3 | 3 | 0.72 |
| (1,662) | 1:A:103:ILE:H | 1:A:104:THR:HB | 15 | 0.72 |
| (1,606) | 1:A:96:TYR:HA | 1:A:102:HIS:HD2 | 16 | 0.72 |
| (1,470) | 1:A:84:TRP:HZ2 | 1:A:168:GLY:HA2 | 14 | 0.72 |
| (1,461) | 1:A:84:TRP:H | 1:A:234:ILE:HD11 | 3 | 0.72 |
| (1,461) | 1:A:84:TRP:H | 1:A:234:ILE:HD12 | 3 | 0.72 |
| (1,461) | 1:A:84:TRP:H | 1:A:234:ILE:HD13 | 3 | 0.72 |
| (1,46) | 1:A:16:GLN:HE21 | 1:A:35:LEU:H | 16 | 0.72 |
| (1,46) | 1:A:16:GLN:HE22 | 1:A:35:LEU:H | 16 | 0.72 |
| (1,452) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:237:LEU:HG | 16 | 0.72 |
| (1,452) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:237:LEU:HG | 16 | 0.72 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD11 | 1 | 0.72 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD12 | 1 | 0.72 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD13 | 1 | 0.72 |
| (1,1362) | 1:A:211:VAL:H | 1:A:227:SER:HA | 3 | 0.72 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:228:GLN:H | 12 | 0.72 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:228:GLN:H | 12 | 0.72 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:228:GLN:H | 12 | 0.72 |
| (1,1199) | 1:A:178:TRP:HZ2 | 1:A:186:ILE:HG13 | 1 | 0.72 |
| (1,1181) | 1:A:177:ARG:H | 1:A:186:ILE:H | 10 | 0.72 |
| (1,1151) | 1:A:172:PHE:HD1 | 1:A:173:ASP:H | 8 | 0.72 |
| (1,1151) | 1:A:172:PHE:HD2 | 1:A:173:ASP:H | 8 | 0.72 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG11 | 1:A:160:PHE:HE1 | 3 | 0.71 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG11 | 1:A:160:PHE:HE2 | 3 | 0.71 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG12 | 1:A:160:PHE:HE1 | 3 | 0.71 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG12 | 1:A:160:PHE:HE2 | 3 | 0.71 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG13 | 1:A:160:PHE:HE1 | 3 | 0.71 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG13 | 1:A:160:PHE:HE2 | 3 | 0.71 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG11 | 3 | 0.71 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG12 | 3 | 0.71 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG13 | 3 | 0.71 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG11 | 1:A:138:PHE:H | 7 | 0.71 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG12 | 1:A:138:PHE:H | 7 | 0.71 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG13 | 1:A:138:PHE:H | 7 | 0.71 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG21 | 1 | 0.71 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG22 | 1 | 0.71 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG23 | 1 | 0.71 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG21 | 11 | 0.71 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG22 | 11 | 0.71 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG23 | 11 | 0.71 |
| (1,766) | 1:A:114:ASN:H | 1:A:115:MET:HB2 | 13 | 0.71 |
| (1,662) | 1:A:103:ILE:H | 1:A:104:THR:HB | 3 | 0.71 |
| (1,662) | 1:A:103:ILE:H | 1:A:104:THR:HB | 14 | 0.71 |
| (1,347) | 1:A:61:ILE:HA | 1:A:63:GLN:H | 12 | 0.71 |
| (1,244) | 1:A:46:PHE:H | 1:A:48:LEU:H | 5 | 0.71 |
| (1,1402) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HB | 3 | 0.71 |
| (1,1331) | 1:A:205:SER:H | 1:A:213:TYR:H | 13 | 0.71 |
| (1,1308) | 1:A:202:MET:H | 1:A:234:ILE:HD11 | 3 | 0.71 |
| (1,1308) | 1:A:202:MET:H | 1:A:234:ILE:HD12 | 3 | 0.71 |
| (1,1308) | 1:A:202:MET:H | 1:A:234:ILE:HD13 | 3 | 0.71 |
| (1,1308) | 1:A:202:MET:H | 1:A:234:ILE:HD11 | 9 | 0.71 |
| (1,1308) | 1:A:202:MET:H | 1:A:234:ILE:HD12 | 9 | 0.71 |
| (1,1308) | 1:A:202:MET:H | 1:A:234:ILE:HD13 | 9 | 0.71 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1288) | 1:A:198:HIS:H | 1:A:200:LEU:HG | 14 | 0.71 |
| (1,1241) | 1:A:189:LEU:H | 1:A:191:ALA:H | 14 | 0.71 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD11 | 4 | 0.71 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD12 | 4 | 0.71 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD13 | 4 | 0.71 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:56:SER:H | 4 | 0.7 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:56:SER:H | 4 | 0.7 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:56:SER:H | 4 | 0.7 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:188:PHE:HE1 | 5 | 0.7 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:188:PHE:HE2 | 5 | 0.7 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:188:PHE:HE1 | 5 | 0.7 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:188:PHE:HE2 | 5 | 0.7 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:188:PHE:HE1 | 5 | 0.7 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:188:PHE:HE2 | 5 | 0.7 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG2 | 8 | 0.7 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG3 | 8 | 0.7 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG2 | 8 | 0.7 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG3 | 8 | 0.7 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG2 | 8 | 0.7 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG3 | 8 | 0.7 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG2 | 14 | 0.7 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG3 | 14 | 0.7 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG2 | 14 | 0.7 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG3 | 14 | 0.7 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG2 | 14 | 0.7 |
| (7,206) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG3 | 14 | 0.7 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:H | 8 | 0.7 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:H | 8 | 0.7 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:H | 8 | 0.7 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:202:MET:HE1 | 9 | 0.7 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:202:MET:HE2 | 9 | 0.7 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:202:MET:HE3 | 9 | 0.7 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:202:MET:HE1 | 9 | 0.7 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:202:MET:HE2 | 9 | 0.7 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:202:MET:HE3 | 9 | 0.7 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:202:MET:HE1 | 9 | 0.7 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:202:MET:HE2 | 9 | 0.7 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:202:MET:HE3 | 9 | 0.7 |
| (1,1399) | 1:A:228:GLN:HA | 1:A:230:ASP:HB2 | 15 | 0.7 |
| (1,1399) | 1:A:228:GLN:HA | 1:A:230:ASP:HB3 | 15 | 0.7 |
| (1,1308) | 1:A:202:MET:H | 1:A:234:ILE:HD11 | 14 | 0.7 |
| (1,1308) | 1:A:202:MET:H | 1:A:234:ILE:HD12 | 14 | 0.7 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1308) | 1:A:202:MET:H | 1:A:234:ILE:HD13 | 14 | 0.7 |
| (1,1161) | 1:A:173:ASP:H | 1:A:175:ASP:H | 15 | 0.7 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG11 | 1:A:160:PHE:HE1 | 14 | 0.69 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG11 | 1:A:160:PHE:HE2 | 14 | 0.69 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG12 | 1:A:160:PHE:HE1 | 14 | 0.69 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG12 | 1:A:160:PHE:HE2 | 14 | 0.69 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG13 | 1:A:160:PHE:HE1 | 14 | 0.69 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG13 | 1:A:160:PHE:HE2 | 14 | 0.69 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:188:PHE:HE1 | 7 | 0.69 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:188:PHE:HE2 | 7 | 0.69 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:188:PHE:HE1 | 7 | 0.69 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:188:PHE:HE2 | 7 | 0.69 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:188:PHE:HE1 | 7 | 0.69 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:188:PHE:HE2 | 7 | 0.69 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD1 | 15 | 0.69 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD2 | 15 | 0.69 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD1 | 15 | 0.69 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD2 | 15 | 0.69 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD1 | 15 | 0.69 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD2 | 15 | 0.69 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:H | 2 | 0.69 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:H | 2 | 0.69 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:H | 2 | 0.69 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:HB2 | 6 | 0.69 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:HB3 | 6 | 0.69 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:HB2 | 6 | 0.69 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:HB3 | 6 | 0.69 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:HB2 | 6 | 0.69 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:HB3 | 6 | 0.69 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG21 | 9 | 0.69 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG22 | 9 | 0.69 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG23 | 9 | 0.69 |
| (1,785) | 1:A:116:TRP:H | 1:A:118:LYS:H | 16 | 0.69 |
| (1,780) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HA | 16 | 0.69 |
| (1,780) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HA | 16 | 0.69 |
| (1,780) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HA | 16 | 0.69 |
| (1,480) | 1:A:88:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB2 | 14 | 0.69 |
| (1,480) | 1:A:88:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB3 | 14 | 0.69 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG2 | 1:A:163:GLY:HA2 | 9 | 0.69 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG2 | 1:A:163:GLY:HA3 | 9 | 0.69 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG3 | 1:A:163:GLY:HA2 | 9 | 0.69 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG3 | 1:A:163:GLY:HA3 | 9 | 0.69 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,244) | 1:A:46:PHE:H | 1:A:48:LEU:H | 4 | 0.69 |
| (1,196) | 1:A:42:MET:HE1 | 1:A:62:MET:HB2 | 6 | 0.69 |
| (1,196) | 1:A:42:MET:HE1 | 1:A:62:MET:HB3 | 6 | 0.69 |
| (1,196) | 1:A:42:MET:HE2 | 1:A:62:MET:HB2 | 6 | 0.69 |
| (1,196) | 1:A:42:MET:HE2 | 1:A:62:MET:HB3 | 6 | 0.69 |
| (1,196) | 1:A:42:MET:HE3 | 1:A:62:MET:HB2 | 6 | 0.69 |
| (1,196) | 1:A:42:MET:HE3 | 1:A:62:MET:HB3 | 6 | 0.69 |
| (1,1241) | 1:A:189:LEU:H | 1:A:191:ALA:H | 1 | 0.69 |
| (1,1217) | 1:A:180:ASP:HB2 | 1:A:182:SER:H | 7 | 0.69 |
| (1,1217) | 1:A:180:ASP:HB3 | 1:A:182:SER:H | 7 | 0.69 |
| (7,65) | 1:A:56:SER:H | 1:A:58:VAL:HG21 | 9 | 0.68 |
| (7,65) | 1:A:56:SER:H | 1:A:58:VAL:HG22 | 9 | 0.68 |
| (7,65) | 1:A:56:SER:H | 1:A:58:VAL:HG23 | 9 | 0.68 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG11 | 2 | 0.68 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG12 | 2 | 0.68 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG13 | 2 | 0.68 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:188:PHE:HE1 | 10 | 0.68 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:188:PHE:HE2 | 10 | 0.68 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:188:PHE:HE1 | 10 | 0.68 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:188:PHE:HE2 | 10 | 0.68 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:188:PHE:HE1 | 10 | 0.68 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:188:PHE:HE2 | 10 | 0.68 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:188:PHE:HE1 | 14 | 0.68 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:188:PHE:HE2 | 14 | 0.68 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:188:PHE:HE1 | 14 | 0.68 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:188:PHE:HE2 | 14 | 0.68 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:188:PHE:HE1 | 14 | 0.68 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:188:PHE:HE2 | 14 | 0.68 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD1 | 1 | 0.68 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD2 | 1 | 0.68 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD1 | 1 | 0.68 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD2 | 1 | 0.68 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD1 | 1 | 0.68 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD2 | 1 | 0.68 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD1 | 4 | 0.68 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD2 | 4 | 0.68 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD1 | 4 | 0.68 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD2 | 4 | 0.68 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD1 | 4 | 0.68 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD2 | 4 | 0.68 |
| (4,20) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:204:HIS:CG | 6 | 0.68 |
| (1,99) | 1:A:23:TYR:HB2 | 1:A:72:VAL:H | 14 | 0.68 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,99) | 1:A:23:TYR:HB3 | 1:A:72:VAL:H | 14 | 0.68 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG21 | 6 | 0.68 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG22 | 6 | 0.68 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG23 | 6 | 0.68 |
| (1,766) | 1:A:114:ASN:H | 1:A:115:MET:HB2 | 16 | 0.68 |
| (1,712) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:188:PHE:HD1 | 13 | 0.68 |
| (1,712) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:188:PHE:HD2 | 13 | 0.68 |
| (1,58) | 1:A:18:TYR:HB2 | 1:A:20:LYS:H | 10 | 0.68 |
| (1,480) | 1:A:88:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB2 | 12 | 0.68 |
| (1,480) | 1:A:88:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB3 | 12 | 0.68 |
| (1,336) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:MET:HG2 | 12 | 0.68 |
| (1,336) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:MET:HG3 | 12 | 0.68 |
| (1,244) | 1:A:46:PHE:H | 1:A:48:LEU:H | 8 | 0.68 |
| (1,1386) | 1:A:223:ASN:H | 1:A:224:PHE:HB2 | 8 | 0.68 |
| (1,1386) | 1:A:223:ASN:H | 1:A:224:PHE:HB3 | 8 | 0.68 |
| (1,1362) | 1:A:211:VAL:H | 1:A:227:SER:HA | 4 | 0.68 |
| (1,1331) | 1:A:205:SER:H | 1:A:213:TYR:H | 1 | 0.68 |
| (1,1331) | 1:A:205:SER:H | 1:A:213:TYR:H | 11 | 0.68 |
| (1,1330) | 1:A:205:SER:H | 1:A:212:MET:H | 6 | 0.68 |
| (1,1288) | 1:A:198:HIS:H | 1:A:200:LEU:HG | 15 | 0.68 |
| (1,1161) | 1:A:173:ASP:H | 1:A:175:ASP:H | 11 | 0.68 |
| (1,1098) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:169:ASP:H | 5 | 0.68 |
| (1,1004) | 1:A:139:ALA:HA | 1:A:140:ARG:HG2 | 11 | 0.68 |
| (1,1004) | 1:A:139:ALA:HA | 1:A:140:ARG:HG3 | 11 | 0.68 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:56:SER:H | 9 | 0.67 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:56:SER:H | 9 | 0.67 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:56:SER:H | 9 | 0.67 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD11 | 5 | 0.67 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD12 | 5 | 0.67 |
| (7,307) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:196:LEU:HD13 | 5 | 0.67 |
| (7,15) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:72:VAL:HG21 | 15 | 0.67 |
| (7,15) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:72:VAL:HG22 | 15 | 0.67 |
| (7,15) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:72:VAL:HG23 | 15 | 0.67 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:H | 4 | 0.67 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:H | 4 | 0.67 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:H | 4 | 0.67 |
| (1,662) | 1:A:103:ILE:H | 1:A:104:THR:HB | 7 | 0.67 |
| (1,662) | 1:A:103:ILE:H | 1:A:104:THR:HB | 9 | 0.67 |
| (1,559) | 1:A:92:ARG:HD2 | 1:A:128:VAL:H | 11 | 0.67 |
| (1,559) | 1:A:92:ARG:HD3 | 1:A:128:VAL:H | 11 | 0.67 |
| (1,452) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:237:LEU:HG | 4 | 0.67 |
| (1,452) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:237:LEU:HG | 4 | 0.67 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,257) | 1:A:46:PHE:HE1 | 1:A:61:ILE:HA | 1 | 0.67 |
| (1,257) | 1:A:46:PHE:HE2 | 1:A:61:ILE:HA | 1 | 0.67 |
| (1,1341) | 1:A:207:ASP:H | 1:A:213:TYR:HE1 | 1 | 0.67 |
| (1,1341) | 1:A:207:ASP:H | 1:A:213:TYR:HE2 | 1 | 0.67 |
| (1,1199) | 1:A:178:TRP:HZ2 | 1:A:186:ILE:HG13 | 4 | 0.67 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:56:SER:H | 5 | 0.66 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:56:SER:H | 5 | 0.66 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:56:SER:H | 5 | 0.66 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG11 | 1:A:138:PHE:H | 12 | 0.66 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG12 | 1:A:138:PHE:H | 12 | 0.66 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG13 | 1:A:138:PHE:H | 12 | 0.66 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:HB2 | 9 | 0.66 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:HB3 | 9 | 0.66 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:HB2 | 9 | 0.66 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:HB3 | 9 | 0.66 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:HB2 | 9 | 0.66 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:HB3 | 9 | 0.66 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:HB2 | 10 | 0.66 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:HB3 | 10 | 0.66 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:HB2 | 10 | 0.66 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:HB3 | 10 | 0.66 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:HB2 | 10 | 0.66 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:HB3 | 10 | 0.66 |
| (6,3) | 1:A:84:TRP:O | 1:A:238:TYR:HH | 16 | 0.66 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG21 | 10 | 0.66 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG22 | 10 | 0.66 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG23 | 10 | 0.66 |
| (1,766) | 1:A:114:ASN:H | 1:A:115:MET:HB2 | 12 | 0.66 |
| (1,470) | 1:A:84:TRP:HZ2 | 1:A:168:GLY:HA2 | 9 | 0.66 |
| (1,46) | 1:A:16:GLN:HE21 | 1:A:35:LEU:H | 3 | 0.66 |
| (1,46) | 1:A:16:GLN:HE22 | 1:A:35:LEU:H | 3 | 0.66 |
| (1,401) | 1:A:68:GLY:H | 1:A:159:ALA:H | 16 | 0.66 |
| (1,244) | 1:A:46:PHE:H | 1:A:48:LEU:H | 6 | 0.66 |
| (1,1151) | 1:A:172:PHE:HD1 | 1:A:173:ASP:H | 1 | 0.66 |
| (1,1151) | 1:A:172:PHE:HD2 | 1:A:173:ASP:H | 1 | 0.66 |
| (8,2) | 1:A:35:LEU:H | 1:A:39:LEU:HD21 | 10 | 0.65 |
| (8,2) | 1:A:35:LEU:H | 1:A:39:LEU:HD22 | 10 | 0.65 |
| (8,2) | 1:A:35:LEU:H | 1:A:39:LEU:HD23 | 10 | 0.65 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG11 | 1:A:160:PHE:HE1 | 8 | 0.65 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG11 | 1:A:160:PHE:HE2 | 8 | 0.65 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG12 | 1:A:160:PHE:HE1 | 8 | 0.65 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG12 | 1:A:160:PHE:HE2 | 8 | 0.65 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG13 | 1:A:160:PHE:HE1 | 8 | 0.65 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG13 | 1:A:160:PHE:HE2 | 8 | 0.65 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD11 | 11 | 0.65 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD12 | 11 | 0.65 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD13 | 11 | 0.65 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD11 | 11 | 0.65 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD12 | 11 | 0.65 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD13 | 11 | 0.65 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD11 | 11 | 0.65 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD12 | 11 | 0.65 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD13 | 11 | 0.65 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:H | 9 | 0.65 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:H | 9 | 0.65 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:H | 9 | 0.65 |
| (1,903) | 1:A:126:LYS:HD2 | 1:A:127:VAL:HB | 6 | 0.65 |
| (1,725) | 1:A:109:VAL:HA | 1:A:192:ALA:HA | 13 | 0.65 |
| (1,480) | 1:A:88:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB2 | 10 | 0.65 |
| (1,480) | 1:A:88:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB3 | 10 | 0.65 |
| (1,260) | 1:A:46:PHE:HE1 | 1:A:215:THR:HG21 | 10 | 0.65 |
| (1,260) | 1:A:46:PHE:HE1 | 1:A:215:THR:HG22 | 10 | 0.65 |
| (1,260) | 1:A:46:PHE:HE1 | 1:A:215:THR:HG23 | 10 | 0.65 |
| (1,260) | 1:A:46:PHE:HE2 | 1:A:215:THR:HG21 | 10 | 0.65 |
| (1,260) | 1:A:46:PHE:HE2 | 1:A:215:THR:HG22 | 10 | 0.65 |
| (1,260) | 1:A:46:PHE:HE2 | 1:A:215:THR:HG23 | 10 | 0.65 |
| (1,192) | 1:A:42:MET:HE1 | 1:A:61:ILE:HB | 6 | 0.65 |
| (1,192) | 1:A:42:MET:HE2 | 1:A:61:ILE:HB | 6 | 0.65 |
| (1,192) | 1:A:42:MET:HE3 | 1:A:61:ILE:HB | 6 | 0.65 |
| (1,1413) | 1:A:231:ILE:H | 1:A:232:LYS:HB3 | 11 | 0.65 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD11 | 2 | 0.65 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD12 | 2 | 0.65 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD13 | 2 | 0.65 |
| (1,1399) | 1:A:228:GLN:HA | 1:A:230:ASP:HB2 | 2 | 0.65 |
| (1,1399) | 1:A:228:GLN:HA | 1:A:230:ASP:HB3 | 2 | 0.65 |
| (1,1362) | 1:A:211:VAL:H | 1:A:227:SER:HA | 9 | 0.65 |
| (1,1362) | 1:A:211:VAL:H | 1:A:227:SER:HA | 11 | 0.65 |
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:230:ASP:HA | 5 | 0.65 |
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:230:ASP:HA | 5 | 0.65 |
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:230:ASP:HA | 5 | 0.65 |
| (1,1341) | 1:A:207:ASP:H | 1:A:213:TYR:HE1 | 3 | 0.65 |
| (1,1341) | 1:A:207:ASP:H | 1:A:213:TYR:HE2 | 3 | 0.65 |
| (1,1341) | 1:A:207:ASP:H | 1:A:213:TYR:HE1 | 6 | 0.65 |
| (1,1341) | 1:A:207:ASP:H | 1:A:213:TYR:HE2 | 6 | 0.65 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1288) | 1:A:198:HIS:H | 1:A:200:LEU:HG | 16 | 0.65 |
| (1,1217) | 1:A:180:ASP:HB2 | 1:A:182:SER:H | 6 | 0.65 |
| (1,1217) | 1:A:180:ASP:HB3 | 1:A:182:SER:H | 6 | 0.65 |
| (1,1217) | 1:A:180:ASP:HB2 | 1:A:182:SER:H | 13 | 0.65 |
| (1,1217) | 1:A:180:ASP:HB3 | 1:A:182:SER:H | 13 | 0.65 |
| (1,1161) | 1:A:173:ASP:H | 1:A:175:ASP:H | 1 | 0.65 |
| (1,1151) | 1:A:172:PHE:HD1 | 1:A:173:ASP:H | 3 | 0.65 |
| (1,1151) | 1:A:172:PHE:HD2 | 1:A:173:ASP:H | 3 | 0.65 |
| (1,1050) | 1:A:155:THR:HA | 1:A:157:ALA:H | 9 | 0.65 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD11 | 15 | 0.64 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD12 | 15 | 0.64 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD13 | 15 | 0.64 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD11 | 15 | 0.64 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD12 | 15 | 0.64 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD13 | 15 | 0.64 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD11 | 15 | 0.64 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD12 | 15 | 0.64 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD13 | 15 | 0.64 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD1 | 2 | 0.64 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD2 | 2 | 0.64 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD1 | 2 | 0.64 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD2 | 2 | 0.64 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD1 | 2 | 0.64 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD2 | 2 | 0.64 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD1 | 9 | 0.64 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD2 | 9 | 0.64 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD1 | 9 | 0.64 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD2 | 9 | 0.64 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD1 | 9 | 0.64 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD2 | 9 | 0.64 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG11 | 1:A:138:PHE:H | 14 | 0.64 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG12 | 1:A:138:PHE:H | 14 | 0.64 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG13 | 1:A:138:PHE:H | 14 | 0.64 |
| (5,1) | 1:A:66:ARG:NH1 | 1:A:71:ASP:OD2 | 14 | 0.64 |
| (4,17) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:143:HIS:NE2 | 6 | 0.64 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG21 | 7 | 0.64 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG22 | 7 | 0.64 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG23 | 7 | 0.64 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG21 | 15 | 0.64 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG22 | 15 | 0.64 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG23 | 15 | 0.64 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB2 | 1:A:118:LYS:HE2 | 4 | 0.64 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB2 | 1:A:118:LYS:HE3 | 4 | 0.64 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB3 | 1:A:118:LYS:HE2 | 4 | 0.64 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB3 | 1:A:118:LYS:HE3 | 4 | 0.64 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB2 | 1:A:118:LYS:HE2 | 7 | 0.64 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB2 | 1:A:118:LYS:HE3 | 7 | 0.64 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB3 | 1:A:118:LYS:HE2 | 7 | 0.64 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB3 | 1:A:118:LYS:HE3 | 7 | 0.64 |
| (1,757) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:115:MET:HB2 | 6 | 0.64 |
| (1,757) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:115:MET:HB2 | 7 | 0.64 |
| (1,712) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:188:PHE:HD1 | 1 | 0.64 |
| (1,712) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:188:PHE:HD2 | 1 | 0.64 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG21 | 1:A:188:PHE:HD1 | 6 | 0.64 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG21 | 1:A:188:PHE:HD2 | 6 | 0.64 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG22 | 1:A:188:PHE:HD1 | 6 | 0.64 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG22 | 1:A:188:PHE:HD2 | 6 | 0.64 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG23 | 1:A:188:PHE:HD1 | 6 | 0.64 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG23 | 1:A:188:PHE:HD2 | 6 | 0.64 |
| (1,662) | 1:A:103:ILE:H | 1:A:104:THR:HB | 12 | 0.64 |
| (1,480) | 1:A:88:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB2 | 11 | 0.64 |
| (1,480) | 1:A:88:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB3 | 11 | 0.64 |
| (1,470) | 1:A:84:TRP:HZ2 | 1:A:168:GLY:HA2 | 16 | 0.64 |
| (1,468) | 1:A:84:TRP:HE1 | 1:A:200:LEU:H | 1 | 0.64 |
| (1,44) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:18:TYR:H | 14 | 0.64 |
| (1,336) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:MET:HG2 | 13 | 0.64 |
| (1,336) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:MET:HG3 | 13 | 0.64 |
| (1,304) | 1:A:57:ARG:H | 1:A:59:ILE:H | 8 | 0.64 |
| (1,244) | 1:A:46:PHE:H | 1:A:48:LEU:H | 3 | 0.64 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD11 | 9 | 0.64 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD12 | 9 | 0.64 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD13 | 9 | 0.64 |
| (1,1398) | 1:A:228:GLN:H | 1:A:230:ASP:HB2 | 6 | 0.64 |
| (1,1398) | 1:A:228:GLN:H | 1:A:230:ASP:HB3 | 6 | 0.64 |
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:230:ASP:HA | 9 | 0.64 |
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:230:ASP:HA | 9 | 0.64 |
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:230:ASP:HA | 9 | 0.64 |
| (1,1331) | 1:A:205:SER:H | 1:A:213:TYR:H | 12 | 0.64 |
| (1,1308) | 1:A:202:MET:H | 1:A:234:ILE:HD11 | 12 | 0.64 |
| (1,1308) | 1:A:202:MET:H | 1:A:234:ILE:HD12 | 12 | 0.64 |
| (1,1308) | 1:A:202:MET:H | 1:A:234:ILE:HD13 | 12 | 0.64 |
| (1,1217) | 1:A:180:ASP:HB2 | 1:A:182:SER:H | 10 | 0.64 |
| (1,1217) | 1:A:180:ASP:HB3 | 1:A:182:SER:H | 10 | 0.64 |
| (1,1024) | 1:A:143:HIS:HE1 | 1:A:160:PHE:HE1 | 11 | 0.64 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1024) | 1:A:143:HIS:HE1 | 1:A:160:PHE:HE2 | 11 | 0.64 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD1 | 8 | 0.63 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD2 | 8 | 0.63 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD1 | 8 | 0.63 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD2 | 8 | 0.63 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD1 | 8 | 0.63 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD2 | 8 | 0.63 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:H | 5 | 0.63 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:H | 5 | 0.63 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:H | 5 | 0.63 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:H | 7 | 0.63 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:H | 7 | 0.63 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:H | 7 | 0.63 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:H | 15 | 0.63 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:H | 15 | 0.63 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:H | 15 | 0.63 |
| (1,909) | 1:A:127:VAL:HA | 1:A:129:TRP:HD1 | 1 | 0.63 |
| (1,909) | 1:A:127:VAL:HA | 1:A:129:TRP:HD1 | 11 | 0.63 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG21 | 2 | 0.63 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG22 | 2 | 0.63 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG23 | 2 | 0.63 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG21 | 12 | 0.63 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG22 | 12 | 0.63 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG23 | 12 | 0.63 |
| (1,766) | 1:A:114:ASN:H | 1:A:115:MET:HB2 | 1 | 0.63 |
| (1,725) | 1:A:109:VAL:HA | 1:A:192:ALA:HA | 9 | 0.63 |
| (1,712) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:188:PHE:HD1 | 16 | 0.63 |
| (1,712) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:188:PHE:HD2 | 16 | 0.63 |
| (1,568) | 1:A:92:ARG:HE | 1:A:127:VAL:HB | 5 | 0.63 |
| (1,347) | 1:A:61:ILE:HA | 1:A:63:GLN:H | 2 | 0.63 |
| (1,304) | 1:A:57:ARG:H | 1:A:59:ILE:H | 6 | 0.63 |
| (1,183) | 1:A:42:MET:H | 1:A:44:LYS:H | 11 | 0.63 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE2 | 1:A:237:LEU:HB2 | 2 | 0.63 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE2 | 1:A:237:LEU:HB3 | 2 | 0.63 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE3 | 1:A:237:LEU:HB2 | 2 | 0.63 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE3 | 1:A:237:LEU:HB3 | 2 | 0.63 |
| (1,1413) | 1:A:231:ILE:H | 1:A:232:LYS:HB3 | 12 | 0.63 |
| (1,1386) | 1:A:223:ASN:H | 1:A:224:PHE:HB2 | 10 | 0.63 |
| (1,1386) | 1:A:223:ASN:H | 1:A:224:PHE:HB3 | 10 | 0.63 |
| (1,1386) | 1:A:223:ASN:H | 1:A:224:PHE:HB2 | 11 | 0.63 |
| (1,1386) | 1:A:223:ASN:H | 1:A:224:PHE:HB3 | 11 | 0.63 |
| (1,1386) | 1:A:223:ASN:H | 1:A:224:PHE:HB2 | 15 | 0.63 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1386) | 1:A:223:ASN:H | 1:A:224:PHE:HB3 | 15 | 0.63 |
| (1,1362) | 1:A:211:VAL:H | 1:A:227:SER:HA | 16 | 0.63 |
| (1,1331) | 1:A:205:SER:H | 1:A:213:TYR:H | 3 | 0.63 |
| (1,1241) | 1:A:189:LEU:H | 1:A:191:ALA:H | 9 | 0.63 |
| (1,1217) | 1:A:180:ASP:HB2 | 1:A:182:SER:H | 16 | 0.63 |
| (1,1217) | 1:A:180:ASP:HB3 | 1:A:182:SER:H | 16 | 0.63 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD11 | 6 | 0.63 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD12 | 6 | 0.63 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD13 | 6 | 0.63 |
| (1,1187) | 1:A:178:TRP:H | 1:A:178:TRP:HE1 | 1 | 0.63 |
| (1,1187) | 1:A:178:TRP:H | 1:A:178:TRP:HE1 | 14 | 0.63 |
| (1,1151) | 1:A:172:PHE:HD1 | 1:A:173:ASP:H | 11 | 0.63 |
| (1,1151) | 1:A:172:PHE:HD2 | 1:A:173:ASP:H | 11 | 0.63 |
| (1,1050) | 1:A:155:THR:HA | 1:A:157:ALA:H | 6 | 0.63 |
| (7,417) | 1:A:194:HIS:H | 1:A:211:VAL:HG11 | 4 | 0.62 |
| (7,417) | 1:A:194:HIS:H | 1:A:211:VAL:HG12 | 4 | 0.62 |
| (7,417) | 1:A:194:HIS:H | 1:A:211:VAL:HG13 | 4 | 0.62 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:188:PHE:HE1 | 1 | 0.62 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:188:PHE:HE2 | 1 | 0.62 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:188:PHE:HE1 | 1 | 0.62 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:188:PHE:HE2 | 1 | 0.62 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:188:PHE:HE1 | 1 | 0.62 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:188:PHE:HE2 | 1 | 0.62 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:188:PHE:HE1 | 11 | 0.62 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:188:PHE:HE2 | 11 | 0.62 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:188:PHE:HE1 | 11 | 0.62 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:188:PHE:HE2 | 11 | 0.62 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:188:PHE:HE1 | 11 | 0.62 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:188:PHE:HE2 | 11 | 0.62 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD1 | 12 | 0.62 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD2 | 12 | 0.62 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD1 | 12 | 0.62 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD2 | 12 | 0.62 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD1 | 12 | 0.62 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD2 | 12 | 0.62 |
| (1,99) | 1:A:23:TYR:HB2 | 1:A:72:VAL:H | 6 | 0.62 |
| (1,99) | 1:A:23:TYR:HB3 | 1:A:72:VAL:H | 6 | 0.62 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG21 | 16 | 0.62 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG22 | 16 | 0.62 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG23 | 16 | 0.62 |
| (1,785) | 1:A:116:TRP:H | 1:A:118:LYS:H | 6 | 0.62 |
| (1,766) | 1:A:114:ASN:H | 1:A:115:MET:HB2 | 5 | 0.62 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,606) | 1:A:96:TYR:HA | 1:A:102:HIS:HD2 | 10 | 0.62 |
| (1,532) | 1:A:91:TYR:HD1 | 1:A:126:LYS:HA | 13 | 0.62 |
| (1,532) | 1:A:91:TYR:HD2 | 1:A:126:LYS:HA | 13 | 0.62 |
| (1,506) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:133:ASP:H | 12 | 0.62 |
| (1,44) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:18:TYR:H | 6 | 0.62 |
| (1,347) | 1:A:61:ILE:HA | 1:A:63:GLN:H | 15 | 0.62 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE1 | 1:A:43:GLN:HG2 | 7 | 0.62 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE1 | 1:A:43:GLN:HG3 | 7 | 0.62 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE2 | 1:A:43:GLN:HG2 | 7 | 0.62 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE2 | 1:A:43:GLN:HG3 | 7 | 0.62 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE3 | 1:A:43:GLN:HG2 | 7 | 0.62 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE3 | 1:A:43:GLN:HG3 | 7 | 0.62 |
| (1,171) | 1:A:40:LYS:HB2 | 1:A:52:GLY:H | 11 | 0.62 |
| (1,171) | 1:A:40:LYS:HB3 | 1:A:52:GLY:H | 11 | 0.62 |
| (1,1406) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:HG2 | 4 | 0.62 |
| (1,1406) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:HG3 | 4 | 0.62 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD11 | 7 | 0.62 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD12 | 7 | 0.62 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD13 | 7 | 0.62 |
| (1,1399) | 1:A:228:GLN:HA | 1:A:230:ASP:HB2 | 14 | 0.62 |
| (1,1399) | 1:A:228:GLN:HA | 1:A:230:ASP:HB3 | 14 | 0.62 |
| (1,1362) | 1:A:211:VAL:H | 1:A:227:SER:HA | 7 | 0.62 |
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:230:ASP:HA | 10 | 0.62 |
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:230:ASP:HA | 10 | 0.62 |
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:230:ASP:HA | 10 | 0.62 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:228:GLN:H | 8 | 0.62 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:228:GLN:H | 8 | 0.62 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:228:GLN:H | 8 | 0.62 |
| (1,1217) | 1:A:180:ASP:HB2 | 1:A:182:SER:H | 3 | 0.62 |
| (1,1217) | 1:A:180:ASP:HB3 | 1:A:182:SER:H | 3 | 0.62 |
| (1,1199) | 1:A:178:TRP:HZ2 | 1:A:186:ILE:HG13 | 16 | 0.62 |
| (1,1161) | 1:A:173:ASP:H | 1:A:175:ASP:H | 4 | 0.62 |
| (1,1050) | 1:A:155:THR:HA | 1:A:157:ALA:H | 11 | 0.62 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:188:PHE:HE1 | 3 | 0.61 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:188:PHE:HE2 | 3 | 0.61 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:188:PHE:HE1 | 3 | 0.61 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:188:PHE:HE2 | 3 | 0.61 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:188:PHE:HE1 | 3 | 0.61 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:188:PHE:HE2 | 3 | 0.61 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:188:PHE:HE1 | 16 | 0.61 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:188:PHE:HE2 | 16 | 0.61 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:188:PHE:HE1 | 16 | 0.61 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:188:PHE:HE2 | 16 | 0.61 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:188:PHE:HE1 | 16 | 0.61 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:188:PHE:HE2 | 16 | 0.61 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD1 | 7 | 0.61 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD2 | 7 | 0.61 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD1 | 7 | 0.61 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD2 | 7 | 0.61 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD1 | 7 | 0.61 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD2 | 7 | 0.61 |
| (5,1) | 1:A:66:ARG:NH1 | 1:A:71:ASP:OD2 | 12 | 0.61 |
| (4,18) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:143:HIS:CG | 6 | 0.61 |
| (1,94) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:24:LEU:H | 5 | 0.61 |
| (1,903) | 1:A:126:LYS:HD2 | 1:A:127:VAL:HB | 13 | 0.61 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG21 | 13 | 0.61 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG22 | 13 | 0.61 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG23 | 13 | 0.61 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HB2 | 3 | 0.61 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HB3 | 3 | 0.61 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HB2 | 3 | 0.61 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HB3 | 3 | 0.61 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HB2 | 3 | 0.61 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HB3 | 3 | 0.61 |
| (1,757) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:115:MET:HB2 | 4 | 0.61 |
| (1,62) | 1:A:18:TYR:HB3 | 1:A:62:MET:HE1 | 7 | 0.61 |
| (1,62) | 1:A:18:TYR:HB3 | 1:A:62:MET:HE2 | 7 | 0.61 |
| (1,62) | 1:A:18:TYR:HB3 | 1:A:62:MET:HE3 | 7 | 0.61 |
| (1,56) | 1:A:18:TYR:HB2 | 1:A:20:LYS:H | 12 | 0.61 |
| (1,56) | 1:A:18:TYR:HB3 | 1:A:20:LYS:H | 12 | 0.61 |
| (1,559) | 1:A:92:ARG:HD2 | 1:A:128:VAL:H | 8 | 0.61 |
| (1,559) | 1:A:92:ARG:HD3 | 1:A:128:VAL:H | 8 | 0.61 |
| (1,36) | 1:A:15:ALA:HA | 1:A:62:MET:HE1 | 16 | 0.61 |
| (1,36) | 1:A:15:ALA:HA | 1:A:62:MET:HE2 | 16 | 0.61 |
| (1,36) | 1:A:15:ALA:HA | 1:A:62:MET:HE3 | 16 | 0.61 |
| (1,244) | 1:A:46:PHE:H | 1:A:48:LEU:H | 15 | 0.61 |
| (1,1413) | 1:A:231:ILE:H | 1:A:232:LYS:HB3 | 3 | 0.61 |
| (1,1406) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:HG2 | 7 | 0.61 |
| (1,1406) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:HG3 | 7 | 0.61 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD11 | 10 | 0.61 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD12 | 10 | 0.61 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD13 | 10 | 0.61 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD11 | 16 | 0.61 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD12 | 16 | 0.61 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD13 | 16 | 0.61 |
| (1,1399) | 1:A:228:GLN:HA | 1:A:230:ASP:HB2 | 5 | 0.61 |
| (1,1399) | 1:A:228:GLN:HA | 1:A:230:ASP:HB3 | 5 | 0.61 |
| (1,1399) | 1:A:228:GLN:HA | 1:A:230:ASP:HB2 | 7 | 0.61 |
| (1,1399) | 1:A:228:GLN:HA | 1:A:230:ASP:HB3 | 7 | 0.61 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:228:GLN:H | 9 | 0.61 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:228:GLN:H | 9 | 0.61 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:228:GLN:H | 9 | 0.61 |
| (1,1307) | 1:A:202:MET:H | 1:A:202:MET:HE1 | 14 | 0.61 |
| (1,1307) | 1:A:202:MET:H | 1:A:202:MET:HE2 | 14 | 0.61 |
| (1,1307) | 1:A:202:MET:H | 1:A:202:MET:HE3 | 14 | 0.61 |
| (1,1241) | 1:A:189:LEU:H | 1:A:191:ALA:H | 10 | 0.61 |
| (1,1199) | 1:A:178:TRP:HZ2 | 1:A:186:ILE:HG13 | 2 | 0.61 |
| (1,1199) | 1:A:178:TRP:HZ2 | 1:A:186:ILE:HG13 | 13 | 0.61 |
| (1,1187) | 1:A:178:TRP:H | 1:A:178:TRP:HE1 | 13 | 0.61 |
| (1,1181) | 1:A:177:ARG:H | 1:A:186:ILE:H | 2 | 0.61 |
| (1,1151) | 1:A:172:PHE:HD1 | 1:A:173:ASP:H | 5 | 0.61 |
| (1,1151) | 1:A:172:PHE:HD2 | 1:A:173:ASP:H | 5 | 0.61 |
| (1,1098) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:169:ASP:H | 1 | 0.61 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD11 | 16 | 0.61 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD12 | 16 | 0.61 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD13 | 16 | 0.61 |
| (7,65) | 1:A:56:SER:H | 1:A:58:VAL:HG21 | 13 | 0.6 |
| (7,65) | 1:A:56:SER:H | 1:A:58:VAL:HG22 | 13 | 0.6 |
| (7,65) | 1:A:56:SER:H | 1:A:58:VAL:HG23 | 13 | 0.6 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG11 | 7 | 0.6 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG12 | 7 | 0.6 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG13 | 7 | 0.6 |
| (1,467) | 1:A:84:TRP:HE1 | 1:A:199:SER:HA | 5 | 0.6 |
| (1,452) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:237:LEU:HG | 15 | 0.6 |
| (1,452) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:237:LEU:HG | 15 | 0.6 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE1 | 1:A:43:GLN:HG2 | 1 | 0.6 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE1 | 1:A:43:GLN:HG3 | 1 | 0.6 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE2 | 1:A:43:GLN:HG2 | 1 | 0.6 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE2 | 1:A:43:GLN:HG3 | 1 | 0.6 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE3 | 1:A:43:GLN:HG2 | 1 | 0.6 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE3 | 1:A:43:GLN:HG3 | 1 | 0.6 |
| (1,1362) | 1:A:211:VAL:H | 1:A:227:SER:HA | 5 | 0.6 |
| (1,1330) | 1:A:205:SER:H | 1:A:212:MET:H | 16 | 0.6 |
| (1,1291) | 1:A:198:HIS:HE1 | 1:A:204:HIS:HA | 15 | 0.6 |
| (1,1217) | 1:A:180:ASP:HB2 | 1:A:182:SER:H | 5 | 0.6 |
| (1,1217) | 1:A:180:ASP:HB3 | 1:A:182:SER:H | 5 | 0.6 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1217) | 1:A:180:ASP:HB2 | 1:A:182:SER:H | 8 | 0.6 |
| (1,1217) | 1:A:180:ASP:HB3 | 1:A:182:SER:H | 8 | 0.6 |
| (1,1217) | 1:A:180:ASP:HB2 | 1:A:182:SER:H | 11 | 0.6 |
| (1,1217) | 1:A:180:ASP:HB3 | 1:A:182:SER:H | 11 | 0.6 |
| (1,1217) | 1:A:180:ASP:HB2 | 1:A:182:SER:H | 12 | 0.6 |
| (1,1217) | 1:A:180:ASP:HB3 | 1:A:182:SER:H | 12 | 0.6 |
| (1,1181) | 1:A:177:ARG:H | 1:A:186:ILE:H | 13 | 0.6 |
| (1,1151) | 1:A:172:PHE:HD1 | 1:A:173:ASP:H | 14 | 0.6 |
| (1,1151) | 1:A:172:PHE:HD2 | 1:A:173:ASP:H | 14 | 0.6 |
| (1,1098) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:169:ASP:H | 7 | 0.6 |
| (1,102) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:70:PRO:HB2 | 2 | 0.6 |
| (1,102) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:70:PRO:HB3 | 2 | 0.6 |
| (7,65) | 1:A:56:SER:H | 1:A:58:VAL:HG21 | 6 | 0.59 |
| (7,65) | 1:A:56:SER:H | 1:A:58:VAL:HG22 | 6 | 0.59 |
| (7,65) | 1:A:56:SER:H | 1:A:58:VAL:HG23 | 6 | 0.59 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD11 | 1:A:198:HIS:H | 11 | 0.59 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD12 | 1:A:198:HIS:H | 11 | 0.59 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD13 | 1:A:198:HIS:H | 11 | 0.59 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG11 | 5 | 0.59 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG12 | 5 | 0.59 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG13 | 5 | 0.59 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG11 | 8 | 0.59 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG12 | 8 | 0.59 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG13 | 8 | 0.59 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:H | 11 | 0.59 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:H | 11 | 0.59 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:H | 11 | 0.59 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:HB2 | 4 | 0.59 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:HB3 | 4 | 0.59 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:HB2 | 4 | 0.59 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:HB3 | 4 | 0.59 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:HB2 | 4 | 0.59 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:HB3 | 4 | 0.59 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:HB2 | 8 | 0.59 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:HB3 | 8 | 0.59 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:HB2 | 8 | 0.59 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:HB3 | 8 | 0.59 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:HB2 | 8 | 0.59 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:HB3 | 8 | 0.59 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG21 | 5 | 0.59 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG22 | 5 | 0.59 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG23 | 5 | 0.59 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG21 | 14 | 0.59 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG22 | 14 | 0.59 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG23 | 14 | 0.59 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB2 | 1:A:118:LYS:HE2 | 14 | 0.59 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB2 | 1:A:118:LYS:HE3 | 14 | 0.59 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB3 | 1:A:118:LYS:HE2 | 14 | 0.59 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB3 | 1:A:118:LYS:HE3 | 14 | 0.59 |
| (1,766) | 1:A:114:ASN:H | 1:A:115:MET:HB2 | 4 | 0.59 |
| (1,725) | 1:A:109:VAL:HA | 1:A:192:ALA:HA | 6 | 0.59 |
| (1,725) | 1:A:109:VAL:HA | 1:A:192:ALA:HA | 7 | 0.59 |
| (1,725) | 1:A:109:VAL:HA | 1:A:192:ALA:HA | 16 | 0.59 |
| (1,61) | 1:A:18:TYR:HB3 | 1:A:20:LYS:H | 12 | 0.59 |
| (1,452) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:237:LEU:HG | 2 | 0.59 |
| (1,452) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:237:LEU:HG | 2 | 0.59 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG2 | 1:A:163:GLY:HA2 | 12 | 0.59 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG2 | 1:A:163:GLY:HA3 | 12 | 0.59 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG3 | 1:A:163:GLY:HA2 | 12 | 0.59 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG3 | 1:A:163:GLY:HA3 | 12 | 0.59 |
| (1,401) | 1:A:68:GLY:H | 1:A:159:ALA:H | 4 | 0.59 |
| (1,244) | 1:A:46:PHE:H | 1:A:48:LEU:H | 1 | 0.59 |
| (1,183) | 1:A:42:MET:H | 1:A:44:LYS:H | 10 | 0.59 |
| (1,1413) | 1:A:231:ILE:H | 1:A:232:LYS:HB3 | 15 | 0.59 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD11 | 13 | 0.59 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD12 | 13 | 0.59 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD13 | 13 | 0.59 |
| (1,1241) | 1:A:189:LEU:H | 1:A:191:ALA:H | 11 | 0.59 |
| (1,1181) | 1:A:177:ARG:H | 1:A:186:ILE:H | 1 | 0.59 |
| (1,1066) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HG13 | 13 | 0.59 |
| (1,102) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:70:PRO:HB2 | 1 | 0.59 |
| (1,102) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:70:PRO:HB3 | 1 | 0.59 |
| (1,102) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:70:PRO:HB2 | 14 | 0.59 |
| (1,102) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:70:PRO:HB3 | 14 | 0.59 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD11 | 1:A:198:HIS:H | 12 | 0.58 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD12 | 1:A:198:HIS:H | 12 | 0.58 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD13 | 1:A:198:HIS:H | 12 | 0.58 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG11 | 6 | 0.58 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG12 | 6 | 0.58 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG13 | 6 | 0.58 |
| (5,1) | 1:A:66:ARG:NH1 | 1:A:71:ASP:OD2 | 7 | 0.58 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HE1 | 16 | 0.58 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HE2 | 16 | 0.58 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB3 | 1:A:238:TYR:HE1 | 16 | 0.58 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB3 | 1:A:238:TYR:HE2 | 16 | 0.58 |
| (1,725) | 1:A:109:VAL:HA | 1:A:192:ALA:HA | 3 | 0.58 |
| (1,725) | 1:A:109:VAL:HA | 1:A:192:ALA:HA | 11 | 0.58 |
| (1,606) | 1:A:96:TYR:HA | 1:A:102:HIS:HD2 | 5 | 0.58 |
| (1,44) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:18:TYR:H | 13 | 0.58 |
| (1,42) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:16:GLN:HE21 | 15 | 0.58 |
| (1,42) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:16:GLN:HE22 | 15 | 0.58 |
| (1,347) | 1:A:61:ILE:HA | 1:A:63:GLN:H | 8 | 0.58 |
| (1,299) | 1:A:56:SER:HB2 | 1:A:58:VAL:H | 9 | 0.58 |
| (1,272) | 1:A:49:PRO:HG2 | 1:A:50:ILE:HA | 8 | 0.58 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA2 | 1:A:206:SER:HB2 | 16 | 0.58 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA2 | 1:A:206:SER:HB3 | 16 | 0.58 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA3 | 1:A:206:SER:HB2 | 16 | 0.58 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA3 | 1:A:206:SER:HB3 | 16 | 0.58 |
| (1,1362) | 1:A:211:VAL:H | 1:A:227:SER:HA | 2 | 0.58 |
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:230:ASP:HA | 15 | 0.58 |
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:230:ASP:HA | 15 | 0.58 |
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:230:ASP:HA | 15 | 0.58 |
| (1,1347) | 1:A:209:ASN:HD21 | 1:A:210:ALA:HB1 | 14 | 0.58 |
| (1,1347) | 1:A:209:ASN:HD21 | 1:A:210:ALA:HB2 | 14 | 0.58 |
| (1,1347) | 1:A:209:ASN:HD21 | 1:A:210:ALA:HB3 | 14 | 0.58 |
| (1,1347) | 1:A:209:ASN:HD22 | 1:A:210:ALA:HB1 | 14 | 0.58 |
| (1,1347) | 1:A:209:ASN:HD22 | 1:A:210:ALA:HB2 | 14 | 0.58 |
| (1,1347) | 1:A:209:ASN:HD22 | 1:A:210:ALA:HB3 | 14 | 0.58 |
| (1,1217) | 1:A:180:ASP:HB2 | 1:A:182:SER:H | 2 | 0.58 |
| (1,1217) | 1:A:180:ASP:HB3 | 1:A:182:SER:H | 2 | 0.58 |
| (1,1151) | 1:A:172:PHE:HD1 | 1:A:173:ASP:H | 6 | 0.58 |
| (1,1151) | 1:A:172:PHE:HD2 | 1:A:173:ASP:H | 6 | 0.58 |
| (1,1151) | 1:A:172:PHE:HD1 | 1:A:173:ASP:H | 13 | 0.58 |
| (1,1151) | 1:A:172:PHE:HD2 | 1:A:173:ASP:H | 13 | 0.58 |
| (1,1125) | 1:A:165:GLY:H | 1:A:167:GLY:H | 12 | 0.58 |
| (1,1098) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:169:ASP:H | 3 | 0.58 |
| (1,1080) | 1:A:158:HIS:H | 1:A:158:HIS:HE1 | 15 | 0.58 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD11 | 2 | 0.58 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD12 | 2 | 0.58 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD13 | 2 | 0.58 |
| (1,1050) | 1:A:155:THR:HA | 1:A:157:ALA:H | 4 | 0.58 |
| (1,102) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:70:PRO:HB2 | 4 | 0.58 |
| (1,102) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:70:PRO:HB3 | 4 | 0.58 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG11 | 1:A:160:PHE:HE1 | 2 | 0.57 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG11 | 1:A:160:PHE:HE2 | 2 | 0.57 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG12 | 1:A:160:PHE:HE1 | 2 | 0.57 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG12 | 1:A:160:PHE:HE2 | 2 | 0.57 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG13 | 1:A:160:PHE:HE1 | 2 | 0.57 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG13 | 1:A:160:PHE:HE2 | 2 | 0.57 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD11 | 1:A:198:HIS:H | 10 | 0.57 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD12 | 1:A:198:HIS:H | 10 | 0.57 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD13 | 1:A:198:HIS:H | 10 | 0.57 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD11 | 1:A:198:HIS:H | 13 | 0.57 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD12 | 1:A:198:HIS:H | 13 | 0.57 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD13 | 1:A:198:HIS:H | 13 | 0.57 |
| (7,341) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:226:LEU:HD21 | 16 | 0.57 |
| (7,341) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:226:LEU:HD22 | 16 | 0.57 |
| (7,341) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:226:LEU:HD23 | 16 | 0.57 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:188:PHE:HE1 | 12 | 0.57 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:188:PHE:HE2 | 12 | 0.57 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:188:PHE:HE1 | 12 | 0.57 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:188:PHE:HE2 | 12 | 0.57 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:188:PHE:HE1 | 12 | 0.57 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:188:PHE:HE2 | 12 | 0.57 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:188:PHE:HE1 | 13 | 0.57 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:188:PHE:HE2 | 13 | 0.57 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:188:PHE:HE1 | 13 | 0.57 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:188:PHE:HE2 | 13 | 0.57 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:188:PHE:HE1 | 13 | 0.57 |
| (7,279) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:188:PHE:HE2 | 13 | 0.57 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD1 | 5 | 0.57 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD2 | 5 | 0.57 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD1 | 5 | 0.57 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD2 | 5 | 0.57 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD1 | 5 | 0.57 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD2 | 5 | 0.57 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:H | 14 | 0.57 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:H | 14 | 0.57 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:H | 14 | 0.57 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:H | 16 | 0.57 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:H | 16 | 0.57 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:H | 16 | 0.57 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:HB2 | 15 | 0.57 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:HB3 | 15 | 0.57 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:HB2 | 15 | 0.57 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:HB3 | 15 | 0.57 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:HB2 | 15 | 0.57 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:HB3 | 15 | 0.57 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (6,1) | 1:A:155:THR:HG1 | 1:A:154:ASN:OD1 | 2 | 0.57 |
| (1,99) | 1:A:23:TYR:HB2 | 1:A:72:VAL:H | 3 | 0.57 |
| (1,99) | 1:A:23:TYR:HB3 | 1:A:72:VAL:H | 3 | 0.57 |
| (1,99) | 1:A:23:TYR:HB2 | 1:A:72:VAL:H | 8 | 0.57 |
| (1,99) | 1:A:23:TYR:HB3 | 1:A:72:VAL:H | 8 | 0.57 |
| (1,909) | 1:A:127:VAL:HA | 1:A:129:TRP:HD1 | 3 | 0.57 |
| (1,909) | 1:A:127:VAL:HA | 1:A:129:TRP:HD1 | 16 | 0.57 |
| (1,903) | 1:A:126:LYS:HD2 | 1:A:127:VAL:HB | 5 | 0.57 |
| (1,725) | 1:A:109:VAL:HA | 1:A:192:ALA:HA | 1 | 0.57 |
| (1,725) | 1:A:109:VAL:HA | 1:A:192:ALA:HA | 10 | 0.57 |
| (1,630) | 1:A:98:ARG:H | 1:A:99:ASP:HB2 | 2 | 0.57 |
| (1,630) | 1:A:98:ARG:H | 1:A:99:ASP:HB3 | 2 | 0.57 |
| (1,568) | 1:A:92:ARG:HE | 1:A:127:VAL:HB | 6 | 0.57 |
| (1,480) | 1:A:88:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB2 | 9 | 0.57 |
| (1,480) | 1:A:88:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB3 | 9 | 0.57 |
| (1,468) | 1:A:84:TRP:HE1 | 1:A:200:LEU:H | 4 | 0.57 |
| (1,468) | 1:A:84:TRP:HE1 | 1:A:200:LEU:H | 5 | 0.57 |
| (1,44) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:18:TYR:H | 9 | 0.57 |
| (1,347) | 1:A:61:ILE:HA | 1:A:63:GLN:H | 10 | 0.57 |
| (1,27) | 1:A:14:GLN:H | 1:A:16:GLN:H | 14 | 0.57 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA2 | 1:A:206:SER:HB2 | 13 | 0.57 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA2 | 1:A:206:SER:HB3 | 13 | 0.57 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA3 | 1:A:206:SER:HB2 | 13 | 0.57 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA3 | 1:A:206:SER:HB3 | 13 | 0.57 |
| (1,213) | 1:A:43:GLN:HA | 1:A:48:LEU:H | 5 | 0.57 |
| (1,213) | 1:A:43:GLN:HA | 1:A:48:LEU:H | 16 | 0.57 |
| (1,1413) | 1:A:231:ILE:H | 1:A:232:LYS:HB3 | 2 | 0.57 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD11 | 5 | 0.57 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD12 | 5 | 0.57 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD13 | 5 | 0.57 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD11 | 15 | 0.57 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD12 | 15 | 0.57 |
| (1,1403) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HD13 | 15 | 0.57 |
| (1,1399) | 1:A:228:GLN:HA | 1:A:230:ASP:HB2 | 9 | 0.57 |
| (1,1399) | 1:A:228:GLN:HA | 1:A:230:ASP:HB3 | 9 | 0.57 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:225:LYS:HD2 | 5 | 0.57 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:225:LYS:HD3 | 5 | 0.57 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:225:LYS:HD2 | 5 | 0.57 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:225:LYS:HD3 | 5 | 0.57 |
| (1,1386) | 1:A:223:ASN:H | 1:A:224:PHE:HB2 | 16 | 0.57 |
| (1,1386) | 1:A:223:ASN:H | 1:A:224:PHE:HB3 | 16 | 0.57 |
| (1,1360) | 1:A:211:VAL:H | 1:A:213:TYR:H | 16 | 0.57 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1217) | 1:A:180:ASP:HB2 | 1:A:182:SER:H | 1 | 0.57 |
| (1,1217) | 1:A:180:ASP:HB3 | 1:A:182:SER:H | 1 | 0.57 |
| (1,1181) | 1:A:177:ARG:H | 1:A:186:ILE:H | 16 | 0.57 |
| (1,1161) | 1:A:173:ASP:H | 1:A:175:ASP:H | 14 | 0.57 |
| (1,102) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:70:PRO:HB2 | 3 | 0.57 |
| (1,102) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:70:PRO:HB3 | 3 | 0.57 |
| (1,102) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:70:PRO:HB2 | 7 | 0.57 |
| (1,102) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:70:PRO:HB3 | 7 | 0.57 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG11 | 10 | 0.56 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG12 | 10 | 0.56 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG13 | 10 | 0.56 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG11 | 12 | 0.56 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG12 | 12 | 0.56 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG13 | 12 | 0.56 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG11 | 1:A:137:GLY:HA2 | 10 | 0.56 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG11 | 1:A:137:GLY:HA3 | 10 | 0.56 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG12 | 1:A:137:GLY:HA2 | 10 | 0.56 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG12 | 1:A:137:GLY:HA3 | 10 | 0.56 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG13 | 1:A:137:GLY:HA2 | 10 | 0.56 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG13 | 1:A:137:GLY:HA3 | 10 | 0.56 |
| (7,18) | 1:A:24:LEU:HD21 | 1:A:72:VAL:HB | 8 | 0.56 |
| (7,18) | 1:A:24:LEU:HD22 | 1:A:72:VAL:HB | 8 | 0.56 |
| (7,18) | 1:A:24:LEU:HD23 | 1:A:72:VAL:HB | 8 | 0.56 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:H | 1 | 0.56 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:H | 1 | 0.56 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:H | 1 | 0.56 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:HB2 | 2 | 0.56 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:HB3 | 2 | 0.56 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:HB2 | 2 | 0.56 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:HB3 | 2 | 0.56 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:HB2 | 2 | 0.56 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:HB3 | 2 | 0.56 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HB2 | 13 | 0.56 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HB3 | 13 | 0.56 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HB2 | 13 | 0.56 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HB3 | 13 | 0.56 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HB2 | 13 | 0.56 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HB3 | 13 | 0.56 |
| (1,630) | 1:A:98:ARG:H | 1:A:99:ASP:HB2 | 15 | 0.56 |
| (1,630) | 1:A:98:ARG:H | 1:A:99:ASP:HB3 | 15 | 0.56 |
| (1,53) | 1:A:18:TYR:H | 1:A:21:ARG:HG2 | 3 | 0.56 |
| (1,514) | 1:A:91:TYR:H | 1:A:126:LYS:HA | 13 | 0.56 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,486) | 1:A:89:VAL:H | 1:A:123:HIS:HD2 | 12 | 0.56 |
| (1,480) | 1:A:88:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB2 | 3 | 0.56 |
| (1,480) | 1:A:88:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB3 | 3 | 0.56 |
| (1,480) | 1:A:88:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB2 | 6 | 0.56 |
| (1,480) | 1:A:88:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB3 | 6 | 0.56 |
| (1,480) | 1:A:88:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB2 | 8 | 0.56 |
| (1,480) | 1:A:88:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB3 | 8 | 0.56 |
| (1,292) | 1:A:55:ASN:H | 1:A:58:VAL:H | 9 | 0.56 |
| (1,257) | 1:A:46:PHE:HE1 | 1:A:61:ILE:HA | 15 | 0.56 |
| (1,257) | 1:A:46:PHE:HE2 | 1:A:61:ILE:HA | 15 | 0.56 |
| (1,244) | 1:A:46:PHE:H | 1:A:48:LEU:H | 7 | 0.56 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE2 | 1:A:237:LEU:HB2 | 6 | 0.56 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE2 | 1:A:237:LEU:HB3 | 6 | 0.56 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE3 | 1:A:237:LEU:HB2 | 6 | 0.56 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE3 | 1:A:237:LEU:HB3 | 6 | 0.56 |
| (1,1386) | 1:A:223:ASN:H | 1:A:224:PHE:HB2 | 5 | 0.56 |
| (1,1386) | 1:A:223:ASN:H | 1:A:224:PHE:HB3 | 5 | 0.56 |
| (1,1360) | 1:A:211:VAL:H | 1:A:213:TYR:H | 10 | 0.56 |
| (1,1241) | 1:A:189:LEU:H | 1:A:191:ALA:H | 12 | 0.56 |
| (1,1187) | 1:A:178:TRP:H | 1:A:178:TRP:HE1 | 3 | 0.56 |
| (1,1181) | 1:A:177:ARG:H | 1:A:186:ILE:H | 8 | 0.56 |
| (1,1060) | 1:A:156:LEU:HB3 | 1:A:178:TRP:HH2 | 3 | 0.56 |
| (7,73) | 1:A:58:VAL:HG11 | 1:A:62:MET:HE1 | 3 | 0.55 |
| (7,73) | 1:A:58:VAL:HG11 | 1:A:62:MET:HE2 | 3 | 0.55 |
| (7,73) | 1:A:58:VAL:HG11 | 1:A:62:MET:HE3 | 3 | 0.55 |
| (7,73) | 1:A:58:VAL:HG12 | 1:A:62:MET:HE1 | 3 | 0.55 |
| (7,73) | 1:A:58:VAL:HG12 | 1:A:62:MET:HE2 | 3 | 0.55 |
| (7,73) | 1:A:58:VAL:HG12 | 1:A:62:MET:HE3 | 3 | 0.55 |
| (7,73) | 1:A:58:VAL:HG13 | 1:A:62:MET:HE1 | 3 | 0.55 |
| (7,73) | 1:A:58:VAL:HG13 | 1:A:62:MET:HE2 | 3 | 0.55 |
| (7,73) | 1:A:58:VAL:HG13 | 1:A:62:MET:HE3 | 3 | 0.55 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG21 | 4 | 0.55 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG22 | 4 | 0.55 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG23 | 4 | 0.55 |
| (7,159) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:90:THR:H | 14 | 0.55 |
| (7,159) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:90:THR:H | 14 | 0.55 |
| (7,159) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:90:THR:H | 14 | 0.55 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:HB2 | 5 | 0.55 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:HB3 | 5 | 0.55 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:HB2 | 5 | 0.55 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:HB3 | 5 | 0.55 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:HB2 | 5 | 0.55 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:HB3 | 5 | 0.55 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:HB2 | 11 | 0.55 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:HB3 | 11 | 0.55 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:HB2 | 11 | 0.55 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:HB3 | 11 | 0.55 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:HB2 | 11 | 0.55 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:HB3 | 11 | 0.55 |
| (6,2) | 1:A:90:THR:HG1 | 1:A:133:ASP:OD2 | 15 | 0.55 |
| (3,4) | 3:A:301:CA:CA | 1:A:169:ASP:OD2 | 8 | 0.55 |
| (1,909) | 1:A:127:VAL:HA | 1:A:129:TRP:HD1 | 14 | 0.55 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG21 | 3 | 0.55 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG22 | 3 | 0.55 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG23 | 3 | 0.55 |
| (1,802) | 1:A:116:TRP:HE1 | 1:A:202:MET:HB2 | 13 | 0.55 |
| (1,802) | 1:A:116:TRP:HE1 | 1:A:202:MET:HB3 | 13 | 0.55 |
| (1,785) | 1:A:116:TRP:H | 1:A:118:LYS:H | 10 | 0.55 |
| (1,58) | 1:A:18:TYR:HB2 | 1:A:20:LYS:H | 3 | 0.55 |
| (1,467) | 1:A:84:TRP:HE1 | 1:A:199:SER:HA | 7 | 0.55 |
| (1,46) | 1:A:16:GLN:HE21 | 1:A:35:LEU:H | 10 | 0.55 |
| (1,46) | 1:A:16:GLN:HE22 | 1:A:35:LEU:H | 10 | 0.55 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG2 | 1:A:163:GLY:HA2 | 8 | 0.55 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG2 | 1:A:163:GLY:HA3 | 8 | 0.55 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG3 | 1:A:163:GLY:HA2 | 8 | 0.55 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG3 | 1:A:163:GLY:HA3 | 8 | 0.55 |
| (1,244) | 1:A:46:PHE:H | 1:A:48:LEU:H | 2 | 0.55 |
| (1,244) | 1:A:46:PHE:H | 1:A:48:LEU:H | 14 | 0.55 |
| (1,212) | 1:A:43:GLN:H | 1:A:45:PHE:H | 16 | 0.55 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE2 | 1:A:237:LEU:HB2 | 5 | 0.55 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE2 | 1:A:237:LEU:HB3 | 5 | 0.55 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE3 | 1:A:237:LEU:HB2 | 5 | 0.55 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE3 | 1:A:237:LEU:HB3 | 5 | 0.55 |
| (1,1406) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:HG2 | 10 | 0.55 |
| (1,1406) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:HG3 | 10 | 0.55 |
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:230:ASP:HA | 7 | 0.55 |
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:230:ASP:HA | 7 | 0.55 |
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:230:ASP:HA | 7 | 0.55 |
| (1,1217) | 1:A:180:ASP:HB2 | 1:A:182:SER:H | 14 | 0.55 |
| (1,1217) | 1:A:180:ASP:HB3 | 1:A:182:SER:H | 14 | 0.55 |
| (1,1217) | 1:A:180:ASP:HB2 | 1:A:182:SER:H | 15 | 0.55 |
| (1,1217) | 1:A:180:ASP:HB3 | 1:A:182:SER:H | 15 | 0.55 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD11 | 5 | 0.55 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD12 | 5 | 0.55 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD13 | 5 | 0.55 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD11 | 8 | 0.55 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD12 | 8 | 0.55 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD13 | 8 | 0.55 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG11 | 9 | 0.54 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG12 | 9 | 0.54 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG13 | 9 | 0.54 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD11 | 10 | 0.54 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD12 | 10 | 0.54 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD13 | 10 | 0.54 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD11 | 10 | 0.54 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD12 | 10 | 0.54 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD13 | 10 | 0.54 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD11 | 10 | 0.54 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD12 | 10 | 0.54 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD13 | 10 | 0.54 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG21 | 9 | 0.54 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG22 | 9 | 0.54 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG23 | 9 | 0.54 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:H | 6 | 0.54 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:H | 6 | 0.54 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:H | 6 | 0.54 |
| (1,903) | 1:A:126:LYS:HD2 | 1:A:127:VAL:HB | 2 | 0.54 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG21 | 4 | 0.54 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG22 | 4 | 0.54 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG23 | 4 | 0.54 |
| (1,819) | 1:A:117:GLY:HA2 | 1:A:122:LEU:H | 6 | 0.54 |
| (1,766) | 1:A:114:ASN:H | 1:A:115:MET:HB2 | 15 | 0.54 |
| (1,693) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:107:ARG:H | 5 | 0.54 |
| (1,468) | 1:A:84:TRP:HE1 | 1:A:200:LEU:H | 2 | 0.54 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG2 | 1:A:163:GLY:HA2 | 3 | 0.54 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG2 | 1:A:163:GLY:HA3 | 3 | 0.54 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG3 | 1:A:163:GLY:HA2 | 3 | 0.54 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG3 | 1:A:163:GLY:HA3 | 3 | 0.54 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG2 | 1:A:163:GLY:HA2 | 14 | 0.54 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG2 | 1:A:163:GLY:HA3 | 14 | 0.54 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG3 | 1:A:163:GLY:HA2 | 14 | 0.54 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG3 | 1:A:163:GLY:HA3 | 14 | 0.54 |
| (1,384) | 1:A:67:CYS:HA | 1:A:69:VAL:H | 6 | 0.54 |
| (1,169) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:52:GLY:HA2 | 5 | 0.54 |
| (1,1399) | 1:A:228:GLN:HA | 1:A:230:ASP:HB2 | 10 | 0.54 |
| (1,1399) | 1:A:228:GLN:HA | 1:A:230:ASP:HB3 | 10 | 0.54 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:225:LYS:HD2 | 11 | 0.54 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:225:LYS:HD3 | 11 | 0.54 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:225:LYS:HD2 | 11 | 0.54 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:225:LYS:HD3 | 11 | 0.54 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:225:LYS:HD2 | 12 | 0.54 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:225:LYS:HD3 | 12 | 0.54 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:225:LYS:HD2 | 12 | 0.54 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:225:LYS:HD3 | 12 | 0.54 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:228:GLN:H | 4 | 0.54 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:228:GLN:H | 4 | 0.54 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:228:GLN:H | 4 | 0.54 |
| (1,1305) | 1:A:201:GLY:H | 1:A:202:MET:HB2 | 14 | 0.54 |
| (1,1305) | 1:A:201:GLY:H | 1:A:202:MET:HB3 | 14 | 0.54 |
| (1,1241) | 1:A:189:LEU:H | 1:A:191:ALA:H | 3 | 0.54 |
| (1,1241) | 1:A:189:LEU:H | 1:A:191:ALA:H | 7 | 0.54 |
| (1,1187) | 1:A:178:TRP:H | 1:A:178:TRP:HE1 | 9 | 0.54 |
| (1,1151) | 1:A:172:PHE:HD1 | 1:A:173:ASP:H | 7 | 0.54 |
| (1,1151) | 1:A:172:PHE:HD2 | 1:A:173:ASP:H | 7 | 0.54 |
| (1,1151) | 1:A:172:PHE:HD1 | 1:A:173:ASP:H | 12 | 0.54 |
| (1,1151) | 1:A:172:PHE:HD2 | 1:A:173:ASP:H | 12 | 0.54 |
| (1,1060) | 1:A:156:LEU:HB3 | 1:A:178:TRP:HH2 | 9 | 0.54 |
| (1,1054) | 1:A:155:THR:HG21 | 1:A:158:HIS:HA | 11 | 0.54 |
| (1,1054) | 1:A:155:THR:HG22 | 1:A:158:HIS:HA | 11 | 0.54 |
| (1,1054) | 1:A:155:THR:HG23 | 1:A:158:HIS:HA | 11 | 0.54 |
| (1,1018) | 1:A:141:GLY:H | 1:A:150:ASP:H | 5 | 0.54 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG11 | 1:A:160:PHE:HE1 | 4 | 0.53 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG11 | 1:A:160:PHE:HE2 | 4 | 0.53 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG12 | 1:A:160:PHE:HE1 | 4 | 0.53 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG12 | 1:A:160:PHE:HE2 | 4 | 0.53 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG13 | 1:A:160:PHE:HE1 | 4 | 0.53 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG13 | 1:A:160:PHE:HE2 | 4 | 0.53 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD11 | 1:A:198:HIS:H | 6 | 0.53 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD12 | 1:A:198:HIS:H | 6 | 0.53 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD13 | 1:A:198:HIS:H | 6 | 0.53 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD11 | 6 | 0.53 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD12 | 6 | 0.53 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD13 | 6 | 0.53 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD11 | 6 | 0.53 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD12 | 6 | 0.53 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD13 | 6 | 0.53 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD11 | 6 | 0.53 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD12 | 6 | 0.53 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD13 | 6 | 0.53 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG11 | 1:A:138:PHE:H | 9 | 0.53 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG12 | 1:A:138:PHE:H | 9 | 0.53 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG13 | 1:A:138:PHE:H | 9 | 0.53 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG11 | 1:A:137:GLY:HA2 | 13 | 0.53 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG11 | 1:A:137:GLY:HA3 | 13 | 0.53 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG12 | 1:A:137:GLY:HA2 | 13 | 0.53 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG12 | 1:A:137:GLY:HA3 | 13 | 0.53 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG13 | 1:A:137:GLY:HA2 | 13 | 0.53 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG13 | 1:A:137:GLY:HA3 | 13 | 0.53 |
| (1,951) | 1:A:134:ILE:HD11 | 1:A:135:MET:H | 2 | 0.53 |
| (1,951) | 1:A:134:ILE:HD12 | 1:A:135:MET:H | 2 | 0.53 |
| (1,951) | 1:A:134:ILE:HD13 | 1:A:135:MET:H | 2 | 0.53 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB2 | 1:A:125:ARG:HD2 | 6 | 0.53 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB2 | 1:A:125:ARG:HD3 | 6 | 0.53 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB3 | 1:A:125:ARG:HD2 | 6 | 0.53 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB3 | 1:A:125:ARG:HD3 | 6 | 0.53 |
| (1,891) | 1:A:124:PHE:HD1 | 1:A:125:ARG:H | 11 | 0.53 |
| (1,891) | 1:A:124:PHE:HD2 | 1:A:125:ARG:H | 11 | 0.53 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG21 | 8 | 0.53 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG22 | 8 | 0.53 |
| (1,834) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:231:ILE:HG23 | 8 | 0.53 |
| (1,725) | 1:A:109:VAL:HA | 1:A:192:ALA:HA | 5 | 0.53 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG21 | 1:A:188:PHE:HD1 | 1 | 0.53 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG21 | 1:A:188:PHE:HD2 | 1 | 0.53 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG22 | 1:A:188:PHE:HD1 | 1 | 0.53 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG22 | 1:A:188:PHE:HD2 | 1 | 0.53 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG23 | 1:A:188:PHE:HD1 | 1 | 0.53 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG23 | 1:A:188:PHE:HD2 | 1 | 0.53 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG21 | 1:A:188:PHE:HD1 | 12 | 0.53 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG21 | 1:A:188:PHE:HD2 | 12 | 0.53 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG22 | 1:A:188:PHE:HD1 | 12 | 0.53 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG22 | 1:A:188:PHE:HD2 | 12 | 0.53 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG23 | 1:A:188:PHE:HD1 | 12 | 0.53 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG23 | 1:A:188:PHE:HD2 | 12 | 0.53 |
| (1,514) | 1:A:91:TYR:H | 1:A:126:LYS:HA | 7 | 0.53 |
| (1,486) | 1:A:89:VAL:H | 1:A:123:HIS:HD2 | 14 | 0.53 |
| (1,480) | 1:A:88:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB2 | 7 | 0.53 |
| (1,480) | 1:A:88:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB3 | 7 | 0.53 |
| (1,480) | 1:A:88:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB2 | 16 | 0.53 |
| (1,480) | 1:A:88:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB3 | 16 | 0.53 |
| (1,468) | 1:A:84:TRP:HE1 | 1:A:200:LEU:H | 3 | 0.53 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,467) | 1:A:84:TRP:HE1 | 1:A:199:SER:HA | 3 | 0.53 |
| (1,452) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:237:LEU:HG | 11 | 0.53 |
| (1,452) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:237:LEU:HG | 11 | 0.53 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG2 | 1:A:163:GLY:HA2 | 16 | 0.53 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG2 | 1:A:163:GLY:HA3 | 16 | 0.53 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG3 | 1:A:163:GLY:HA2 | 16 | 0.53 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG3 | 1:A:163:GLY:HA3 | 16 | 0.53 |
| (1,400) | 1:A:68:GLY:H | 1:A:158:HIS:HB3 | 12 | 0.53 |
| (1,400) | 1:A:68:GLY:H | 1:A:158:HIS:HB3 | 16 | 0.53 |
| (1,304) | 1:A:57:ARG:H | 1:A:59:ILE:H | 15 | 0.53 |
| (1,252) | 1:A:46:PHE:HB2 | 1:A:61:ILE:HD11 | 13 | 0.53 |
| (1,252) | 1:A:46:PHE:HB2 | 1:A:61:ILE:HD12 | 13 | 0.53 |
| (1,252) | 1:A:46:PHE:HB2 | 1:A:61:ILE:HD13 | 13 | 0.53 |
| (1,252) | 1:A:46:PHE:HB3 | 1:A:61:ILE:HD11 | 13 | 0.53 |
| (1,252) | 1:A:46:PHE:HB3 | 1:A:61:ILE:HD12 | 13 | 0.53 |
| (1,252) | 1:A:46:PHE:HB3 | 1:A:61:ILE:HD13 | 13 | 0.53 |
| (1,166) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:41:GLU:HG2 | 11 | 0.53 |
| (1,1362) | 1:A:211:VAL:H | 1:A:227:SER:HA | 13 | 0.53 |
| (1,1308) | 1:A:202:MET:H | 1:A:234:ILE:HD11 | 8 | 0.53 |
| (1,1308) | 1:A:202:MET:H | 1:A:234:ILE:HD12 | 8 | 0.53 |
| (1,1308) | 1:A:202:MET:H | 1:A:234:ILE:HD13 | 8 | 0.53 |
| (1,1308) | 1:A:202:MET:H | 1:A:234:ILE:HD11 | 11 | 0.53 |
| (1,1308) | 1:A:202:MET:H | 1:A:234:ILE:HD12 | 11 | 0.53 |
| (1,1308) | 1:A:202:MET:H | 1:A:234:ILE:HD13 | 11 | 0.53 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD11 | 5 | 0.53 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD12 | 5 | 0.53 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD13 | 5 | 0.53 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD11 | 9 | 0.53 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD12 | 9 | 0.53 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD13 | 9 | 0.53 |
| (1,1199) | 1:A:178:TRP:HZ2 | 1:A:186:ILE:HG13 | 14 | 0.53 |
| (1,1187) | 1:A:178:TRP:H | 1:A:178:TRP:HE1 | 4 | 0.53 |
| (1,1151) | 1:A:172:PHE:HD1 | 1:A:173:ASP:H | 4 | 0.53 |
| (1,1151) | 1:A:172:PHE:HD2 | 1:A:173:ASP:H | 4 | 0.53 |
| (1,1084) | 1:A:158:HIS:HD2 | 1:A:171:HIS:H | 16 | 0.53 |
| (1,1050) | 1:A:155:THR:HA | 1:A:157:ALA:H | 15 | 0.53 |
| (1,1039) | 1:A:150:ASP:HB2 | 1:A:155:THR:HG21 | 16 | 0.53 |
| (1,1039) | 1:A:150:ASP:HB2 | 1:A:155:THR:HG22 | 16 | 0.53 |
| (1,1039) | 1:A:150:ASP:HB2 | 1:A:155:THR:HG23 | 16 | 0.53 |
| (1,1039) | 1:A:150:ASP:HB3 | 1:A:155:THR:HG21 | 16 | 0.53 |
| (1,1039) | 1:A:150:ASP:HB3 | 1:A:155:THR:HG22 | 16 | 0.53 |
| (1,1039) | 1:A:150:ASP:HB3 | 1:A:155:THR:HG23 | 16 | 0.53 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1018) | 1:A:141:GLY:H | 1:A:150:ASP:H | 1 | 0.53 |
| (1,1018) | 1:A:141:GLY:H | 1:A:150:ASP:H | 8 | 0.53 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD11 | 1:A:198:HIS:H | 8 | 0.52 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD12 | 1:A:198:HIS:H | 8 | 0.52 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD13 | 1:A:198:HIS:H | 8 | 0.52 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD11 | 1:A:198:HIS:H | 9 | 0.52 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD12 | 1:A:198:HIS:H | 9 | 0.52 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD13 | 1:A:198:HIS:H | 9 | 0.52 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG11 | 14 | 0.52 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG12 | 14 | 0.52 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG13 | 14 | 0.52 |
| (7,341) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:226:LEU:HD21 | 11 | 0.52 |
| (7,341) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:226:LEU:HD22 | 11 | 0.52 |
| (7,341) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:226:LEU:HD23 | 11 | 0.52 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD11 | 2 | 0.52 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD12 | 2 | 0.52 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD13 | 2 | 0.52 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD11 | 2 | 0.52 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD12 | 2 | 0.52 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD13 | 2 | 0.52 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD11 | 2 | 0.52 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD12 | 2 | 0.52 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD13 | 2 | 0.52 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD11 | 4 | 0.52 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD12 | 4 | 0.52 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD13 | 4 | 0.52 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD11 | 4 | 0.52 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD12 | 4 | 0.52 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD13 | 4 | 0.52 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD11 | 4 | 0.52 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD12 | 4 | 0.52 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD13 | 4 | 0.52 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD11 | 7 | 0.52 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD12 | 7 | 0.52 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD13 | 7 | 0.52 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD11 | 7 | 0.52 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD12 | 7 | 0.52 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD13 | 7 | 0.52 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD11 | 7 | 0.52 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD12 | 7 | 0.52 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD13 | 7 | 0.52 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD11 | 8 | 0.52 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD12 | 8 | 0.52 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD13 | 8 | 0.52 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD11 | 8 | 0.52 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD12 | 8 | 0.52 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD13 | 8 | 0.52 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD11 | 8 | 0.52 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD12 | 8 | 0.52 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD13 | 8 | 0.52 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD1 | 15 | 0.52 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD2 | 15 | 0.52 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD1 | 15 | 0.52 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD2 | 15 | 0.52 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD1 | 15 | 0.52 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD2 | 15 | 0.52 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:H | 3 | 0.52 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:H | 3 | 0.52 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:H | 3 | 0.52 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:H | 10 | 0.52 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:H | 10 | 0.52 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:H | 10 | 0.52 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HE1 | 1 | 0.52 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HE2 | 1 | 0.52 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB3 | 1:A:238:TYR:HE1 | 1 | 0.52 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB3 | 1:A:238:TYR:HE2 | 1 | 0.52 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB2 | 1:A:118:LYS:HE2 | 9 | 0.52 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB2 | 1:A:118:LYS:HE3 | 9 | 0.52 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB3 | 1:A:118:LYS:HE2 | 9 | 0.52 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB3 | 1:A:118:LYS:HE3 | 9 | 0.52 |
| (1,819) | 1:A:117:GLY:HA2 | 1:A:122:LEU:H | 5 | 0.52 |
| (1,693) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:107:ARG:H | 10 | 0.52 |
| (1,486) | 1:A:89:VAL:H | 1:A:123:HIS:HD2 | 6 | 0.52 |
| (1,486) | 1:A:89:VAL:H | 1:A:123:HIS:HD2 | 13 | 0.52 |
| (1,480) | 1:A:88:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB2 | 1 | 0.52 |
| (1,480) | 1:A:88:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB3 | 1 | 0.52 |
| (1,480) | 1:A:88:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB2 | 13 | 0.52 |
| (1,480) | 1:A:88:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB3 | 13 | 0.52 |
| (1,468) | 1:A:84:TRP:HE1 | 1:A:200:LEU:H | 7 | 0.52 |
| (1,467) | 1:A:84:TRP:HE1 | 1:A:199:SER:HA | 4 | 0.52 |
| (1,304) | 1:A:57:ARG:H | 1:A:59:ILE:H | 4 | 0.52 |
| (1,272) | 1:A:49:PRO:HG2 | 1:A:50:ILE:HA | 14 | 0.52 |
| (1,213) | 1:A:43:GLN:HA | 1:A:48:LEU:H | 4 | 0.52 |
| (1,213) | 1:A:43:GLN:HA | 1:A:48:LEU:H | 8 | 0.52 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,212) | 1:A:43:GLN:H | 1:A:45:PHE:H | 2 | 0.52 |
| (1,183) | 1:A:42:MET:H | 1:A:44:LYS:H | 6 | 0.52 |
| (1,169) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:52:GLY:HA2 | 4 | 0.52 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE2 | 1:A:237:LEU:HB2 | 13 | 0.52 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE2 | 1:A:237:LEU:HB3 | 13 | 0.52 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE3 | 1:A:237:LEU:HB2 | 13 | 0.52 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE3 | 1:A:237:LEU:HB3 | 13 | 0.52 |
| (1,1392) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:226:LEU:HA | 13 | 0.52 |
| (1,1392) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:226:LEU:HA | 13 | 0.52 |
| (1,1241) | 1:A:189:LEU:H | 1:A:191:ALA:H | 15 | 0.52 |
| (1,1181) | 1:A:177:ARG:H | 1:A:186:ILE:H | 5 | 0.52 |
| (1,1181) | 1:A:177:ARG:H | 1:A:186:ILE:H | 11 | 0.52 |
| (1,1147) | 1:A:172:PHE:HB2 | 1:A:173:ASP:H | 3 | 0.52 |
| (1,1080) | 1:A:158:HIS:H | 1:A:158:HIS:HE1 | 11 | 0.52 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD11 | 10 | 0.52 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD12 | 10 | 0.52 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD13 | 10 | 0.52 |
| (1,1060) | 1:A:156:LEU:HB3 | 1:A:178:TRP:HH2 | 6 | 0.52 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:56:SER:H | 15 | 0.51 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:56:SER:H | 15 | 0.51 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:56:SER:H | 15 | 0.51 |
| (7,417) | 1:A:194:HIS:H | 1:A:211:VAL:HG11 | 3 | 0.51 |
| (7,417) | 1:A:194:HIS:H | 1:A:211:VAL:HG12 | 3 | 0.51 |
| (7,417) | 1:A:194:HIS:H | 1:A:211:VAL:HG13 | 3 | 0.51 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD1 | 1 | 0.51 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD2 | 1 | 0.51 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD1 | 1 | 0.51 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD2 | 1 | 0.51 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD1 | 1 | 0.51 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD2 | 1 | 0.51 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD1 | 4 | 0.51 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD2 | 4 | 0.51 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD1 | 4 | 0.51 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD2 | 4 | 0.51 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD1 | 4 | 0.51 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD2 | 4 | 0.51 |
| (7,256) | 1:A:107:ARG:HG2 | 1:A:108:LEU:HD21 | 14 | 0.51 |
| (7,256) | 1:A:107:ARG:HG2 | 1:A:108:LEU:HD22 | 14 | 0.51 |
| (7,256) | 1:A:107:ARG:HG2 | 1:A:108:LEU:HD23 | 14 | 0.51 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG11 | 1:A:138:PHE:H | 2 | 0.51 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG12 | 1:A:138:PHE:H | 2 | 0.51 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG13 | 1:A:138:PHE:H | 2 | 0.51 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG21 | 8 | 0.51 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG22 | 8 | 0.51 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG23 | 8 | 0.51 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG21 | 14 | 0.51 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG22 | 14 | 0.51 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG23 | 14 | 0.51 |
| (7,18) | 1:A:24:LEU:HD21 | 1:A:72:VAL:HB | 16 | 0.51 |
| (7,18) | 1:A:24:LEU:HD22 | 1:A:72:VAL:HB | 16 | 0.51 |
| (7,18) | 1:A:24:LEU:HD23 | 1:A:72:VAL:HB | 16 | 0.51 |
| (1,909) | 1:A:127:VAL:HA | 1:A:129:TRP:HD1 | 8 | 0.51 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB2 | 1:A:125:ARG:HD2 | 2 | 0.51 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB2 | 1:A:125:ARG:HD3 | 2 | 0.51 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB3 | 1:A:125:ARG:HD2 | 2 | 0.51 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB3 | 1:A:125:ARG:HD3 | 2 | 0.51 |
| (1,725) | 1:A:109:VAL:HA | 1:A:192:ALA:HA | 4 | 0.51 |
| (1,692) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:106:ASP:HB2 | 16 | 0.51 |
| (1,692) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:106:ASP:HB3 | 16 | 0.51 |
| (1,606) | 1:A:96:TYR:HA | 1:A:102:HIS:HD2 | 11 | 0.51 |
| (1,532) | 1:A:91:TYR:HD1 | 1:A:126:LYS:HA | 7 | 0.51 |
| (1,532) | 1:A:91:TYR:HD2 | 1:A:126:LYS:HA | 7 | 0.51 |
| (1,468) | 1:A:84:TRP:HE1 | 1:A:200:LEU:H | 13 | 0.51 |
| (1,467) | 1:A:84:TRP:HE1 | 1:A:199:SER:HA | 1 | 0.51 |
| (1,467) | 1:A:84:TRP:HE1 | 1:A:199:SER:HA | 2 | 0.51 |
| (1,44) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:18:TYR:H | 3 | 0.51 |
| (1,401) | 1:A:68:GLY:H | 1:A:159:ALA:H | 14 | 0.51 |
| (1,257) | 1:A:46:PHE:HE1 | 1:A:61:ILE:HA | 10 | 0.51 |
| (1,257) | 1:A:46:PHE:HE2 | 1:A:61:ILE:HA | 10 | 0.51 |
| (1,196) | 1:A:42:MET:HE1 | 1:A:62:MET:HB2 | 13 | 0.51 |
| (1,196) | 1:A:42:MET:HE1 | 1:A:62:MET:HB3 | 13 | 0.51 |
| (1,196) | 1:A:42:MET:HE2 | 1:A:62:MET:HB2 | 13 | 0.51 |
| (1,196) | 1:A:42:MET:HE2 | 1:A:62:MET:HB3 | 13 | 0.51 |
| (1,196) | 1:A:42:MET:HE3 | 1:A:62:MET:HB2 | 13 | 0.51 |
| (1,196) | 1:A:42:MET:HE3 | 1:A:62:MET:HB3 | 13 | 0.51 |
| (1,1434) | 1:A:232:LYS:HB3 | 1:A:233:GLY:H | 12 | 0.51 |
| (1,1386) | 1:A:223:ASN:H | 1:A:224:PHE:HB2 | 3 | 0.51 |
| (1,1386) | 1:A:223:ASN:H | 1:A:224:PHE:HB3 | 3 | 0.51 |
| (1,1362) | 1:A:211:VAL:H | 1:A:227:SER:HA | 15 | 0.51 |
| (1,1307) | 1:A:202:MET:H | 1:A:202:MET:HE1 | 8 | 0.51 |
| (1,1307) | 1:A:202:MET:H | 1:A:202:MET:HE2 | 8 | 0.51 |
| (1,1307) | 1:A:202:MET:H | 1:A:202:MET:HE3 | 8 | 0.51 |
| (1,1208) | 1:A:179:THR:HB | 1:A:185:GLY:H | 9 | 0.51 |
| (1,1161) | 1:A:173:ASP:H | 1:A:175:ASP:H | 12 | 0.51 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,84) | 1:A:69:VAL:HG21 | 1:A:198:HIS:HD2 | 6 | 0.5 |
| (7,84) | 1:A:69:VAL:HG22 | 1:A:198:HIS:HD2 | 6 | 0.5 |
| (7,84) | 1:A:69:VAL:HG23 | 1:A:198:HIS:HD2 | 6 | 0.5 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD11 | 1:A:198:HIS:H | 14 | 0.5 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD12 | 1:A:198:HIS:H | 14 | 0.5 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD13 | 1:A:198:HIS:H | 14 | 0.5 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD11 | 3 | 0.5 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD12 | 3 | 0.5 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD13 | 3 | 0.5 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD11 | 3 | 0.5 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD12 | 3 | 0.5 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD13 | 3 | 0.5 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD11 | 3 | 0.5 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD12 | 3 | 0.5 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD13 | 3 | 0.5 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD11 | 3 | 0.5 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD12 | 3 | 0.5 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD13 | 3 | 0.5 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD11 | 3 | 0.5 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD12 | 3 | 0.5 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD13 | 3 | 0.5 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD11 | 3 | 0.5 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD12 | 3 | 0.5 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD13 | 3 | 0.5 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG11 | 1:A:137:GLY:HA2 | 11 | 0.5 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG11 | 1:A:137:GLY:HA3 | 11 | 0.5 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG12 | 1:A:137:GLY:HA2 | 11 | 0.5 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG12 | 1:A:137:GLY:HA3 | 11 | 0.5 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG13 | 1:A:137:GLY:HA2 | 11 | 0.5 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG13 | 1:A:137:GLY:HA3 | 11 | 0.5 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:H | 8 | 0.5 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:H | 8 | 0.5 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:H | 8 | 0.5 |
| (1,915) | 1:A:128:VAL:HB | 1:A:129:TRP:HD1 | 11 | 0.5 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB2 | 1:A:125:ARG:HD2 | 4 | 0.5 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB2 | 1:A:125:ARG:HD3 | 4 | 0.5 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB3 | 1:A:125:ARG:HD2 | 4 | 0.5 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB3 | 1:A:125:ARG:HD3 | 4 | 0.5 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB2 | 1:A:125:ARG:HD2 | 15 | 0.5 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB2 | 1:A:125:ARG:HD3 | 15 | 0.5 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB3 | 1:A:125:ARG:HD2 | 15 | 0.5 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB3 | 1:A:125:ARG:HD3 | 15 | 0.5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,87) | 1:A:21:ARG:H | 1:A:22:PHE:HB2 | 8 | 0.5 |
| (1,87) | 1:A:21:ARG:H | 1:A:22:PHE:HB3 | 8 | 0.5 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB2 | 1:A:118:LYS:HE2 | 1 | 0.5 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB2 | 1:A:118:LYS:HE3 | 1 | 0.5 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB3 | 1:A:118:LYS:HE2 | 1 | 0.5 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB3 | 1:A:118:LYS:HE3 | 1 | 0.5 |
| (1,802) | 1:A:116:TRP:HE1 | 1:A:202:MET:HB2 | 3 | 0.5 |
| (1,802) | 1:A:116:TRP:HE1 | 1:A:202:MET:HB3 | 3 | 0.5 |
| (1,785) | 1:A:116:TRP:H | 1:A:118:LYS:H | 8 | 0.5 |
| (1,44) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:18:TYR:H | 4 | 0.5 |
| (1,42) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:16:GLN:HE21 | 7 | 0.5 |
| (1,42) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:16:GLN:HE22 | 7 | 0.5 |
| (1,389) | 1:A:67:CYS:HB2 | 1:A:69:VAL:H | 15 | 0.5 |
| (1,336) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:MET:HG2 | 9 | 0.5 |
| (1,336) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:MET:HG3 | 9 | 0.5 |
| (1,314) | 1:A:58:VAL:H | 1:A:60:GLU:H | 3 | 0.5 |
| (1,314) | 1:A:58:VAL:H | 1:A:60:GLU:H | 9 | 0.5 |
| (1,244) | 1:A:46:PHE:H | 1:A:48:LEU:H | 10 | 0.5 |
| (1,1473) | 1:A:236:LYS:HG2 | 1:A:237:LEU:H | 3 | 0.5 |
| (1,1473) | 1:A:236:LYS:HG3 | 1:A:237:LEU:H | 3 | 0.5 |
| (1,1217) | 1:A:180:ASP:HB2 | 1:A:182:SER:H | 4 | 0.5 |
| (1,1217) | 1:A:180:ASP:HB3 | 1:A:182:SER:H | 4 | 0.5 |
| (1,1217) | 1:A:180:ASP:HB2 | 1:A:182:SER:H | 9 | 0.5 |
| (1,1217) | 1:A:180:ASP:HB3 | 1:A:182:SER:H | 9 | 0.5 |
| (1,1199) | 1:A:178:TRP:HZ2 | 1:A:186:ILE:HG13 | 6 | 0.5 |
| (1,1181) | 1:A:177:ARG:H | 1:A:186:ILE:H | 15 | 0.5 |
| (1,1161) | 1:A:173:ASP:H | 1:A:175:ASP:H | 16 | 0.5 |
| (1,1151) | 1:A:172:PHE:HD1 | 1:A:173:ASP:H | 10 | 0.5 |
| (1,1151) | 1:A:172:PHE:HD2 | 1:A:173:ASP:H | 10 | 0.5 |
| (1,1126) | 1:A:165:GLY:HA2 | 1:A:167:GLY:H | 3 | 0.5 |
| (1,1126) | 1:A:165:GLY:HA3 | 1:A:167:GLY:H | 3 | 0.5 |
| (1,1098) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:169:ASP:H | 16 | 0.5 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HD11 | 10 | 0.49 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HD12 | 10 | 0.49 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HD13 | 10 | 0.49 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HD11 | 10 | 0.49 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HD12 | 10 | 0.49 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HD13 | 10 | 0.49 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HD11 | 10 | 0.49 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HD12 | 10 | 0.49 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HD13 | 10 | 0.49 |
| (7,65) | 1:A:56:SER:H | 1:A:58:VAL:HG21 | 11 | 0.49 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,65) | 1:A:56:SER:H | 1:A:58:VAL:HG22 | 11 | 0.49 |
| (7,65) | 1:A:56:SER:H | 1:A:58:VAL:HG23 | 11 | 0.49 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD11 | 5 | 0.49 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD12 | 5 | 0.49 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD13 | 5 | 0.49 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD11 | 5 | 0.49 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD12 | 5 | 0.49 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD13 | 5 | 0.49 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD11 | 5 | 0.49 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD12 | 5 | 0.49 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD13 | 5 | 0.49 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD11 | 1 | 0.49 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD12 | 1 | 0.49 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD13 | 1 | 0.49 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD11 | 1 | 0.49 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD12 | 1 | 0.49 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD13 | 1 | 0.49 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD11 | 1 | 0.49 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD12 | 1 | 0.49 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD13 | 1 | 0.49 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG11 | 1:A:138:PHE:H | 8 | 0.49 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG12 | 1:A:138:PHE:H | 8 | 0.49 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG13 | 1:A:138:PHE:H | 8 | 0.49 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG21 | 11 | 0.49 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG22 | 11 | 0.49 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG23 | 11 | 0.49 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG21 | 16 | 0.49 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG22 | 16 | 0.49 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG23 | 16 | 0.49 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:HB2 | 3 | 0.49 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:HB3 | 3 | 0.49 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:HB2 | 3 | 0.49 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:HB3 | 3 | 0.49 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:HB2 | 3 | 0.49 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:HB3 | 3 | 0.49 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:H | 2 | 0.49 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:H | 2 | 0.49 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:H | 2 | 0.49 |
| (1,94) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:24:LEU:H | 13 | 0.49 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB2 | 1:A:125:ARG:HD2 | 5 | 0.49 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB2 | 1:A:125:ARG:HD3 | 5 | 0.49 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB3 | 1:A:125:ARG:HD2 | 5 | 0.49 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB3 | 1:A:125:ARG:HD3 | 5 | 0.49 |
| (1,891) | 1:A:124:PHE:HD1 | 1:A:125:ARG:H | 14 | 0.49 |
| (1,891) | 1:A:124:PHE:HD2 | 1:A:125:ARG:H | 14 | 0.49 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HE1 | 7 | 0.49 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HE2 | 7 | 0.49 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB3 | 1:A:238:TYR:HE1 | 7 | 0.49 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB3 | 1:A:238:TYR:HE2 | 7 | 0.49 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB2 | 1:A:118:LYS:HE2 | 5 | 0.49 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB2 | 1:A:118:LYS:HE3 | 5 | 0.49 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB3 | 1:A:118:LYS:HE2 | 5 | 0.49 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB3 | 1:A:118:LYS:HE3 | 5 | 0.49 |
| (1,780) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HA | 6 | 0.49 |
| (1,780) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HA | 6 | 0.49 |
| (1,780) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HA | 6 | 0.49 |
| (1,725) | 1:A:109:VAL:HA | 1:A:192:ALA:HA | 2 | 0.49 |
| (1,630) | 1:A:98:ARG:H | 1:A:99:ASP:HB2 | 1 | 0.49 |
| (1,630) | 1:A:98:ARG:H | 1:A:99:ASP:HB3 | 1 | 0.49 |
| (1,630) | 1:A:98:ARG:H | 1:A:99:ASP:HB2 | 5 | 0.49 |
| (1,630) | 1:A:98:ARG:H | 1:A:99:ASP:HB3 | 5 | 0.49 |
| (1,615) | 1:A:97:THR:HG21 | 1:A:97:THR:H | 6 | 0.49 |
| (1,615) | 1:A:97:THR:HG22 | 1:A:97:THR:H | 6 | 0.49 |
| (1,615) | 1:A:97:THR:HG23 | 1:A:97:THR:H | 6 | 0.49 |
| (1,615) | 1:A:97:THR:HG21 | 1:A:97:THR:H | 12 | 0.49 |
| (1,615) | 1:A:97:THR:HG22 | 1:A:97:THR:H | 12 | 0.49 |
| (1,615) | 1:A:97:THR:HG23 | 1:A:97:THR:H | 12 | 0.49 |
| (1,559) | 1:A:92:ARG:HD2 | 1:A:128:VAL:H | 10 | 0.49 |
| (1,559) | 1:A:92:ARG:HD3 | 1:A:128:VAL:H | 10 | 0.49 |
| (1,559) | 1:A:92:ARG:HD2 | 1:A:128:VAL:H | 14 | 0.49 |
| (1,559) | 1:A:92:ARG:HD3 | 1:A:128:VAL:H | 14 | 0.49 |
| (1,467) | 1:A:84:TRP:HE1 | 1:A:199:SER:HA | 6 | 0.49 |
| (1,401) | 1:A:68:GLY:H | 1:A:159:ALA:H | 12 | 0.49 |
| (1,347) | 1:A:61:ILE:HA | 1:A:63:GLN:H | 1 | 0.49 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA2 | 1:A:206:SER:HB2 | 11 | 0.49 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA2 | 1:A:206:SER:HB3 | 11 | 0.49 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA3 | 1:A:206:SER:HB2 | 11 | 0.49 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA3 | 1:A:206:SER:HB3 | 11 | 0.49 |
| (1,257) | 1:A:46:PHE:HE1 | 1:A:61:ILE:HA | 2 | 0.49 |
| (1,257) | 1:A:46:PHE:HE2 | 1:A:61:ILE:HA | 2 | 0.49 |
| (1,213) | 1:A:43:GLN:HA | 1:A:48:LEU:H | 3 | 0.49 |
| (1,1434) | 1:A:232:LYS:HB3 | 1:A:233:GLY:H | 3 | 0.49 |
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:230:ASP:HA | 11 | 0.49 |
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:230:ASP:HA | 11 | 0.49 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:230:ASP:HA | 11 | 0.49 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:228:GLN:H | 13 | 0.49 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:228:GLN:H | 13 | 0.49 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:228:GLN:H | 13 | 0.49 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:228:GLN:H | 15 | 0.49 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:228:GLN:H | 15 | 0.49 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:228:GLN:H | 15 | 0.49 |
| (1,1241) | 1:A:189:LEU:H | 1:A:191:ALA:H | 16 | 0.49 |
| (1,1199) | 1:A:178:TRP:HZ2 | 1:A:186:ILE:HG13 | 5 | 0.49 |
| (1,1126) | 1:A:165:GLY:HA2 | 1:A:167:GLY:H | 2 | 0.49 |
| (1,1126) | 1:A:165:GLY:HA3 | 1:A:167:GLY:H | 2 | 0.49 |
| (1,1098) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:169:ASP:H | 2 | 0.49 |
| (1,1080) | 1:A:158:HIS:H | 1:A:158:HIS:HE1 | 9 | 0.49 |
| (1,1060) | 1:A:156:LEU:HB3 | 1:A:178:TRP:HH2 | 14 | 0.49 |
| (1,1054) | 1:A:155:THR:HG21 | 1:A:158:HIS:HA | 6 | 0.49 |
| (1,1054) | 1:A:155:THR:HG22 | 1:A:158:HIS:HA | 6 | 0.49 |
| (1,1054) | 1:A:155:THR:HG23 | 1:A:158:HIS:HA | 6 | 0.49 |
| (1,1050) | 1:A:155:THR:HA | 1:A:157:ALA:H | 14 | 0.49 |
| (1,1022) | 1:A:143:HIS:H | 1:A:145:ASP:H | 10 | 0.49 |
| (1,1022) | 1:A:143:HIS:H | 1:A:145:ASP:H | 10 | 0.49 |
| (1,102) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:70:PRO:HB2 | 13 | 0.49 |
| (1,102) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:70:PRO:HB3 | 13 | 0.49 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD11 | 1:A:58:VAL:HB | 6 | 0.48 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD12 | 1:A:58:VAL:HB | 6 | 0.48 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD13 | 1:A:58:VAL:HB | 6 | 0.48 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG11 | 15 | 0.48 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG12 | 15 | 0.48 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG13 | 15 | 0.48 |
| (7,341) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:226:LEU:HD21 | 5 | 0.48 |
| (7,341) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:226:LEU:HD22 | 5 | 0.48 |
| (7,341) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:226:LEU:HD23 | 5 | 0.48 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG11 | 1:A:138:PHE:H | 15 | 0.48 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG12 | 1:A:138:PHE:H | 15 | 0.48 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG13 | 1:A:138:PHE:H | 15 | 0.48 |
| (5,1) | 1:A:66:ARG:NH1 | 1:A:71:ASP:OD2 | 1 | 0.48 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB2 | 1:A:125:ARG:HD2 | 10 | 0.48 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB2 | 1:A:125:ARG:HD3 | 10 | 0.48 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB3 | 1:A:125:ARG:HD2 | 10 | 0.48 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB3 | 1:A:125:ARG:HD3 | 10 | 0.48 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB2 | 1:A:125:ARG:HD2 | 11 | 0.48 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB2 | 1:A:125:ARG:HD3 | 11 | 0.48 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB3 | 1:A:125:ARG:HD2 | 11 | 0.48 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB3 | 1:A:125:ARG:HD3 | 11 | 0.48 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HE1 | 9 | 0.48 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HE2 | 9 | 0.48 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB3 | 1:A:238:TYR:HE1 | 9 | 0.48 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB3 | 1:A:238:TYR:HE2 | 9 | 0.48 |
| (1,819) | 1:A:117:GLY:HA2 | 1:A:122:LEU:H | 15 | 0.48 |
| (1,694) | 1:A:105:VAL:HA | 1:A:188:PHE:HE1 | 6 | 0.48 |
| (1,694) | 1:A:105:VAL:HA | 1:A:188:PHE:HE2 | 6 | 0.48 |
| (1,630) | 1:A:98:ARG:H | 1:A:99:ASP:HB2 | 8 | 0.48 |
| (1,630) | 1:A:98:ARG:H | 1:A:99:ASP:HB3 | 8 | 0.48 |
| (1,400) | 1:A:68:GLY:H | 1:A:158:HIS:HB3 | 7 | 0.48 |
| (1,384) | 1:A:67:CYS:HA | 1:A:69:VAL:H | 15 | 0.48 |
| (1,375) | 1:A:66:ARG:H | 1:A:22:PHE:HZ | 12 | 0.48 |
| (1,347) | 1:A:61:ILE:HA | 1:A:63:GLN:H | 4 | 0.48 |
| (1,347) | 1:A:61:ILE:HA | 1:A:63:GLN:H | 7 | 0.48 |
| (1,314) | 1:A:58:VAL:H | 1:A:60:GLU:H | 2 | 0.48 |
| (1,314) | 1:A:58:VAL:H | 1:A:60:GLU:H | 11 | 0.48 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG21 | 1:A:53:MET:HB2 | 6 | 0.48 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG21 | 1:A:53:MET:HB3 | 6 | 0.48 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG22 | 1:A:53:MET:HB2 | 6 | 0.48 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG22 | 1:A:53:MET:HB3 | 6 | 0.48 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG23 | 1:A:53:MET:HB2 | 6 | 0.48 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG23 | 1:A:53:MET:HB3 | 6 | 0.48 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG21 | 1:A:53:MET:HB2 | 11 | 0.48 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG21 | 1:A:53:MET:HB3 | 11 | 0.48 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG22 | 1:A:53:MET:HB2 | 11 | 0.48 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG22 | 1:A:53:MET:HB3 | 11 | 0.48 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG23 | 1:A:53:MET:HB2 | 11 | 0.48 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG23 | 1:A:53:MET:HB3 | 11 | 0.48 |
| (1,278) | 1:A:50:ILE:H | 1:A:51:THR:HG21 | 5 | 0.48 |
| (1,278) | 1:A:50:ILE:H | 1:A:51:THR:HG22 | 5 | 0.48 |
| (1,278) | 1:A:50:ILE:H | 1:A:51:THR:HG23 | 5 | 0.48 |
| (1,270) | 1:A:49:PRO:HB2 | 1:A:50:ILE:HG21 | 12 | 0.48 |
| (1,270) | 1:A:49:PRO:HB2 | 1:A:50:ILE:HG22 | 12 | 0.48 |
| (1,270) | 1:A:49:PRO:HB2 | 1:A:50:ILE:HG23 | 12 | 0.48 |
| (1,248) | 1:A:46:PHE:HA | 1:A:48:LEU:H | 9 | 0.48 |
| (1,169) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:52:GLY:HA2 | 13 | 0.48 |
| (1,1434) | 1:A:232:LYS:HB3 | 1:A:233:GLY:H | 15 | 0.48 |
| (1,1398) | 1:A:228:GLN:H | 1:A:230:ASP:HB2 | 12 | 0.48 |
| (1,1398) | 1:A:228:GLN:H | 1:A:230:ASP:HB3 | 12 | 0.48 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:225:LYS:HD2 | 4 | 0.48 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:225:LYS:HD3 | 4 | 0.48 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:225:LYS:HD2 | 4 | 0.48 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:225:LYS:HD3 | 4 | 0.48 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:225:LYS:HD2 | 15 | 0.48 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:225:LYS:HD3 | 15 | 0.48 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:225:LYS:HD2 | 15 | 0.48 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:225:LYS:HD3 | 15 | 0.48 |
| (1,1360) | 1:A:211:VAL:H | 1:A:213:TYR:H | 7 | 0.48 |
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:230:ASP:HA | 8 | 0.48 |
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:230:ASP:HA | 8 | 0.48 |
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:230:ASP:HA | 8 | 0.48 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:228:GLN:H | 14 | 0.48 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:228:GLN:H | 14 | 0.48 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:228:GLN:H | 14 | 0.48 |
| (1,1308) | 1:A:202:MET:H | 1:A:234:ILE:HD11 | 6 | 0.48 |
| (1,1308) | 1:A:202:MET:H | 1:A:234:ILE:HD12 | 6 | 0.48 |
| (1,1308) | 1:A:202:MET:H | 1:A:234:ILE:HD13 | 6 | 0.48 |
| (1,1291) | 1:A:198:HIS:HE1 | 1:A:204:HIS:HA | 9 | 0.48 |
| (1,1241) | 1:A:189:LEU:H | 1:A:191:ALA:H | 2 | 0.48 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD11 | 15 | 0.48 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD12 | 15 | 0.48 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD13 | 15 | 0.48 |
| (1,1161) | 1:A:173:ASP:H | 1:A:175:ASP:H | 5 | 0.48 |
| (1,1151) | 1:A:172:PHE:HD1 | 1:A:173:ASP:H | 2 | 0.48 |
| (1,1151) | 1:A:172:PHE:HD2 | 1:A:173:ASP:H | 2 | 0.48 |
| (1,1147) | 1:A:172:PHE:HB2 | 1:A:173:ASP:H | 13 | 0.48 |
| (1,1098) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:169:ASP:H | 9 | 0.48 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:56:SER:H | 3 | 0.47 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:56:SER:H | 3 | 0.47 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:56:SER:H | 3 | 0.47 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD11 | 1:A:198:HIS:H | 16 | 0.47 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD12 | 1:A:198:HIS:H | 16 | 0.47 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD13 | 1:A:198:HIS:H | 16 | 0.47 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD11 | 1:A:58:VAL:HB | 8 | 0.47 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD12 | 1:A:58:VAL:HB | 8 | 0.47 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD13 | 1:A:58:VAL:HB | 8 | 0.47 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:238:TYR:HD1 | 9 | 0.47 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:238:TYR:HD2 | 9 | 0.47 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:238:TYR:HD1 | 9 | 0.47 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:238:TYR:HD2 | 9 | 0.47 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:238:TYR:HD1 | 9 | 0.47 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:238:TYR:HD2 | 9 | 0.47 |
| (7,340) | 1:A:117:GLY:H | 1:A:200:LEU:HD11 | 13 | 0.47 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,340) | 1:A:117:GLY:H | 1:A:200:LEU:HD12 | 13 | 0.47 |
| (7,340) | 1:A:117:GLY:H | 1:A:200:LEU:HD13 | 13 | 0.47 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD11 | 5 | 0.47 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD12 | 5 | 0.47 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD13 | 5 | 0.47 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD11 | 5 | 0.47 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD12 | 5 | 0.47 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD13 | 5 | 0.47 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD11 | 5 | 0.47 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD12 | 5 | 0.47 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD13 | 5 | 0.47 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:HB2 | 1 | 0.47 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:HB3 | 1 | 0.47 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:HB2 | 1 | 0.47 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:HB3 | 1 | 0.47 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:HB2 | 1 | 0.47 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:HB3 | 1 | 0.47 |
| (1,99) | 1:A:23:TYR:HB2 | 1:A:72:VAL:H | 12 | 0.47 |
| (1,99) | 1:A:23:TYR:HB3 | 1:A:72:VAL:H | 12 | 0.47 |
| (1,951) | 1:A:134:ILE:HD11 | 1:A:135:MET:H | 4 | 0.47 |
| (1,951) | 1:A:134:ILE:HD12 | 1:A:135:MET:H | 4 | 0.47 |
| (1,951) | 1:A:134:ILE:HD13 | 1:A:135:MET:H | 4 | 0.47 |
| (1,915) | 1:A:128:VAL:HB | 1:A:129:TRP:HD1 | 3 | 0.47 |
| (1,915) | 1:A:128:VAL:HB | 1:A:129:TRP:HD1 | 14 | 0.47 |
| (1,909) | 1:A:127:VAL:HA | 1:A:129:TRP:HD1 | 10 | 0.47 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB2 | 1:A:125:ARG:HD2 | 3 | 0.47 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB2 | 1:A:125:ARG:HD3 | 3 | 0.47 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB3 | 1:A:125:ARG:HD2 | 3 | 0.47 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB3 | 1:A:125:ARG:HD3 | 3 | 0.47 |
| (1,882) | 1:A:122:LEU:HG | 1:A:123:HIS:H | 11 | 0.47 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HE1 | 6 | 0.47 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HE2 | 6 | 0.47 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB3 | 1:A:238:TYR:HE1 | 6 | 0.47 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB3 | 1:A:238:TYR:HE2 | 6 | 0.47 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB2 | 1:A:118:LYS:HE2 | 3 | 0.47 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB2 | 1:A:118:LYS:HE3 | 3 | 0.47 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB3 | 1:A:118:LYS:HE2 | 3 | 0.47 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB3 | 1:A:118:LYS:HE3 | 3 | 0.47 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB2 | 1:A:118:LYS:HE2 | 11 | 0.47 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB2 | 1:A:118:LYS:HE3 | 11 | 0.47 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB3 | 1:A:118:LYS:HE2 | 11 | 0.47 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB3 | 1:A:118:LYS:HE3 | 11 | 0.47 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB2 | 1:A:118:LYS:HE2 | 12 | 0.47 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB2 | 1:A:118:LYS:HE3 | 12 | 0.47 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB3 | 1:A:118:LYS:HE2 | 12 | 0.47 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB3 | 1:A:118:LYS:HE3 | 12 | 0.47 |
| (1,820) | 1:A:117:GLY:HA3 | 1:A:119:GLU:H | 1 | 0.47 |
| (1,819) | 1:A:117:GLY:HA2 | 1:A:122:LEU:H | 4 | 0.47 |
| (1,757) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:115:MET:HB2 | 2 | 0.47 |
| (1,726) | 1:A:109:VAL:HB | 1:A:110:SER:H | 14 | 0.47 |
| (1,725) | 1:A:109:VAL:HA | 1:A:192:ALA:HA | 8 | 0.47 |
| (1,694) | 1:A:105:VAL:HA | 1:A:188:PHE:HE1 | 11 | 0.47 |
| (1,694) | 1:A:105:VAL:HA | 1:A:188:PHE:HE2 | 11 | 0.47 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG21 | 1:A:188:PHE:HD1 | 7 | 0.47 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG21 | 1:A:188:PHE:HD2 | 7 | 0.47 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG22 | 1:A:188:PHE:HD1 | 7 | 0.47 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG22 | 1:A:188:PHE:HD2 | 7 | 0.47 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG23 | 1:A:188:PHE:HD1 | 7 | 0.47 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG23 | 1:A:188:PHE:HD2 | 7 | 0.47 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG21 | 1:A:188:PHE:HD1 | 10 | 0.47 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG21 | 1:A:188:PHE:HD2 | 10 | 0.47 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG22 | 1:A:188:PHE:HD1 | 10 | 0.47 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG22 | 1:A:188:PHE:HD2 | 10 | 0.47 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG23 | 1:A:188:PHE:HD1 | 10 | 0.47 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG23 | 1:A:188:PHE:HD2 | 10 | 0.47 |
| (1,615) | 1:A:97:THR:HG21 | 1:A:97:THR:H | 4 | 0.47 |
| (1,615) | 1:A:97:THR:HG22 | 1:A:97:THR:H | 4 | 0.47 |
| (1,615) | 1:A:97:THR:HG23 | 1:A:97:THR:H | 4 | 0.47 |
| (1,568) | 1:A:92:ARG:HE | 1:A:127:VAL:HB | 15 | 0.47 |
| (1,559) | 1:A:92:ARG:HD2 | 1:A:128:VAL:H | 16 | 0.47 |
| (1,559) | 1:A:92:ARG:HD3 | 1:A:128:VAL:H | 16 | 0.47 |
| (1,53) | 1:A:18:TYR:H | 1:A:21:ARG:HG2 | 1 | 0.47 |
| (1,486) | 1:A:89:VAL:H | 1:A:123:HIS:HD2 | 1 | 0.47 |
| (1,449) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:202:MET:HE1 | 8 | 0.47 |
| (1,449) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:202:MET:HE2 | 8 | 0.47 |
| (1,449) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:202:MET:HE3 | 8 | 0.47 |
| (1,449) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:202:MET:HE1 | 8 | 0.47 |
| (1,449) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:202:MET:HE2 | 8 | 0.47 |
| (1,449) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:202:MET:HE3 | 8 | 0.47 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG2 | 1:A:163:GLY:HA2 | 6 | 0.47 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG2 | 1:A:163:GLY:HA3 | 6 | 0.47 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG3 | 1:A:163:GLY:HA2 | 6 | 0.47 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG3 | 1:A:163:GLY:HA3 | 6 | 0.47 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG2 | 1:A:163:GLY:HA2 | 11 | 0.47 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG2 | 1:A:163:GLY:HA3 | 11 | 0.47 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG3 | 1:A:163:GLY:HA2 | 11 | 0.47 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG3 | 1:A:163:GLY:HA3 | 11 | 0.47 |
| (1,400) | 1:A:68:GLY:H | 1:A:158:HIS:HB3 | 4 | 0.47 |
| (1,336) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:MET:HG2 | 16 | 0.47 |
| (1,336) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:MET:HG3 | 16 | 0.47 |
| (1,270) | 1:A:49:PRO:HB2 | 1:A:50:ILE:HG21 | 4 | 0.47 |
| (1,270) | 1:A:49:PRO:HB2 | 1:A:50:ILE:HG22 | 4 | 0.47 |
| (1,270) | 1:A:49:PRO:HB2 | 1:A:50:ILE:HG23 | 4 | 0.47 |
| (1,257) | 1:A:46:PHE:HE1 | 1:A:61:ILE:HA | 7 | 0.47 |
| (1,257) | 1:A:46:PHE:HE2 | 1:A:61:ILE:HA | 7 | 0.47 |
| (1,244) | 1:A:46:PHE:H | 1:A:48:LEU:H | 12 | 0.47 |
| (1,232) | 1:A:45:PHE:H | 1:A:46:PHE:HD1 | 11 | 0.47 |
| (1,232) | 1:A:45:PHE:H | 1:A:46:PHE:HD2 | 11 | 0.47 |
| (1,196) | 1:A:42:MET:HE1 | 1:A:62:MET:HB2 | 15 | 0.47 |
| (1,196) | 1:A:42:MET:HE1 | 1:A:62:MET:HB3 | 15 | 0.47 |
| (1,196) | 1:A:42:MET:HE2 | 1:A:62:MET:HB2 | 15 | 0.47 |
| (1,196) | 1:A:42:MET:HE2 | 1:A:62:MET:HB3 | 15 | 0.47 |
| (1,196) | 1:A:42:MET:HE3 | 1:A:62:MET:HB2 | 15 | 0.47 |
| (1,196) | 1:A:42:MET:HE3 | 1:A:62:MET:HB3 | 15 | 0.47 |
| (1,1360) | 1:A:211:VAL:H | 1:A:213:TYR:H | 11 | 0.47 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:228:GLN:H | 3 | 0.47 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:228:GLN:H | 3 | 0.47 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:228:GLN:H | 3 | 0.47 |
| (1,1330) | 1:A:205:SER:H | 1:A:212:MET:H | 13 | 0.47 |
| (1,1241) | 1:A:189:LEU:H | 1:A:191:ALA:H | 8 | 0.47 |
| (1,1151) | 1:A:172:PHE:HD1 | 1:A:173:ASP:H | 16 | 0.47 |
| (1,1151) | 1:A:172:PHE:HD2 | 1:A:173:ASP:H | 16 | 0.47 |
| (1,1126) | 1:A:165:GLY:HA2 | 1:A:167:GLY:H | 1 | 0.47 |
| (1,1126) | 1:A:165:GLY:HA3 | 1:A:167:GLY:H | 1 | 0.47 |
| (1,1126) | 1:A:165:GLY:HA2 | 1:A:167:GLY:H | 5 | 0.47 |
| (1,1126) | 1:A:165:GLY:HA3 | 1:A:167:GLY:H | 5 | 0.47 |
| (1,1125) | 1:A:165:GLY:H | 1:A:167:GLY:H | 16 | 0.47 |
| (1,1111) | 1:A:161:ALA:H | 1:A:163:GLY:H | 13 | 0.47 |
| (1,1100) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:198:HIS:HB2 | 12 | 0.47 |
| (1,1097) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:168:GLY:HA2 | 10 | 0.47 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD11 | 12 | 0.47 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD12 | 12 | 0.47 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD13 | 12 | 0.47 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG11 | 1:A:160:PHE:HE1 | 5 | 0.46 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG11 | 1:A:160:PHE:HE2 | 5 | 0.46 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG12 | 1:A:160:PHE:HE1 | 5 | 0.46 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG12 | 1:A:160:PHE:HE2 | 5 | 0.46 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG13 | 1:A:160:PHE:HE1 | 5 | 0.46 |
| (7,81) | 1:A:69:VAL:HG13 | 1:A:160:PHE:HE2 | 5 | 0.46 |
| (7,368) | 1:A:127:VAL:HG11 | 1:A:129:TRP:H | 7 | 0.46 |
| (7,368) | 1:A:127:VAL:HG12 | 1:A:129:TRP:H | 7 | 0.46 |
| (7,368) | 1:A:127:VAL:HG13 | 1:A:129:TRP:H | 7 | 0.46 |
| (7,364) | 1:A:127:VAL:HG11 | 1:A:129:TRP:H | 7 | 0.46 |
| (7,364) | 1:A:127:VAL:HG12 | 1:A:129:TRP:H | 7 | 0.46 |
| (7,364) | 1:A:127:VAL:HG13 | 1:A:129:TRP:H | 7 | 0.46 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:111:LYS:H | 14 | 0.46 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:111:LYS:H | 14 | 0.46 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:111:LYS:H | 14 | 0.46 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD1 | 8 | 0.46 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD2 | 8 | 0.46 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD1 | 8 | 0.46 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD2 | 8 | 0.46 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD1 | 8 | 0.46 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD2 | 8 | 0.46 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG11 | 1:A:137:GLY:HA2 | 4 | 0.46 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG11 | 1:A:137:GLY:HA3 | 4 | 0.46 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG12 | 1:A:137:GLY:HA2 | 4 | 0.46 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG12 | 1:A:137:GLY:HA3 | 4 | 0.46 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG13 | 1:A:137:GLY:HA2 | 4 | 0.46 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG13 | 1:A:137:GLY:HA3 | 4 | 0.46 |
| (7,15) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:72:VAL:HG21 | 11 | 0.46 |
| (7,15) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:72:VAL:HG22 | 11 | 0.46 |
| (7,15) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:72:VAL:HG23 | 11 | 0.46 |
| (5,1) | 1:A:66:ARG:NH1 | 1:A:71:ASP:OD2 | 11 | 0.46 |
| (1,94) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:24:LEU:H | 7 | 0.46 |
| (1,915) | 1:A:128:VAL:HB | 1:A:129:TRP:HD1 | 8 | 0.46 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB2 | 1:A:125:ARG:HD2 | 1 | 0.46 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB2 | 1:A:125:ARG:HD3 | 1 | 0.46 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB3 | 1:A:125:ARG:HD2 | 1 | 0.46 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB3 | 1:A:125:ARG:HD3 | 1 | 0.46 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB2 | 1:A:125:ARG:HD2 | 13 | 0.46 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB2 | 1:A:125:ARG:HD3 | 13 | 0.46 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB3 | 1:A:125:ARG:HD2 | 13 | 0.46 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB3 | 1:A:125:ARG:HD3 | 13 | 0.46 |
| (1,891) | 1:A:124:PHE:HD1 | 1:A:125:ARG:H | 7 | 0.46 |
| (1,891) | 1:A:124:PHE:HD2 | 1:A:125:ARG:H | 7 | 0.46 |
| (1,891) | 1:A:124:PHE:HD1 | 1:A:125:ARG:H | 10 | 0.46 |
| (1,891) | 1:A:124:PHE:HD2 | 1:A:125:ARG:H | 10 | 0.46 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:202:MET:HE1 | 5 | 0.46 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:202:MET:HE2 | 5 | 0.46 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:202:MET:HE3 | 5 | 0.46 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:202:MET:HE1 | 5 | 0.46 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:202:MET:HE2 | 5 | 0.46 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:202:MET:HE3 | 5 | 0.46 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:202:MET:HE1 | 5 | 0.46 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:202:MET:HE2 | 5 | 0.46 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:202:MET:HE3 | 5 | 0.46 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:202:MET:HE1 | 8 | 0.46 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:202:MET:HE2 | 8 | 0.46 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:202:MET:HE3 | 8 | 0.46 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:202:MET:HE1 | 8 | 0.46 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:202:MET:HE2 | 8 | 0.46 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:202:MET:HE3 | 8 | 0.46 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:202:MET:HE1 | 8 | 0.46 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:202:MET:HE2 | 8 | 0.46 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:202:MET:HE3 | 8 | 0.46 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB2 | 1:A:118:LYS:HE2 | 15 | 0.46 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB2 | 1:A:118:LYS:HE3 | 15 | 0.46 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB3 | 1:A:118:LYS:HE2 | 15 | 0.46 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB3 | 1:A:118:LYS:HE3 | 15 | 0.46 |
| (1,820) | 1:A:117:GLY:HA3 | 1:A:119:GLU:H | 3 | 0.46 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG21 | 1:A:188:PHE:HD1 | 9 | 0.46 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG21 | 1:A:188:PHE:HD2 | 9 | 0.46 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG22 | 1:A:188:PHE:HD1 | 9 | 0.46 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG22 | 1:A:188:PHE:HD2 | 9 | 0.46 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG23 | 1:A:188:PHE:HD1 | 9 | 0.46 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG23 | 1:A:188:PHE:HD2 | 9 | 0.46 |
| (1,62) | 1:A:18:TYR:HB3 | 1:A:62:MET:HE1 | 1 | 0.46 |
| (1,62) | 1:A:18:TYR:HB3 | 1:A:62:MET:HE2 | 1 | 0.46 |
| (1,62) | 1:A:18:TYR:HB3 | 1:A:62:MET:HE3 | 1 | 0.46 |
| (1,561) | 1:A:92:ARG:HD2 | 1:A:132:ALA:H | 12 | 0.46 |
| (1,561) | 1:A:92:ARG:HD3 | 1:A:132:ALA:H | 12 | 0.46 |
| (1,46) | 1:A:16:GLN:HE21 | 1:A:35:LEU:H | 11 | 0.46 |
| (1,46) | 1:A:16:GLN:HE22 | 1:A:35:LEU:H | 11 | 0.46 |
| (1,452) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:237:LEU:HG | 7 | 0.46 |
| (1,452) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:237:LEU:HG | 7 | 0.46 |
| (1,44) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:18:TYR:H | 11 | 0.46 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG2 | 1:A:163:GLY:HA2 | 15 | 0.46 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG2 | 1:A:163:GLY:HA3 | 15 | 0.46 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG3 | 1:A:163:GLY:HA2 | 15 | 0.46 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG3 | 1:A:163:GLY:HA3 | 15 | 0.46 |
| (1,400) | 1:A:68:GLY:H | 1:A:158:HIS:HB3 | 5 | 0.46 |
| (1,384) | 1:A:67:CYS:HA | 1:A:69:VAL:H | 4 | 0.46 |
| (1,27) | 1:A:14:GLN:H | 1:A:16:GLN:H | 3 | 0.46 |
| (1,212) | 1:A:43:GLN:H | 1:A:45:PHE:H | 10 | 0.46 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE2 | 1:A:237:LEU:HB2 | 10 | 0.46 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE2 | 1:A:237:LEU:HB3 | 10 | 0.46 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE3 | 1:A:237:LEU:HB2 | 10 | 0.46 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE3 | 1:A:237:LEU:HB3 | 10 | 0.46 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE2 | 1:A:237:LEU:HB2 | 14 | 0.46 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE2 | 1:A:237:LEU:HB3 | 14 | 0.46 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE3 | 1:A:237:LEU:HB2 | 14 | 0.46 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE3 | 1:A:237:LEU:HB3 | 14 | 0.46 |
| (1,1434) | 1:A:232:LYS:HB3 | 1:A:233:GLY:H | 2 | 0.46 |
| (1,1434) | 1:A:232:LYS:HB3 | 1:A:233:GLY:H | 8 | 0.46 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:225:LYS:HD2 | 3 | 0.46 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:225:LYS:HD3 | 3 | 0.46 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:225:LYS:HD2 | 3 | 0.46 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:225:LYS:HD3 | 3 | 0.46 |
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:230:ASP:HA | 14 | 0.46 |
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:230:ASP:HA | 14 | 0.46 |
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:230:ASP:HA | 14 | 0.46 |
| (1,1305) | 1:A:201:GLY:H | 1:A:202:MET:HB2 | 8 | 0.46 |
| (1,1305) | 1:A:201:GLY:H | 1:A:202:MET:HB3 | 8 | 0.46 |
| (1,1241) | 1:A:189:LEU:H | 1:A:191:ALA:H | 5 | 0.46 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD11 | 16 | 0.46 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD12 | 16 | 0.46 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD13 | 16 | 0.46 |
| (1,1147) | 1:A:172:PHE:HB2 | 1:A:173:ASP:H | 1 | 0.46 |
| (1,1100) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:198:HIS:HB2 | 16 | 0.46 |
| (1,1098) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:169:ASP:H | 12 | 0.46 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD11 | 7 | 0.46 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD12 | 7 | 0.46 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD13 | 7 | 0.46 |
| (1,1060) | 1:A:156:LEU:HB3 | 1:A:178:TRP:HH2 | 1 | 0.46 |
| (1,1060) | 1:A:156:LEU:HB3 | 1:A:178:TRP:HH2 | 2 | 0.46 |
| (1,1038) | 1:A:150:ASP:H | 1:A:151:GLY:H | 13 | 0.46 |
| (1,1018) | 1:A:141:GLY:H | 1:A:150:ASP:H | 3 | 0.46 |
| (8,2) | 1:A:35:LEU:H | 1:A:39:LEU:HD21 | 6 | 0.45 |
| (8,2) | 1:A:35:LEU:H | 1:A:39:LEU:HD22 | 6 | 0.45 |
| (8,2) | 1:A:35:LEU:H | 1:A:39:LEU:HD23 | 6 | 0.45 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD11 | 7 | 0.45 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD12 | 7 | 0.45 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD13 | 7 | 0.45 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD11 | 7 | 0.45 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD12 | 7 | 0.45 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD13 | 7 | 0.45 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD11 | 7 | 0.45 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD12 | 7 | 0.45 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD13 | 7 | 0.45 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD11 | 2 | 0.45 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD12 | 2 | 0.45 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD13 | 2 | 0.45 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD11 | 2 | 0.45 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD12 | 2 | 0.45 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD13 | 2 | 0.45 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD11 | 2 | 0.45 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD12 | 2 | 0.45 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD13 | 2 | 0.45 |
| (7,282) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:113:LEU:HD11 | 16 | 0.45 |
| (7,282) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:113:LEU:HD12 | 16 | 0.45 |
| (7,282) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:113:LEU:HD13 | 16 | 0.45 |
| (7,282) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:113:LEU:HD11 | 16 | 0.45 |
| (7,282) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:113:LEU:HD12 | 16 | 0.45 |
| (7,282) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:113:LEU:HD13 | 16 | 0.45 |
| (7,282) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:113:LEU:HD11 | 16 | 0.45 |
| (7,282) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:113:LEU:HD12 | 16 | 0.45 |
| (7,282) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:113:LEU:HD13 | 16 | 0.45 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD1 | 12 | 0.45 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD2 | 12 | 0.45 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD1 | 12 | 0.45 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD2 | 12 | 0.45 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD1 | 12 | 0.45 |
| (7,263) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD2 | 12 | 0.45 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG11 | 1:A:138:PHE:H | 11 | 0.45 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG12 | 1:A:138:PHE:H | 11 | 0.45 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG13 | 1:A:138:PHE:H | 11 | 0.45 |
| (1,915) | 1:A:128:VAL:HB | 1:A:129:TRP:HD1 | 10 | 0.45 |
| (1,915) | 1:A:128:VAL:HB | 1:A:129:TRP:HD1 | 16 | 0.45 |
| (1,882) | 1:A:122:LEU:HG | 1:A:123:HIS:H | 9 | 0.45 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB2 | 1:A:118:LYS:HE2 | 2 | 0.45 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB2 | 1:A:118:LYS:HE3 | 2 | 0.45 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB3 | 1:A:118:LYS:HE2 | 2 | 0.45 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB3 | 1:A:118:LYS:HE3 | 2 | 0.45 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,726) | 1:A:109:VAL:HB | 1:A:110:SER:H | 12 | 0.45 |
| (1,726) | 1:A:109:VAL:HB | 1:A:110:SER:H | 13 | 0.45 |
| (1,694) | 1:A:105:VAL:HA | 1:A:188:PHE:HE1 | 1 | 0.45 |
| (1,694) | 1:A:105:VAL:HA | 1:A:188:PHE:HE2 | 1 | 0.45 |
| (1,630) | 1:A:98:ARG:H | 1:A:99:ASP:HB2 | 9 | 0.45 |
| (1,630) | 1:A:98:ARG:H | 1:A:99:ASP:HB3 | 9 | 0.45 |
| (1,630) | 1:A:98:ARG:H | 1:A:99:ASP:HB2 | 14 | 0.45 |
| (1,630) | 1:A:98:ARG:H | 1:A:99:ASP:HB3 | 14 | 0.45 |
| (1,53) | 1:A:18:TYR:H | 1:A:21:ARG:HG2 | 9 | 0.45 |
| (1,486) | 1:A:89:VAL:H | 1:A:123:HIS:HD2 | 16 | 0.45 |
| (1,448) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:202:MET:HA | 2 | 0.45 |
| (1,448) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:202:MET:HA | 2 | 0.45 |
| (1,400) | 1:A:68:GLY:H | 1:A:158:HIS:HB3 | 2 | 0.45 |
| (1,314) | 1:A:58:VAL:H | 1:A:60:GLU:H | 8 | 0.45 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA2 | 1:A:206:SER:HB2 | 1 | 0.45 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA2 | 1:A:206:SER:HB3 | 1 | 0.45 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA3 | 1:A:206:SER:HB2 | 1 | 0.45 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA3 | 1:A:206:SER:HB3 | 1 | 0.45 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA2 | 1:A:206:SER:HB2 | 4 | 0.45 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA2 | 1:A:206:SER:HB3 | 4 | 0.45 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA3 | 1:A:206:SER:HB2 | 4 | 0.45 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA3 | 1:A:206:SER:HB3 | 4 | 0.45 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA2 | 1:A:206:SER:HB2 | 10 | 0.45 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA2 | 1:A:206:SER:HB3 | 10 | 0.45 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA3 | 1:A:206:SER:HB2 | 10 | 0.45 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA3 | 1:A:206:SER:HB3 | 10 | 0.45 |
| (1,257) | 1:A:46:PHE:HE1 | 1:A:61:ILE:HA | 16 | 0.45 |
| (1,257) | 1:A:46:PHE:HE2 | 1:A:61:ILE:HA | 16 | 0.45 |
| (1,212) | 1:A:43:GLN:H | 1:A:45:PHE:H | 7 | 0.45 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE2 | 1:A:237:LEU:HB2 | 15 | 0.45 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE2 | 1:A:237:LEU:HB3 | 15 | 0.45 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE3 | 1:A:237:LEU:HB2 | 15 | 0.45 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE3 | 1:A:237:LEU:HB3 | 15 | 0.45 |
| (1,1434) | 1:A:232:LYS:HB3 | 1:A:233:GLY:H | 11 | 0.45 |
| (1,1413) | 1:A:231:ILE:H | 1:A:232:LYS:HB3 | 5 | 0.45 |
| (1,1413) | 1:A:231:ILE:H | 1:A:232:LYS:HB3 | 8 | 0.45 |
| (1,1406) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:HG2 | 1 | 0.45 |
| (1,1406) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:HG3 | 1 | 0.45 |
| (1,1406) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:HG2 | 9 | 0.45 |
| (1,1406) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:HG3 | 9 | 0.45 |
| (1,1402) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HB | 16 | 0.45 |
| (1,1392) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:226:LEU:HA | 4 | 0.45 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1392) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:226:LEU:HA | 4 | 0.45 |
| (1,1386) | 1:A:223:ASN:H | 1:A:224:PHE:HB2 | 6 | 0.45 |
| (1,1386) | 1:A:223:ASN:H | 1:A:224:PHE:HB3 | 6 | 0.45 |
| (1,1307) | 1:A:202:MET:H | 1:A:202:MET:HE1 | 6 | 0.45 |
| (1,1307) | 1:A:202:MET:H | 1:A:202:MET:HE2 | 6 | 0.45 |
| (1,1307) | 1:A:202:MET:H | 1:A:202:MET:HE3 | 6 | 0.45 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD11 | 14 | 0.45 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD12 | 14 | 0.45 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD13 | 14 | 0.45 |
| (1,1199) | 1:A:178:TRP:HZ2 | 1:A:186:ILE:HG13 | 9 | 0.45 |
| (1,1147) | 1:A:172:PHE:HB2 | 1:A:173:ASP:H | 8 | 0.45 |
| (1,1080) | 1:A:158:HIS:H | 1:A:158:HIS:HE1 | 4 | 0.45 |
| (1,1038) | 1:A:150:ASP:H | 1:A:151:GLY:H | 1 | 0.45 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD11 | 1:A:198:HIS:H | 5 | 0.44 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD12 | 1:A:198:HIS:H | 5 | 0.44 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD13 | 1:A:198:HIS:H | 5 | 0.44 |
| (7,368) | 1:A:127:VAL:HG11 | 1:A:129:TRP:H | 6 | 0.44 |
| (7,368) | 1:A:127:VAL:HG12 | 1:A:129:TRP:H | 6 | 0.44 |
| (7,368) | 1:A:127:VAL:HG13 | 1:A:129:TRP:H | 6 | 0.44 |
| (7,364) | 1:A:127:VAL:HG11 | 1:A:129:TRP:H | 6 | 0.44 |
| (7,364) | 1:A:127:VAL:HG12 | 1:A:129:TRP:H | 6 | 0.44 |
| (7,364) | 1:A:127:VAL:HG13 | 1:A:129:TRP:H | 6 | 0.44 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:136:ILE:HD11 | 12 | 0.44 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:136:ILE:HD12 | 12 | 0.44 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:136:ILE:HD13 | 12 | 0.44 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:136:ILE:HD11 | 12 | 0.44 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:136:ILE:HD12 | 12 | 0.44 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:136:ILE:HD13 | 12 | 0.44 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:136:ILE:HD11 | 12 | 0.44 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:136:ILE:HD12 | 12 | 0.44 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:136:ILE:HD13 | 12 | 0.44 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG21 | 10 | 0.44 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG22 | 10 | 0.44 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG23 | 10 | 0.44 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:HB2 | 16 | 0.44 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:HB3 | 16 | 0.44 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:HB2 | 16 | 0.44 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:HB3 | 16 | 0.44 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:HB2 | 16 | 0.44 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:HB3 | 16 | 0.44 |
| (1,945) | 1:A:134:ILE:H | 1:A:136:ILE:HD11 | 6 | 0.44 |
| (1,945) | 1:A:134:ILE:H | 1:A:136:ILE:HD12 | 6 | 0.44 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,945) | 1:A:134:ILE:H | 1:A:136:ILE:HD13 | 6 | 0.44 |
| (1,94) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:24:LEU:H | 16 | 0.44 |
| (1,915) | 1:A:128:VAL:HB | 1:A:129:TRP:HD1 | 1 | 0.44 |
| (1,882) | 1:A:122:LEU:HG | 1:A:123:HIS:H | 16 | 0.44 |
| (1,820) | 1:A:117:GLY:HA3 | 1:A:119:GLU:H | 14 | 0.44 |
| (1,801) | 1:A:116:TRP:HE1 | 1:A:198:HIS:H | 4 | 0.44 |
| (1,755) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:114:ASN:H | 1 | 0.44 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG21 | 1:A:188:PHE:HD1 | 8 | 0.44 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG21 | 1:A:188:PHE:HD2 | 8 | 0.44 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG22 | 1:A:188:PHE:HD1 | 8 | 0.44 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG22 | 1:A:188:PHE:HD2 | 8 | 0.44 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG23 | 1:A:188:PHE:HD1 | 8 | 0.44 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG23 | 1:A:188:PHE:HD2 | 8 | 0.44 |
| (1,630) | 1:A:98:ARG:H | 1:A:99:ASP:HB2 | 11 | 0.44 |
| (1,630) | 1:A:98:ARG:H | 1:A:99:ASP:HB3 | 11 | 0.44 |
| (1,61) | 1:A:18:TYR:HB3 | 1:A:20:LYS:H | 8 | 0.44 |
| (1,53) | 1:A:18:TYR:H | 1:A:21:ARG:HG2 | 14 | 0.44 |
| (1,486) | 1:A:89:VAL:H | 1:A:123:HIS:HD2 | 15 | 0.44 |
| (1,485) | 1:A:89:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB2 | 14 | 0.44 |
| (1,485) | 1:A:89:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB3 | 14 | 0.44 |
| (1,468) | 1:A:84:TRP:HE1 | 1:A:200:LEU:H | 15 | 0.44 |
| (1,448) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:202:MET:HA | 7 | 0.44 |
| (1,448) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:202:MET:HA | 7 | 0.44 |
| (1,443) | 1:A:82:PRO:HD2 | 1:A:83:LYS:HG2 | 5 | 0.44 |
| (1,443) | 1:A:82:PRO:HD2 | 1:A:83:LYS:HG3 | 5 | 0.44 |
| (1,314) | 1:A:58:VAL:H | 1:A:60:GLU:H | 10 | 0.44 |
| (1,304) | 1:A:57:ARG:H | 1:A:59:ILE:H | 13 | 0.44 |
| (1,292) | 1:A:55:ASN:H | 1:A:58:VAL:H | 2 | 0.44 |
| (1,27) | 1:A:14:GLN:H | 1:A:16:GLN:H | 5 | 0.44 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA2 | 1:A:206:SER:HB2 | 15 | 0.44 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA2 | 1:A:206:SER:HB3 | 15 | 0.44 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA3 | 1:A:206:SER:HB2 | 15 | 0.44 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA3 | 1:A:206:SER:HB3 | 15 | 0.44 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE2 | 1:A:237:LEU:HB2 | 9 | 0.44 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE2 | 1:A:237:LEU:HB3 | 9 | 0.44 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE3 | 1:A:237:LEU:HB2 | 9 | 0.44 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE3 | 1:A:237:LEU:HB3 | 9 | 0.44 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE2 | 1:A:237:LEU:HB2 | 11 | 0.44 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE2 | 1:A:237:LEU:HB3 | 11 | 0.44 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE3 | 1:A:237:LEU:HB2 | 11 | 0.44 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE3 | 1:A:237:LEU:HB3 | 11 | 0.44 |
| (1,1452) | 1:A:234:ILE:HB | 1:A:238:TYR:HD1 | 13 | 0.44 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1452) | 1:A:234:ILE:HB | 1:A:238:TYR:HD2 | 13 | 0.44 |
| (1,1434) | 1:A:232:LYS:HB3 | 1:A:233:GLY:H | 4 | 0.44 |
| (1,1434) | 1:A:232:LYS:HB3 | 1:A:233:GLY:H | 16 | 0.44 |
| (1,1406) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:HG2 | 8 | 0.44 |
| (1,1406) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:HG3 | 8 | 0.44 |
| (1,1405) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:H | 3 | 0.44 |
| (1,1405) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:H | 3 | 0.44 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:225:LYS:HD2 | 7 | 0.44 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:225:LYS:HD3 | 7 | 0.44 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:225:LYS:HD2 | 7 | 0.44 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:225:LYS:HD3 | 7 | 0.44 |
| (1,1326) | 1:A:204:HIS:HA | 1:A:214:PRO:HD3 | 15 | 0.44 |
| (1,1305) | 1:A:201:GLY:H | 1:A:202:MET:HB2 | 4 | 0.44 |
| (1,1305) | 1:A:201:GLY:H | 1:A:202:MET:HB3 | 4 | 0.44 |
| (1,1305) | 1:A:201:GLY:H | 1:A:202:MET:HB2 | 9 | 0.44 |
| (1,1305) | 1:A:201:GLY:H | 1:A:202:MET:HB3 | 9 | 0.44 |
| (1,1193) | 1:A:178:TRP:HE3 | 1:A:188:PHE:H | 4 | 0.44 |
| (1,1187) | 1:A:178:TRP:H | 1:A:178:TRP:HE1 | 6 | 0.44 |
| (1,1187) | 1:A:178:TRP:H | 1:A:178:TRP:HE1 | 8 | 0.44 |
| (1,1126) | 1:A:165:GLY:HA2 | 1:A:167:GLY:H | 12 | 0.44 |
| (1,1126) | 1:A:165:GLY:HA3 | 1:A:167:GLY:H | 12 | 0.44 |
| (1,1095) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:160:PHE:HD1 | 13 | 0.44 |
| (1,1095) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:160:PHE:HD2 | 13 | 0.44 |
| (1,1050) | 1:A:155:THR:HA | 1:A:157:ALA:H | 8 | 0.44 |
| (1,1022) | 1:A:143:HIS:H | 1:A:145:ASP:H | 7 | 0.44 |
| (1,1022) | 1:A:143:HIS:H | 1:A:145:ASP:H | 7 | 0.44 |
| (1,102) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:70:PRO:HB2 | 16 | 0.44 |
| (1,102) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:70:PRO:HB3 | 16 | 0.44 |
| (7,65) | 1:A:56:SER:H | 1:A:58:VAL:HG21 | 14 | 0.43 |
| (7,65) | 1:A:56:SER:H | 1:A:58:VAL:HG22 | 14 | 0.43 |
| (7,65) | 1:A:56:SER:H | 1:A:58:VAL:HG23 | 14 | 0.43 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD11 | 1:A:198:HIS:H | 3 | 0.43 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD12 | 1:A:198:HIS:H | 3 | 0.43 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD13 | 1:A:198:HIS:H | 3 | 0.43 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD11 | 1:A:198:HIS:H | 7 | 0.43 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD12 | 1:A:198:HIS:H | 7 | 0.43 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD13 | 1:A:198:HIS:H | 7 | 0.43 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:238:TYR:HD1 | 10 | 0.43 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:238:TYR:HD2 | 10 | 0.43 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:238:TYR:HD1 | 10 | 0.43 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:238:TYR:HD2 | 10 | 0.43 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:238:TYR:HD1 | 10 | 0.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:238:TYR:HD2 | 10 | 0.43 |
| (7,301) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:196:LEU:HD11 | 11 | 0.43 |
| (7,301) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:196:LEU:HD12 | 11 | 0.43 |
| (7,301) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:196:LEU:HD13 | 11 | 0.43 |
| (7,301) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:196:LEU:HD11 | 15 | 0.43 |
| (7,301) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:196:LEU:HD12 | 15 | 0.43 |
| (7,301) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:196:LEU:HD13 | 15 | 0.43 |
| (7,159) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:90:THR:H | 7 | 0.43 |
| (7,159) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:90:THR:H | 7 | 0.43 |
| (7,159) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:90:THR:H | 7 | 0.43 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:HB2 | 14 | 0.43 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:HB3 | 14 | 0.43 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:HB2 | 14 | 0.43 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:HB3 | 14 | 0.43 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:HB2 | 14 | 0.43 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:HB3 | 14 | 0.43 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:H | 5 | 0.43 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:H | 5 | 0.43 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:H | 5 | 0.43 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:H | 7 | 0.43 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:H | 7 | 0.43 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:H | 7 | 0.43 |
| (1,951) | 1:A:134:ILE:HD11 | 1:A:135:MET:H | 1 | 0.43 |
| (1,951) | 1:A:134:ILE:HD12 | 1:A:135:MET:H | 1 | 0.43 |
| (1,951) | 1:A:134:ILE:HD13 | 1:A:135:MET:H | 1 | 0.43 |
| (1,94) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:24:LEU:H | 11 | 0.43 |
| (1,882) | 1:A:122:LEU:HG | 1:A:123:HIS:H | 8 | 0.43 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB2 | 1:A:118:LYS:HE2 | 16 | 0.43 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB2 | 1:A:118:LYS:HE3 | 16 | 0.43 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB3 | 1:A:118:LYS:HE2 | 16 | 0.43 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB3 | 1:A:118:LYS:HE3 | 16 | 0.43 |
| (1,819) | 1:A:117:GLY:HA2 | 1:A:122:LEU:H | 11 | 0.43 |
| (1,801) | 1:A:116:TRP:HE1 | 1:A:198:HIS:H | 3 | 0.43 |
| (1,801) | 1:A:116:TRP:HE1 | 1:A:198:HIS:H | 13 | 0.43 |
| (1,726) | 1:A:109:VAL:HB | 1:A:110:SER:H | 7 | 0.43 |
| (1,694) | 1:A:105:VAL:HA | 1:A:188:PHE:HE1 | 7 | 0.43 |
| (1,694) | 1:A:105:VAL:HA | 1:A:188:PHE:HE2 | 7 | 0.43 |
| (1,694) | 1:A:105:VAL:HA | 1:A:188:PHE:HE1 | 14 | 0.43 |
| (1,694) | 1:A:105:VAL:HA | 1:A:188:PHE:HE2 | 14 | 0.43 |
| (1,693) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:107:ARG:H | 11 | 0.43 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG21 | 1:A:188:PHE:HD1 | 15 | 0.43 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG21 | 1:A:188:PHE:HD2 | 15 | 0.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG22 | 1:A:188:PHE:HD1 | 15 | 0.43 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG22 | 1:A:188:PHE:HD2 | 15 | 0.43 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG23 | 1:A:188:PHE:HD1 | 15 | 0.43 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG23 | 1:A:188:PHE:HD2 | 15 | 0.43 |
| (1,561) | 1:A:92:ARG:HD2 | 1:A:132:ALA:H | 5 | 0.43 |
| (1,561) | 1:A:92:ARG:HD3 | 1:A:132:ALA:H | 5 | 0.43 |
| (1,486) | 1:A:89:VAL:H | 1:A:123:HIS:HD2 | 10 | 0.43 |
| (1,485) | 1:A:89:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB2 | 12 | 0.43 |
| (1,485) | 1:A:89:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB3 | 12 | 0.43 |
| (1,480) | 1:A:88:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB2 | 4 | 0.43 |
| (1,480) | 1:A:88:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB3 | 4 | 0.43 |
| (1,468) | 1:A:84:TRP:HE1 | 1:A:200:LEU:H | 12 | 0.43 |
| (1,46) | 1:A:16:GLN:HE21 | 1:A:35:LEU:H | 2 | 0.43 |
| (1,46) | 1:A:16:GLN:HE22 | 1:A:35:LEU:H | 2 | 0.43 |
| (1,452) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:237:LEU:HG | 8 | 0.43 |
| (1,452) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:237:LEU:HG | 8 | 0.43 |
| (1,44) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:18:TYR:H | 12 | 0.43 |
| (1,314) | 1:A:58:VAL:H | 1:A:60:GLU:H | 14 | 0.43 |
| (1,272) | 1:A:49:PRO:HG2 | 1:A:50:ILE:HA | 3 | 0.43 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA2 | 1:A:206:SER:HB2 | 3 | 0.43 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA2 | 1:A:206:SER:HB3 | 3 | 0.43 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA3 | 1:A:206:SER:HB2 | 3 | 0.43 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA3 | 1:A:206:SER:HB3 | 3 | 0.43 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA2 | 1:A:206:SER:HB2 | 6 | 0.43 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA2 | 1:A:206:SER:HB3 | 6 | 0.43 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA3 | 1:A:206:SER:HB2 | 6 | 0.43 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA3 | 1:A:206:SER:HB3 | 6 | 0.43 |
| (1,244) | 1:A:46:PHE:H | 1:A:48:LEU:H | 11 | 0.43 |
| (1,212) | 1:A:43:GLN:H | 1:A:45:PHE:H | 14 | 0.43 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE2 | 1:A:237:LEU:HB2 | 1 | 0.43 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE2 | 1:A:237:LEU:HB3 | 1 | 0.43 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE3 | 1:A:237:LEU:HB2 | 1 | 0.43 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE3 | 1:A:237:LEU:HB3 | 1 | 0.43 |
| (1,1452) | 1:A:234:ILE:HB | 1:A:238:TYR:HD1 | 14 | 0.43 |
| (1,1452) | 1:A:234:ILE:HB | 1:A:238:TYR:HD2 | 14 | 0.43 |
| (1,1434) | 1:A:232:LYS:HB3 | 1:A:233:GLY:H | 5 | 0.43 |
| (1,1402) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HB | 14 | 0.43 |
| (1,1398) | 1:A:228:GLN:H | 1:A:230:ASP:HB2 | 4 | 0.43 |
| (1,1398) | 1:A:228:GLN:H | 1:A:230:ASP:HB3 | 4 | 0.43 |
| (1,1392) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:226:LEU:HA | 6 | 0.43 |
| (1,1392) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:226:LEU:HA | 6 | 0.43 |
| (1,1360) | 1:A:211:VAL:H | 1:A:213:TYR:H | 9 | 0.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1360) | 1:A:211:VAL:H | 1:A:213:TYR:H | 15 | 0.43 |
| (1,1147) | 1:A:172:PHE:HB2 | 1:A:173:ASP:H | 11 | 0.43 |
| (1,1050) | 1:A:155:THR:HA | 1:A:157:ALA:H | 16 | 0.43 |
| (1,1024) | 1:A:143:HIS:HE1 | 1:A:160:PHE:HE1 | 13 | 0.43 |
| (1,1024) | 1:A:143:HIS:HE1 | 1:A:160:PHE:HE2 | 13 | 0.43 |
| (1,102) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:70:PRO:HB2 | 6 | 0.43 |
| (1,102) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:70:PRO:HB3 | 6 | 0.43 |
| (1,102) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:70:PRO:HB2 | 9 | 0.43 |
| (1,102) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:70:PRO:HB3 | 9 | 0.43 |
| (1,1018) | 1:A:141:GLY:H | 1:A:150:ASP:H | 13 | 0.43 |
| (1,1004) | 1:A:139:ALA:HA | 1:A:140:ARG:HG2 | 10 | 0.43 |
| (1,1004) | 1:A:139:ALA:HA | 1:A:140:ARG:HG3 | 10 | 0.43 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HD11 | 3 | 0.42 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HD12 | 3 | 0.42 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HD13 | 3 | 0.42 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HD11 | 3 | 0.42 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HD12 | 3 | 0.42 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HD13 | 3 | 0.42 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HD11 | 3 | 0.42 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HD12 | 3 | 0.42 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HD13 | 3 | 0.42 |
| (7,73) | 1:A:58:VAL:HG11 | 1:A:62:MET:HE1 | 15 | 0.42 |
| (7,73) | 1:A:58:VAL:HG11 | 1:A:62:MET:HE2 | 15 | 0.42 |
| (7,73) | 1:A:58:VAL:HG11 | 1:A:62:MET:HE3 | 15 | 0.42 |
| (7,73) | 1:A:58:VAL:HG12 | 1:A:62:MET:HE1 | 15 | 0.42 |
| (7,73) | 1:A:58:VAL:HG12 | 1:A:62:MET:HE2 | 15 | 0.42 |
| (7,73) | 1:A:58:VAL:HG12 | 1:A:62:MET:HE3 | 15 | 0.42 |
| (7,73) | 1:A:58:VAL:HG13 | 1:A:62:MET:HE1 | 15 | 0.42 |
| (7,73) | 1:A:58:VAL:HG13 | 1:A:62:MET:HE2 | 15 | 0.42 |
| (7,73) | 1:A:58:VAL:HG13 | 1:A:62:MET:HE3 | 15 | 0.42 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:56:SER:H | 14 | 0.42 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:56:SER:H | 14 | 0.42 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:56:SER:H | 14 | 0.42 |
| (7,417) | 1:A:194:HIS:H | 1:A:211:VAL:HG11 | 14 | 0.42 |
| (7,417) | 1:A:194:HIS:H | 1:A:211:VAL:HG12 | 14 | 0.42 |
| (7,417) | 1:A:194:HIS:H | 1:A:211:VAL:HG13 | 14 | 0.42 |
| (7,368) | 1:A:127:VAL:HG11 | 1:A:129:TRP:H | 12 | 0.42 |
| (7,368) | 1:A:127:VAL:HG12 | 1:A:129:TRP:H | 12 | 0.42 |
| (7,368) | 1:A:127:VAL:HG13 | 1:A:129:TRP:H | 12 | 0.42 |
| (7,364) | 1:A:127:VAL:HG11 | 1:A:129:TRP:H | 12 | 0.42 |
| (7,364) | 1:A:127:VAL:HG12 | 1:A:129:TRP:H | 12 | 0.42 |
| (7,364) | 1:A:127:VAL:HG13 | 1:A:129:TRP:H | 12 | 0.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,341) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:226:LEU:HD21 | 9 | 0.42 |
| (7,341) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:226:LEU:HD22 | 9 | 0.42 |
| (7,341) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:226:LEU:HD23 | 9 | 0.42 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD11 | 13 | 0.42 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD12 | 13 | 0.42 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD13 | 13 | 0.42 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD11 | 13 | 0.42 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD12 | 13 | 0.42 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD13 | 13 | 0.42 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD11 | 13 | 0.42 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD12 | 13 | 0.42 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD13 | 13 | 0.42 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG11 | 1:A:138:PHE:H | 13 | 0.42 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG12 | 1:A:138:PHE:H | 13 | 0.42 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG13 | 1:A:138:PHE:H | 13 | 0.42 |
| (1,994) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:139:ALA:H | 16 | 0.42 |
| (1,994) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:139:ALA:H | 16 | 0.42 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB2 | 1:A:125:ARG:HD2 | 12 | 0.42 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB2 | 1:A:125:ARG:HD3 | 12 | 0.42 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB3 | 1:A:125:ARG:HD2 | 12 | 0.42 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB3 | 1:A:125:ARG:HD3 | 12 | 0.42 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HE1 | 10 | 0.42 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HE2 | 10 | 0.42 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB3 | 1:A:238:TYR:HE1 | 10 | 0.42 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB3 | 1:A:238:TYR:HE2 | 10 | 0.42 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HE1 | 11 | 0.42 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HE2 | 11 | 0.42 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB3 | 1:A:238:TYR:HE1 | 11 | 0.42 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB3 | 1:A:238:TYR:HE2 | 11 | 0.42 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:202:MET:HE1 | 14 | 0.42 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:202:MET:HE2 | 14 | 0.42 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:202:MET:HE3 | 14 | 0.42 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:202:MET:HE1 | 14 | 0.42 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:202:MET:HE2 | 14 | 0.42 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:202:MET:HE3 | 14 | 0.42 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:202:MET:HE1 | 14 | 0.42 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:202:MET:HE2 | 14 | 0.42 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:202:MET:HE3 | 14 | 0.42 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB2 | 1:A:118:LYS:HE2 | 8 | 0.42 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB2 | 1:A:118:LYS:HE3 | 8 | 0.42 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB3 | 1:A:118:LYS:HE2 | 8 | 0.42 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB3 | 1:A:118:LYS:HE3 | 8 | 0.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,819) | 1:A:117:GLY:HA2 | 1:A:122:LEU:H | 2 | 0.42 |
| (1,757) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:115:MET:HB2 | 3 | 0.42 |
| (1,757) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:115:MET:HB2 | 9 | 0.42 |
| (1,730) | 1:A:110:SER:H | 1:A:112:ALA:H | 15 | 0.42 |
| (1,726) | 1:A:109:VAL:HB | 1:A:110:SER:H | 9 | 0.42 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG21 | 1:A:188:PHE:HD1 | 4 | 0.42 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG21 | 1:A:188:PHE:HD2 | 4 | 0.42 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG22 | 1:A:188:PHE:HD1 | 4 | 0.42 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG22 | 1:A:188:PHE:HD2 | 4 | 0.42 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG23 | 1:A:188:PHE:HD1 | 4 | 0.42 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG23 | 1:A:188:PHE:HD2 | 4 | 0.42 |
| (1,506) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:133:ASP:H | 13 | 0.42 |
| (1,461) | 1:A:84:TRP:H | 1:A:234:ILE:HD11 | 7 | 0.42 |
| (1,461) | 1:A:84:TRP:H | 1:A:234:ILE:HD12 | 7 | 0.42 |
| (1,461) | 1:A:84:TRP:H | 1:A:234:ILE:HD13 | 7 | 0.42 |
| (1,44) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:18:TYR:H | 1 | 0.42 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG2 | 1:A:163:GLY:HA2 | 4 | 0.42 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG2 | 1:A:163:GLY:HA3 | 4 | 0.42 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG3 | 1:A:163:GLY:HA2 | 4 | 0.42 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG3 | 1:A:163:GLY:HA3 | 4 | 0.42 |
| (1,434) | 1:A:78:PHE:H | 1:A:78:PHE:HD1 | 7 | 0.42 |
| (1,434) | 1:A:78:PHE:H | 1:A:78:PHE:HD2 | 7 | 0.42 |
| (1,336) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:MET:HG2 | 4 | 0.42 |
| (1,336) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:MET:HG3 | 4 | 0.42 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA2 | 1:A:206:SER:HB2 | 5 | 0.42 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA2 | 1:A:206:SER:HB3 | 5 | 0.42 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA3 | 1:A:206:SER:HB2 | 5 | 0.42 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA3 | 1:A:206:SER:HB3 | 5 | 0.42 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA2 | 1:A:206:SER:HB2 | 7 | 0.42 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA2 | 1:A:206:SER:HB3 | 7 | 0.42 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA3 | 1:A:206:SER:HB2 | 7 | 0.42 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA3 | 1:A:206:SER:HB3 | 7 | 0.42 |
| (1,232) | 1:A:45:PHE:H | 1:A:46:PHE:HD1 | 5 | 0.42 |
| (1,232) | 1:A:45:PHE:H | 1:A:46:PHE:HD2 | 5 | 0.42 |
| (1,168) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:52:GLY:H | 6 | 0.42 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE2 | 1:A:237:LEU:HB2 | 3 | 0.42 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE2 | 1:A:237:LEU:HB3 | 3 | 0.42 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE3 | 1:A:237:LEU:HB2 | 3 | 0.42 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE3 | 1:A:237:LEU:HB3 | 3 | 0.42 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:225:LYS:HD2 | 14 | 0.42 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:225:LYS:HD3 | 14 | 0.42 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:225:LYS:HD2 | 14 | 0.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:225:LYS:HD3 | 14 | 0.42 |
| (1,1386) | 1:A:223:ASN:H | 1:A:224:PHE:HB2 | 2 | 0.42 |
| (1,1386) | 1:A:223:ASN:H | 1:A:224:PHE:HB3 | 2 | 0.42 |
| (1,1386) | 1:A:223:ASN:H | 1:A:224:PHE:HB2 | 4 | 0.42 |
| (1,1386) | 1:A:223:ASN:H | 1:A:224:PHE:HB3 | 4 | 0.42 |
| (1,1161) | 1:A:173:ASP:H | 1:A:175:ASP:H | 6 | 0.42 |
| (1,1161) | 1:A:173:ASP:H | 1:A:175:ASP:H | 7 | 0.42 |
| (1,1161) | 1:A:173:ASP:H | 1:A:175:ASP:H | 9 | 0.42 |
| (1,1161) | 1:A:173:ASP:H | 1:A:175:ASP:H | 10 | 0.42 |
| (1,1151) | 1:A:172:PHE:HD1 | 1:A:173:ASP:H | 9 | 0.42 |
| (1,1151) | 1:A:172:PHE:HD2 | 1:A:173:ASP:H | 9 | 0.42 |
| (1,1098) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:169:ASP:H | 14 | 0.42 |
| (1,1020) | 1:A:142:ALA:HB1 | 1:A:145:ASP:H | 7 | 0.42 |
| (1,1020) | 1:A:142:ALA:HB2 | 1:A:145:ASP:H | 7 | 0.42 |
| (1,1020) | 1:A:142:ALA:HB3 | 1:A:145:ASP:H | 7 | 0.42 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD11 | 1:A:198:HIS:H | 2 | 0.41 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD12 | 1:A:198:HIS:H | 2 | 0.41 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD13 | 1:A:198:HIS:H | 2 | 0.41 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD11 | 1:A:58:VAL:HB | 15 | 0.41 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD12 | 1:A:58:VAL:HB | 15 | 0.41 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD13 | 1:A:58:VAL:HB | 15 | 0.41 |
| (7,368) | 1:A:127:VAL:HG11 | 1:A:129:TRP:H | 2 | 0.41 |
| (7,368) | 1:A:127:VAL:HG12 | 1:A:129:TRP:H | 2 | 0.41 |
| (7,368) | 1:A:127:VAL:HG13 | 1:A:129:TRP:H | 2 | 0.41 |
| (7,364) | 1:A:127:VAL:HG11 | 1:A:129:TRP:H | 2 | 0.41 |
| (7,364) | 1:A:127:VAL:HG12 | 1:A:129:TRP:H | 2 | 0.41 |
| (7,364) | 1:A:127:VAL:HG13 | 1:A:129:TRP:H | 2 | 0.41 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG21 | 3 | 0.41 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG22 | 3 | 0.41 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG23 | 3 | 0.41 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG11 | 1:A:124:PHE:HE1 | 14 | 0.41 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG11 | 1:A:124:PHE:HE2 | 14 | 0.41 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG12 | 1:A:124:PHE:HE1 | 14 | 0.41 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG12 | 1:A:124:PHE:HE2 | 14 | 0.41 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG13 | 1:A:124:PHE:HE1 | 14 | 0.41 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG13 | 1:A:124:PHE:HE2 | 14 | 0.41 |
| (1,94) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:24:LEU:H | 3 | 0.41 |
| (1,94) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:24:LEU:H | 10 | 0.41 |
| (1,901) | 1:A:126:LYS:HD2 | 1:A:127:VAL:HB | 15 | 0.41 |
| (1,901) | 1:A:126:LYS:HD3 | 1:A:127:VAL:HB | 15 | 0.41 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB2 | 1:A:125:ARG:HD2 | 7 | 0.41 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB2 | 1:A:125:ARG:HD3 | 7 | 0.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB3 | 1:A:125:ARG:HD2 | 7 | 0.41 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB3 | 1:A:125:ARG:HD3 | 7 | 0.41 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB2 | 1:A:118:LYS:HE2 | 6 | 0.41 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB2 | 1:A:118:LYS:HE3 | 6 | 0.41 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB3 | 1:A:118:LYS:HE2 | 6 | 0.41 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB3 | 1:A:118:LYS:HE3 | 6 | 0.41 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB2 | 1:A:118:LYS:HE2 | 10 | 0.41 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB2 | 1:A:118:LYS:HE3 | 10 | 0.41 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB3 | 1:A:118:LYS:HE2 | 10 | 0.41 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB3 | 1:A:118:LYS:HE3 | 10 | 0.41 |
| (1,820) | 1:A:117:GLY:HA3 | 1:A:119:GLU:H | 10 | 0.41 |
| (1,819) | 1:A:117:GLY:HA2 | 1:A:122:LEU:H | 1 | 0.41 |
| (1,738) | 1:A:111:LYS:HA | 1:A:113:LEU:H | 1 | 0.41 |
| (1,738) | 1:A:111:LYS:HA | 1:A:113:LEU:H | 2 | 0.41 |
| (1,726) | 1:A:109:VAL:HB | 1:A:110:SER:H | 1 | 0.41 |
| (1,726) | 1:A:109:VAL:HB | 1:A:110:SER:H | 6 | 0.41 |
| (1,726) | 1:A:109:VAL:HB | 1:A:110:SER:H | 8 | 0.41 |
| (1,726) | 1:A:109:VAL:HB | 1:A:110:SER:H | 10 | 0.41 |
| (1,725) | 1:A:109:VAL:HA | 1:A:192:ALA:HA | 15 | 0.41 |
| (1,694) | 1:A:105:VAL:HA | 1:A:188:PHE:HE1 | 12 | 0.41 |
| (1,694) | 1:A:105:VAL:HA | 1:A:188:PHE:HE2 | 12 | 0.41 |
| (1,693) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:107:ARG:H | 3 | 0.41 |
| (1,630) | 1:A:98:ARG:H | 1:A:99:ASP:HB2 | 3 | 0.41 |
| (1,630) | 1:A:98:ARG:H | 1:A:99:ASP:HB3 | 3 | 0.41 |
| (1,461) | 1:A:84:TRP:H | 1:A:234:ILE:HD11 | 2 | 0.41 |
| (1,461) | 1:A:84:TRP:H | 1:A:234:ILE:HD12 | 2 | 0.41 |
| (1,461) | 1:A:84:TRP:H | 1:A:234:ILE:HD13 | 2 | 0.41 |
| (1,461) | 1:A:84:TRP:H | 1:A:234:ILE:HD11 | 5 | 0.41 |
| (1,461) | 1:A:84:TRP:H | 1:A:234:ILE:HD12 | 5 | 0.41 |
| (1,461) | 1:A:84:TRP:H | 1:A:234:ILE:HD13 | 5 | 0.41 |
| (1,452) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:237:LEU:HG | 3 | 0.41 |
| (1,452) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:237:LEU:HG | 3 | 0.41 |
| (1,451) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:234:ILE:HG13 | 12 | 0.41 |
| (1,451) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:234:ILE:HG13 | 12 | 0.41 |
| (1,4) | 1:A:4:ALA:HB1 | 1:A:59:ILE:HB | 5 | 0.41 |
| (1,4) | 1:A:4:ALA:HB2 | 1:A:59:ILE:HB | 5 | 0.41 |
| (1,4) | 1:A:4:ALA:HB3 | 1:A:59:ILE:HB | 5 | 0.41 |
| (1,376) | 1:A:66:ARG:H | 1:A:66:ARG:HE | 4 | 0.41 |
| (1,347) | 1:A:61:ILE:HA | 1:A:63:GLN:H | 5 | 0.41 |
| (1,327) | 1:A:59:ILE:HB | 1:A:60:GLU:H | 12 | 0.41 |
| (1,314) | 1:A:58:VAL:H | 1:A:60:GLU:H | 7 | 0.41 |
| (1,272) | 1:A:49:PRO:HG2 | 1:A:50:ILE:HA | 15 | 0.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,212) | 1:A:43:GLN:H | 1:A:45:PHE:H | 6 | 0.41 |
| (1,192) | 1:A:42:MET:HE1 | 1:A:61:ILE:HB | 4 | 0.41 |
| (1,192) | 1:A:42:MET:HE2 | 1:A:61:ILE:HB | 4 | 0.41 |
| (1,192) | 1:A:42:MET:HE3 | 1:A:61:ILE:HB | 4 | 0.41 |
| (1,180) | 1:A:41:GLU:HG3 | 1:A:42:MET:HA | 13 | 0.41 |
| (1,166) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:41:GLU:HG2 | 1 | 0.41 |
| (1,166) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:41:GLU:HG2 | 16 | 0.41 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE2 | 1:A:237:LEU:HB2 | 16 | 0.41 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE2 | 1:A:237:LEU:HB3 | 16 | 0.41 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE3 | 1:A:237:LEU:HB2 | 16 | 0.41 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE3 | 1:A:237:LEU:HB3 | 16 | 0.41 |
| (1,1440) | 1:A:233:GLY:HA2 | 1:A:235:GLN:H | 11 | 0.41 |
| (1,1434) | 1:A:232:LYS:HB3 | 1:A:233:GLY:H | 9 | 0.41 |
| (1,1434) | 1:A:232:LYS:HB3 | 1:A:233:GLY:H | 10 | 0.41 |
| (1,1434) | 1:A:232:LYS:HB3 | 1:A:233:GLY:H | 13 | 0.41 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:225:LYS:HD2 | 1 | 0.41 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:225:LYS:HD3 | 1 | 0.41 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:225:LYS:HD2 | 1 | 0.41 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:225:LYS:HD3 | 1 | 0.41 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:225:LYS:HD2 | 10 | 0.41 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:225:LYS:HD3 | 10 | 0.41 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:225:LYS:HD2 | 10 | 0.41 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:225:LYS:HD3 | 10 | 0.41 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:228:GLN:H | 2 | 0.41 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:228:GLN:H | 2 | 0.41 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:228:GLN:H | 2 | 0.41 |
| (1,1290) | 1:A:198:HIS:HE1 | 1:A:204:HIS:H | 6 | 0.41 |
| (1,1214) | 1:A:179:THR:HG21 | 1:A:188:PHE:H | 5 | 0.41 |
| (1,1214) | 1:A:179:THR:HG22 | 1:A:188:PHE:H | 5 | 0.41 |
| (1,1214) | 1:A:179:THR:HG23 | 1:A:188:PHE:H | 5 | 0.41 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD11 | 1 | 0.41 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD12 | 1 | 0.41 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD13 | 1 | 0.41 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD11 | 3 | 0.41 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD12 | 3 | 0.41 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD13 | 3 | 0.41 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD11 | 13 | 0.41 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD12 | 13 | 0.41 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD13 | 13 | 0.41 |
| (1,1161) | 1:A:173:ASP:H | 1:A:175:ASP:H | 8 | 0.41 |
| (1,1147) | 1:A:172:PHE:HB2 | 1:A:173:ASP:H | 5 | 0.41 |
| (1,1100) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:198:HIS:HB2 | 11 | 0.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1080) | 1:A:158:HIS:H | 1:A:158:HIS:HE1 | 7 | 0.41 |
| (1,1060) | 1:A:156:LEU:HB3 | 1:A:178:TRP:HH2 | 11 | 0.41 |
| (1,1020) | 1:A:142:ALA:HB1 | 1:A:145:ASP:H | 2 | 0.41 |
| (1,1020) | 1:A:142:ALA:HB2 | 1:A:145:ASP:H | 2 | 0.41 |
| (1,1020) | 1:A:142:ALA:HB3 | 1:A:145:ASP:H | 2 | 0.41 |
| (1,102) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:70:PRO:HB2 | 5 | 0.41 |
| (1,102) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:70:PRO:HB3 | 5 | 0.41 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD11 | 1:A:198:HIS:H | 1 | 0.4 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD12 | 1:A:198:HIS:H | 1 | 0.4 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD13 | 1:A:198:HIS:H | 1 | 0.4 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD11 | 1:A:198:HIS:H | 4 | 0.4 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD12 | 1:A:198:HIS:H | 4 | 0.4 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD13 | 1:A:198:HIS:H | 4 | 0.4 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD11 | 1:A:58:VAL:HB | 1 | 0.4 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD12 | 1:A:58:VAL:HB | 1 | 0.4 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD13 | 1:A:58:VAL:HB | 1 | 0.4 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD11 | 1:A:58:VAL:HB | 3 | 0.4 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD12 | 1:A:58:VAL:HB | 3 | 0.4 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD13 | 1:A:58:VAL:HB | 3 | 0.4 |
| (7,368) | 1:A:127:VAL:HG11 | 1:A:129:TRP:H | 5 | 0.4 |
| (7,368) | 1:A:127:VAL:HG12 | 1:A:129:TRP:H | 5 | 0.4 |
| (7,368) | 1:A:127:VAL:HG13 | 1:A:129:TRP:H | 5 | 0.4 |
| (7,364) | 1:A:127:VAL:HG11 | 1:A:129:TRP:H | 5 | 0.4 |
| (7,364) | 1:A:127:VAL:HG12 | 1:A:129:TRP:H | 5 | 0.4 |
| (7,364) | 1:A:127:VAL:HG13 | 1:A:129:TRP:H | 5 | 0.4 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:238:TYR:HD1 | 8 | 0.4 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:238:TYR:HD2 | 8 | 0.4 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:238:TYR:HD1 | 8 | 0.4 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:238:TYR:HD2 | 8 | 0.4 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:238:TYR:HD1 | 8 | 0.4 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:238:TYR:HD2 | 8 | 0.4 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD11 | 12 | 0.4 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD12 | 12 | 0.4 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD13 | 12 | 0.4 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD11 | 12 | 0.4 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD12 | 12 | 0.4 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD13 | 12 | 0.4 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD11 | 12 | 0.4 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD12 | 12 | 0.4 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD13 | 12 | 0.4 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:HB2 | 12 | 0.4 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:HB3 | 12 | 0.4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:HB2 | 12 | 0.4 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:HB3 | 12 | 0.4 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:HB2 | 12 | 0.4 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:HB3 | 12 | 0.4 |
| (5,2) | 1:A:66:ARG:NH2 | 1:A:71:ASP:OD1 | 5 | 0.4 |
| (4,14) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:171:HIS:ND1 | 2 | 0.4 |
| (4,14) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:171:HIS:ND1 | 4 | 0.4 |
| (4,14) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:171:HIS:ND1 | 7 | 0.4 |
| (4,14) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:171:HIS:ND1 | 9 | 0.4 |
| (4,14) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:171:HIS:ND1 | 12 | 0.4 |
| (4,14) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:171:HIS:ND1 | 15 | 0.4 |
| (4,14) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:171:HIS:ND1 | 16 | 0.4 |
| (4,1) | 3:A:301:CA:CA | 1:A:167:GLY:O | 6 | 0.4 |
| (1,994) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:139:ALA:H | 10 | 0.4 |
| (1,994) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:139:ALA:H | 10 | 0.4 |
| (1,94) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:24:LEU:H | 14 | 0.4 |
| (1,901) | 1:A:126:LYS:HD2 | 1:A:127:VAL:HB | 7 | 0.4 |
| (1,901) | 1:A:126:LYS:HD3 | 1:A:127:VAL:HB | 7 | 0.4 |
| (1,891) | 1:A:124:PHE:HD1 | 1:A:125:ARG:H | 1 | 0.4 |
| (1,891) | 1:A:124:PHE:HD2 | 1:A:125:ARG:H | 1 | 0.4 |
| (1,891) | 1:A:124:PHE:HD1 | 1:A:125:ARG:H | 3 | 0.4 |
| (1,891) | 1:A:124:PHE:HD2 | 1:A:125:ARG:H | 3 | 0.4 |
| (1,891) | 1:A:124:PHE:HD1 | 1:A:125:ARG:H | 6 | 0.4 |
| (1,891) | 1:A:124:PHE:HD2 | 1:A:125:ARG:H | 6 | 0.4 |
| (1,891) | 1:A:124:PHE:HD1 | 1:A:125:ARG:H | 12 | 0.4 |
| (1,891) | 1:A:124:PHE:HD2 | 1:A:125:ARG:H | 12 | 0.4 |
| (1,882) | 1:A:122:LEU:HG | 1:A:123:HIS:H | 10 | 0.4 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB2 | 1:A:118:LYS:HE2 | 13 | 0.4 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB2 | 1:A:118:LYS:HE3 | 13 | 0.4 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB3 | 1:A:118:LYS:HE2 | 13 | 0.4 |
| (1,828) | 1:A:118:LYS:HB3 | 1:A:118:LYS:HE3 | 13 | 0.4 |
| (1,730) | 1:A:110:SER:H | 1:A:112:ALA:H | 11 | 0.4 |
| (1,698) | 1:A:106:ASP:H | 1:A:107:ARG:HG2 | 16 | 0.4 |
| (1,698) | 1:A:106:ASP:H | 1:A:107:ARG:HG3 | 16 | 0.4 |
| (1,694) | 1:A:105:VAL:HA | 1:A:188:PHE:HE1 | 3 | 0.4 |
| (1,694) | 1:A:105:VAL:HA | 1:A:188:PHE:HE2 | 3 | 0.4 |
| (1,692) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:106:ASP:HB2 | 5 | 0.4 |
| (1,692) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:106:ASP:HB3 | 5 | 0.4 |
| (1,631) | 1:A:98:ARG:H | 1:A:100:LEU:H | 15 | 0.4 |
| (1,630) | 1:A:98:ARG:H | 1:A:99:ASP:HB2 | 7 | 0.4 |
| (1,630) | 1:A:98:ARG:H | 1:A:99:ASP:HB3 | 7 | 0.4 |
| (1,606) | 1:A:96:TYR:HA | 1:A:102:HIS:HD2 | 3 | 0.4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,549) | 1:A:92:ARG:HB2 | 1:A:131:THR:HA | 12 | 0.4 |
| (1,549) | 1:A:92:ARG:HB3 | 1:A:131:THR:HA | 12 | 0.4 |
| (1,53) | 1:A:18:TYR:H | 1:A:21:ARG:HG2 | 11 | 0.4 |
| (1,448) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:202:MET:HA | 5 | 0.4 |
| (1,448) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:202:MET:HA | 5 | 0.4 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG2 | 1:A:163:GLY:HA2 | 7 | 0.4 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG2 | 1:A:163:GLY:HA3 | 7 | 0.4 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG3 | 1:A:163:GLY:HA2 | 7 | 0.4 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG3 | 1:A:163:GLY:HA3 | 7 | 0.4 |
| (1,384) | 1:A:67:CYS:HA | 1:A:69:VAL:H | 2 | 0.4 |
| (1,347) | 1:A:61:ILE:HA | 1:A:63:GLN:H | 9 | 0.4 |
| (1,314) | 1:A:58:VAL:H | 1:A:60:GLU:H | 1 | 0.4 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA2 | 1:A:206:SER:HB2 | 2 | 0.4 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA2 | 1:A:206:SER:HB3 | 2 | 0.4 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA3 | 1:A:206:SER:HB2 | 2 | 0.4 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA3 | 1:A:206:SER:HB3 | 2 | 0.4 |
| (1,232) | 1:A:45:PHE:H | 1:A:46:PHE:HD1 | 3 | 0.4 |
| (1,232) | 1:A:45:PHE:H | 1:A:46:PHE:HD2 | 3 | 0.4 |
| (1,212) | 1:A:43:GLN:H | 1:A:45:PHE:H | 4 | 0.4 |
| (1,212) | 1:A:43:GLN:H | 1:A:45:PHE:H | 9 | 0.4 |
| (1,1392) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:226:LEU:HA | 9 | 0.4 |
| (1,1392) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:226:LEU:HA | 9 | 0.4 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:225:LYS:HD2 | 16 | 0.4 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:225:LYS:HD3 | 16 | 0.4 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:225:LYS:HD2 | 16 | 0.4 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:225:LYS:HD3 | 16 | 0.4 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:228:GLN:H | 5 | 0.4 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:228:GLN:H | 5 | 0.4 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:228:GLN:H | 5 | 0.4 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:228:GLN:H | 11 | 0.4 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:228:GLN:H | 11 | 0.4 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:228:GLN:H | 11 | 0.4 |
| (1,1199) | 1:A:178:TRP:HZ2 | 1:A:186:ILE:HG13 | 15 | 0.4 |
| (1,1151) | 1:A:172:PHE:HD1 | 1:A:173:ASP:H | 15 | 0.4 |
| (1,1151) | 1:A:172:PHE:HD2 | 1:A:173:ASP:H | 15 | 0.4 |
| (1,1100) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:198:HIS:HB2 | 15 | 0.4 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD11 | 13 | 0.4 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD12 | 13 | 0.4 |
| (1,1065) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:186:ILE:HD13 | 13 | 0.4 |
| (1,1060) | 1:A:156:LEU:HB3 | 1:A:178:TRP:HH2 | 8 | 0.4 |
| (1,1038) | 1:A:150:ASP:H | 1:A:151:GLY:H | 3 | 0.4 |
| (1,1038) | 1:A:150:ASP:H | 1:A:151:GLY:H | 5 | 0.4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,102) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:70:PRO:HB2 | 10 | 0.4 |
| (1,102) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:70:PRO:HB3 | 10 | 0.4 |
| (1,1) | 1:A:2:GLN:HG2 | 1:A:3:GLU:H | 13 | 0.4 |
| (1,1) | 1:A:2:GLN:HG3 | 1:A:3:GLU:H | 13 | 0.4 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG11 | 1 | 0.39 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG12 | 1 | 0.39 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG13 | 1 | 0.39 |
| (7,368) | 1:A:127:VAL:HG11 | 1:A:129:TRP:H | 15 | 0.39 |
| (7,368) | 1:A:127:VAL:HG12 | 1:A:129:TRP:H | 15 | 0.39 |
| (7,368) | 1:A:127:VAL:HG13 | 1:A:129:TRP:H | 15 | 0.39 |
| (7,364) | 1:A:127:VAL:HG11 | 1:A:129:TRP:H | 15 | 0.39 |
| (7,364) | 1:A:127:VAL:HG12 | 1:A:129:TRP:H | 15 | 0.39 |
| (7,364) | 1:A:127:VAL:HG13 | 1:A:129:TRP:H | 15 | 0.39 |
| (7,341) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:226:LEU:HD21 | 15 | 0.39 |
| (7,341) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:226:LEU:HD22 | 15 | 0.39 |
| (7,341) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:226:LEU:HD23 | 15 | 0.39 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:134:ILE:HD11 | 10 | 0.39 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:134:ILE:HD12 | 10 | 0.39 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:134:ILE:HD13 | 10 | 0.39 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:134:ILE:HD11 | 10 | 0.39 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:134:ILE:HD12 | 10 | 0.39 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:134:ILE:HD13 | 10 | 0.39 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:134:ILE:HD11 | 10 | 0.39 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:134:ILE:HD12 | 10 | 0.39 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:134:ILE:HD13 | 10 | 0.39 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD11 | 4 | 0.39 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD12 | 4 | 0.39 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD13 | 4 | 0.39 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD11 | 4 | 0.39 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD12 | 4 | 0.39 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD13 | 4 | 0.39 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD11 | 4 | 0.39 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD12 | 4 | 0.39 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD13 | 4 | 0.39 |
| (7,31) | 1:A:43:GLN:H | 1:A:48:LEU:HD11 | 3 | 0.39 |
| (7,31) | 1:A:43:GLN:H | 1:A:48:LEU:HD12 | 3 | 0.39 |
| (7,31) | 1:A:43:GLN:H | 1:A:48:LEU:HD13 | 3 | 0.39 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG11 | 1:A:138:PHE:H | 6 | 0.39 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG12 | 1:A:138:PHE:H | 6 | 0.39 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG13 | 1:A:138:PHE:H | 6 | 0.39 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG11 | 1:A:138:PHE:H | 10 | 0.39 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG12 | 1:A:138:PHE:H | 10 | 0.39 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG13 | 1:A:138:PHE:H | 10 | 0.39 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:H | 11 | 0.39 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:H | 11 | 0.39 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:H | 11 | 0.39 |
| (6,1) | 1:A:155:THR:HG1 | 1:A:154:ASN:OD1 | 12 | 0.39 |
| (4,14) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:171:HIS:ND1 | 1 | 0.39 |
| (4,14) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:171:HIS:ND1 | 3 | 0.39 |
| (4,14) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:171:HIS:ND1 | 5 | 0.39 |
| (4,14) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:171:HIS:ND1 | 8 | 0.39 |
| (4,14) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:171:HIS:ND1 | 10 | 0.39 |
| (4,14) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:171:HIS:ND1 | 11 | 0.39 |
| (4,14) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:171:HIS:ND1 | 13 | 0.39 |
| (4,14) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:171:HIS:ND1 | 14 | 0.39 |
| (1,945) | 1:A:134:ILE:H | 1:A:136:ILE:HD11 | 7 | 0.39 |
| (1,945) | 1:A:134:ILE:H | 1:A:136:ILE:HD12 | 7 | 0.39 |
| (1,945) | 1:A:134:ILE:H | 1:A:136:ILE:HD13 | 7 | 0.39 |
| (1,901) | 1:A:126:LYS:HD2 | 1:A:127:VAL:HB | 6 | 0.39 |
| (1,901) | 1:A:126:LYS:HD3 | 1:A:127:VAL:HB | 6 | 0.39 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HE1 | 4 | 0.39 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HE2 | 4 | 0.39 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB3 | 1:A:238:TYR:HE1 | 4 | 0.39 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB3 | 1:A:238:TYR:HE2 | 4 | 0.39 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:202:MET:HE1 | 7 | 0.39 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:202:MET:HE2 | 7 | 0.39 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:202:MET:HE3 | 7 | 0.39 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:202:MET:HE1 | 7 | 0.39 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:202:MET:HE2 | 7 | 0.39 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:202:MET:HE3 | 7 | 0.39 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:202:MET:HE1 | 7 | 0.39 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:202:MET:HE2 | 7 | 0.39 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:202:MET:HE3 | 7 | 0.39 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:202:MET:HE1 | 11 | 0.39 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:202:MET:HE2 | 11 | 0.39 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:202:MET:HE3 | 11 | 0.39 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:202:MET:HE1 | 11 | 0.39 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:202:MET:HE2 | 11 | 0.39 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:202:MET:HE3 | 11 | 0.39 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:202:MET:HE1 | 11 | 0.39 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:202:MET:HE2 | 11 | 0.39 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:202:MET:HE3 | 11 | 0.39 |
| (1,785) | 1:A:116:TRP:H | 1:A:118:LYS:H | 1 | 0.39 |
| (1,785) | 1:A:116:TRP:H | 1:A:118:LYS:H | 2 | 0.39 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,780) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HA | 13 | 0.39 |
| (1,780) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HA | 13 | 0.39 |
| (1,780) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HA | 13 | 0.39 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB1 | 15 | 0.39 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB2 | 15 | 0.39 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB3 | 15 | 0.39 |
| (1,726) | 1:A:109:VAL:HB | 1:A:110:SER:H | 3 | 0.39 |
| (1,692) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:106:ASP:HB2 | 9 | 0.39 |
| (1,692) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:106:ASP:HB3 | 9 | 0.39 |
| (1,692) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:106:ASP:HB2 | 10 | 0.39 |
| (1,692) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:106:ASP:HB3 | 10 | 0.39 |
| (1,630) | 1:A:98:ARG:H | 1:A:99:ASP:HB2 | 16 | 0.39 |
| (1,630) | 1:A:98:ARG:H | 1:A:99:ASP:HB3 | 16 | 0.39 |
| (1,56) | 1:A:18:TYR:HB2 | 1:A:20:LYS:H | 7 | 0.39 |
| (1,56) | 1:A:18:TYR:HB3 | 1:A:20:LYS:H | 7 | 0.39 |
| (1,559) | 1:A:92:ARG:HD2 | 1:A:128:VAL:H | 1 | 0.39 |
| (1,559) | 1:A:92:ARG:HD3 | 1:A:128:VAL:H | 1 | 0.39 |
| (1,53) | 1:A:18:TYR:H | 1:A:21:ARG:HG2 | 10 | 0.39 |
| (1,480) | 1:A:88:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB2 | 15 | 0.39 |
| (1,480) | 1:A:88:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB3 | 15 | 0.39 |
| (1,461) | 1:A:84:TRP:H | 1:A:234:ILE:HD11 | 1 | 0.39 |
| (1,461) | 1:A:84:TRP:H | 1:A:234:ILE:HD12 | 1 | 0.39 |
| (1,461) | 1:A:84:TRP:H | 1:A:234:ILE:HD13 | 1 | 0.39 |
| (1,44) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:18:TYR:H | 8 | 0.39 |
| (1,272) | 1:A:49:PRO:HG2 | 1:A:50:ILE:HA | 10 | 0.39 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA2 | 1:A:206:SER:HB2 | 8 | 0.39 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA2 | 1:A:206:SER:HB3 | 8 | 0.39 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA3 | 1:A:206:SER:HB2 | 8 | 0.39 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA3 | 1:A:206:SER:HB3 | 8 | 0.39 |
| (1,212) | 1:A:43:GLN:H | 1:A:45:PHE:H | 5 | 0.39 |
| (1,169) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:52:GLY:HA2 | 7 | 0.39 |
| (1,168) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:52:GLY:H | 5 | 0.39 |
| (1,168) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:52:GLY:H | 7 | 0.39 |
| (1,1413) | 1:A:231:ILE:H | 1:A:232:LYS:HB3 | 4 | 0.39 |
| (1,1413) | 1:A:231:ILE:H | 1:A:232:LYS:HB3 | 13 | 0.39 |
| (1,1402) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HB | 4 | 0.39 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:225:LYS:HD2 | 6 | 0.39 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:225:LYS:HD3 | 6 | 0.39 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:225:LYS:HD2 | 6 | 0.39 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:225:LYS:HD3 | 6 | 0.39 |
| (1,1307) | 1:A:202:MET:H | 1:A:202:MET:HE1 | 5 | 0.39 |
| (1,1307) | 1:A:202:MET:H | 1:A:202:MET:HE2 | 5 | 0.39 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1307) | 1:A:202:MET:H | 1:A:202:MET:HE3 | 5 | 0.39 |
| (1,1199) | 1:A:178:TRP:HZ2 | 1:A:186:ILE:HG13 | 7 | 0.39 |
| (1,1187) | 1:A:178:TRP:H | 1:A:178:TRP:HE1 | 15 | 0.39 |
| (1,1181) | 1:A:177:ARG:H | 1:A:186:ILE:H | 14 | 0.39 |
| (1,1175) | 1:A:176:GLU:H | 1:A:176:GLU:HG2 | 13 | 0.39 |
| (1,1175) | 1:A:176:GLU:H | 1:A:176:GLU:HG3 | 13 | 0.39 |
| (1,1147) | 1:A:172:PHE:HB2 | 1:A:173:ASP:H | 6 | 0.39 |
| (1,1095) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:160:PHE:HD1 | 5 | 0.39 |
| (1,1095) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:160:PHE:HD2 | 5 | 0.39 |
| (1,1080) | 1:A:158:HIS:H | 1:A:158:HIS:HE1 | 12 | 0.39 |
| (1,1050) | 1:A:155:THR:HA | 1:A:157:ALA:H | 12 | 0.39 |
| (8,2) | 1:A:35:LEU:H | 1:A:39:LEU:HD21 | 14 | 0.38 |
| (8,2) | 1:A:35:LEU:H | 1:A:39:LEU:HD22 | 14 | 0.38 |
| (8,2) | 1:A:35:LEU:H | 1:A:39:LEU:HD23 | 14 | 0.38 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:56:SER:H | 2 | 0.38 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:56:SER:H | 2 | 0.38 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:56:SER:H | 2 | 0.38 |
| (7,368) | 1:A:127:VAL:HG11 | 1:A:129:TRP:H | 13 | 0.38 |
| (7,368) | 1:A:127:VAL:HG12 | 1:A:129:TRP:H | 13 | 0.38 |
| (7,368) | 1:A:127:VAL:HG13 | 1:A:129:TRP:H | 13 | 0.38 |
| (7,364) | 1:A:127:VAL:HG11 | 1:A:129:TRP:H | 13 | 0.38 |
| (7,364) | 1:A:127:VAL:HG12 | 1:A:129:TRP:H | 13 | 0.38 |
| (7,364) | 1:A:127:VAL:HG13 | 1:A:129:TRP:H | 13 | 0.38 |
| (7,353) | 1:A:122:LEU:HD21 | 1:A:238:TYR:HD1 | 2 | 0.38 |
| (7,353) | 1:A:122:LEU:HD21 | 1:A:238:TYR:HD2 | 2 | 0.38 |
| (7,353) | 1:A:122:LEU:HD22 | 1:A:238:TYR:HD1 | 2 | 0.38 |
| (7,353) | 1:A:122:LEU:HD22 | 1:A:238:TYR:HD2 | 2 | 0.38 |
| (7,353) | 1:A:122:LEU:HD23 | 1:A:238:TYR:HD1 | 2 | 0.38 |
| (7,353) | 1:A:122:LEU:HD23 | 1:A:238:TYR:HD2 | 2 | 0.38 |
| (7,341) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:226:LEU:HD21 | 2 | 0.38 |
| (7,341) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:226:LEU:HD22 | 2 | 0.38 |
| (7,341) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:226:LEU:HD23 | 2 | 0.38 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:111:LYS:H | 2 | 0.38 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:111:LYS:H | 2 | 0.38 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:111:LYS:H | 2 | 0.38 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:111:LYS:H | 4 | 0.38 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:111:LYS:H | 4 | 0.38 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:111:LYS:H | 4 | 0.38 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:111:LYS:H | 7 | 0.38 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:111:LYS:H | 7 | 0.38 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:111:LYS:H | 7 | 0.38 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:111:LYS:H | 16 | 0.38 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:111:LYS:H | 16 | 0.38 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:111:LYS:H | 16 | 0.38 |
| (7,256) | 1:A:107:ARG:HG2 | 1:A:108:LEU:HD21 | 16 | 0.38 |
| (7,256) | 1:A:107:ARG:HG2 | 1:A:108:LEU:HD22 | 16 | 0.38 |
| (7,256) | 1:A:107:ARG:HG2 | 1:A:108:LEU:HD23 | 16 | 0.38 |
| (7,242) | 1:A:102:HIS:HD2 | 1:A:105:VAL:HG11 | 13 | 0.38 |
| (7,242) | 1:A:102:HIS:HD2 | 1:A:105:VAL:HG12 | 13 | 0.38 |
| (7,242) | 1:A:102:HIS:HD2 | 1:A:105:VAL:HG13 | 13 | 0.38 |
| (7,24) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:39:LEU:HD11 | 11 | 0.38 |
| (7,24) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:39:LEU:HD12 | 11 | 0.38 |
| (7,24) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:39:LEU:HD13 | 11 | 0.38 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG11 | 1:A:137:GLY:HA2 | 3 | 0.38 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG11 | 1:A:137:GLY:HA3 | 3 | 0.38 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG12 | 1:A:137:GLY:HA2 | 3 | 0.38 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG12 | 1:A:137:GLY:HA3 | 3 | 0.38 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG13 | 1:A:137:GLY:HA2 | 3 | 0.38 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG13 | 1:A:137:GLY:HA3 | 3 | 0.38 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG11 | 1:A:137:GLY:HA2 | 14 | 0.38 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG11 | 1:A:137:GLY:HA3 | 14 | 0.38 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG12 | 1:A:137:GLY:HA2 | 14 | 0.38 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG12 | 1:A:137:GLY:HA3 | 14 | 0.38 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG13 | 1:A:137:GLY:HA2 | 14 | 0.38 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG13 | 1:A:137:GLY:HA3 | 14 | 0.38 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG11 | 1:A:124:PHE:HE1 | 9 | 0.38 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG11 | 1:A:124:PHE:HE2 | 9 | 0.38 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG12 | 1:A:124:PHE:HE1 | 9 | 0.38 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG12 | 1:A:124:PHE:HE2 | 9 | 0.38 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG13 | 1:A:124:PHE:HE1 | 9 | 0.38 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG13 | 1:A:124:PHE:HE2 | 9 | 0.38 |
| (7,159) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:90:THR:H | 8 | 0.38 |
| (7,159) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:90:THR:H | 8 | 0.38 |
| (7,159) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:90:THR:H | 8 | 0.38 |
| (5,2) | 1:A:66:ARG:NH2 | 1:A:71:ASP:OD1 | 15 | 0.38 |
| (1,999) | 1:A:139:ALA:H | 1:A:172:PHE:H | 9 | 0.38 |
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:188:PHE:HE1 | 2 | 0.38 |
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:188:PHE:HE2 | 2 | 0.38 |
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:188:PHE:HE1 | 2 | 0.38 |
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:188:PHE:HE2 | 2 | 0.38 |
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:188:PHE:HE1 | 7 | 0.38 |
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:188:PHE:HE2 | 7 | 0.38 |
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:188:PHE:HE1 | 7 | 0.38 |
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:188:PHE:HE2 | 7 | 0.38 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:188:PHE:HE1 | 8 | 0.38 |
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:188:PHE:HE2 | 8 | 0.38 |
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:188:PHE:HE1 | 8 | 0.38 |
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:188:PHE:HE2 | 8 | 0.38 |
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:188:PHE:HE1 | 15 | 0.38 |
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:188:PHE:HE2 | 15 | 0.38 |
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:188:PHE:HE1 | 15 | 0.38 |
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:188:PHE:HE2 | 15 | 0.38 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB2 | 1:A:125:ARG:HD2 | 8 | 0.38 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB2 | 1:A:125:ARG:HD3 | 8 | 0.38 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB3 | 1:A:125:ARG:HD2 | 8 | 0.38 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB3 | 1:A:125:ARG:HD3 | 8 | 0.38 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB2 | 1:A:125:ARG:HD2 | 14 | 0.38 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB2 | 1:A:125:ARG:HD3 | 14 | 0.38 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB3 | 1:A:125:ARG:HD2 | 14 | 0.38 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB3 | 1:A:125:ARG:HD3 | 14 | 0.38 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB2 | 1:A:125:ARG:HD2 | 16 | 0.38 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB2 | 1:A:125:ARG:HD3 | 16 | 0.38 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB3 | 1:A:125:ARG:HD2 | 16 | 0.38 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB3 | 1:A:125:ARG:HD3 | 16 | 0.38 |
| (1,891) | 1:A:124:PHE:HD1 | 1:A:125:ARG:H | 16 | 0.38 |
| (1,891) | 1:A:124:PHE:HD2 | 1:A:125:ARG:H | 16 | 0.38 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HE1 | 3 | 0.38 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HE2 | 3 | 0.38 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB3 | 1:A:238:TYR:HE1 | 3 | 0.38 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB3 | 1:A:238:TYR:HE2 | 3 | 0.38 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:202:MET:HE1 | 10 | 0.38 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:202:MET:HE2 | 10 | 0.38 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:202:MET:HE3 | 10 | 0.38 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:202:MET:HE1 | 10 | 0.38 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:202:MET:HE2 | 10 | 0.38 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:202:MET:HE3 | 10 | 0.38 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:202:MET:HE1 | 10 | 0.38 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:202:MET:HE2 | 10 | 0.38 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:202:MET:HE3 | 10 | 0.38 |
| (1,820) | 1:A:117:GLY:HA3 | 1:A:119:GLU:H | 8 | 0.38 |
| (1,785) | 1:A:116:TRP:H | 1:A:118:LYS:H | 15 | 0.38 |
| (1,726) | 1:A:109:VAL:HB | 1:A:110:SER:H | 11 | 0.38 |
| (1,726) | 1:A:109:VAL:HB | 1:A:110:SER:H | 16 | 0.38 |
| (1,606) | 1:A:96:TYR:HA | 1:A:102:HIS:HD2 | 13 | 0.38 |
| (1,58) | 1:A:18:TYR:HB2 | 1:A:20:LYS:H | 12 | 0.38 |
| (1,56) | 1:A:18:TYR:HB2 | 1:A:20:LYS:H | 10 | 0.38 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,56) | 1:A:18:TYR:HB3 | 1:A:20:LYS:H | 10 | 0.38 |
| (1,53) | 1:A:18:TYR:H | 1:A:21:ARG:HG2 | 5 | 0.38 |
| (1,514) | 1:A:91:TYR:H | 1:A:126:LYS:HA | 15 | 0.38 |
| (1,448) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:202:MET:HA | 16 | 0.38 |
| (1,448) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:202:MET:HA | 16 | 0.38 |
| (1,314) | 1:A:58:VAL:H | 1:A:60:GLU:H | 6 | 0.38 |
| (1,192) | 1:A:42:MET:HE1 | 1:A:61:ILE:HB | 12 | 0.38 |
| (1,192) | 1:A:42:MET:HE2 | 1:A:61:ILE:HB | 12 | 0.38 |
| (1,192) | 1:A:42:MET:HE3 | 1:A:61:ILE:HB | 12 | 0.38 |
| (1,183) | 1:A:42:MET:H | 1:A:44:LYS:H | 13 | 0.38 |
| (1,168) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:52:GLY:H | 13 | 0.38 |
| (1,1473) | 1:A:236:LYS:HG2 | 1:A:237:LEU:H | 4 | 0.38 |
| (1,1473) | 1:A:236:LYS:HG3 | 1:A:237:LEU:H | 4 | 0.38 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE2 | 1:A:237:LEU:HB2 | 7 | 0.38 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE2 | 1:A:237:LEU:HB3 | 7 | 0.38 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE3 | 1:A:237:LEU:HB2 | 7 | 0.38 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE3 | 1:A:237:LEU:HB3 | 7 | 0.38 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE2 | 1:A:237:LEU:HB2 | 12 | 0.38 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE2 | 1:A:237:LEU:HB3 | 12 | 0.38 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE3 | 1:A:237:LEU:HB2 | 12 | 0.38 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE3 | 1:A:237:LEU:HB3 | 12 | 0.38 |
| (1,1434) | 1:A:232:LYS:HB3 | 1:A:233:GLY:H | 1 | 0.38 |
| (1,1413) | 1:A:231:ILE:H | 1:A:232:LYS:HB3 | 9 | 0.38 |
| (1,1406) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:HG2 | 2 | 0.38 |
| (1,1406) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:HG3 | 2 | 0.38 |
| (1,1405) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:H | 11 | 0.38 |
| (1,1405) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:H | 11 | 0.38 |
| (1,1402) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HB | 12 | 0.38 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:225:LYS:HD2 | 8 | 0.38 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:225:LYS:HD3 | 8 | 0.38 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:225:LYS:HD2 | 8 | 0.38 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:225:LYS:HD3 | 8 | 0.38 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:225:LYS:HD2 | 9 | 0.38 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:225:LYS:HD3 | 9 | 0.38 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:225:LYS:HD2 | 9 | 0.38 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:225:LYS:HD3 | 9 | 0.38 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:225:LYS:HD2 | 13 | 0.38 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:225:LYS:HD3 | 13 | 0.38 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:225:LYS:HD2 | 13 | 0.38 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:225:LYS:HD3 | 13 | 0.38 |
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:230:ASP:HA | 2 | 0.38 |
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:230:ASP:HA | 2 | 0.38 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:230:ASP:HA | 2 | 0.38 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD11 | 8 | 0.38 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD12 | 8 | 0.38 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD13 | 8 | 0.38 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD11 | 11 | 0.38 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD12 | 11 | 0.38 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD13 | 11 | 0.38 |
| (1,1199) | 1:A:178:TRP:HZ2 | 1:A:186:ILE:HG13 | 11 | 0.38 |
| (1,1198) | 1:A:178:TRP:HZ2 | 1:A:186:ILE:HB | 3 | 0.38 |
| (1,1147) | 1:A:172:PHE:HB2 | 1:A:173:ASP:H | 2 | 0.38 |
| (1,1147) | 1:A:172:PHE:HB2 | 1:A:173:ASP:H | 4 | 0.38 |
| (1,1147) | 1:A:172:PHE:HB2 | 1:A:173:ASP:H | 7 | 0.38 |
| (1,1131) | 1:A:170:ALA:H | 1:A:171:HIS:HD2 | 2 | 0.38 |
| (1,1038) | 1:A:150:ASP:H | 1:A:151:GLY:H | 8 | 0.38 |
| (1,1024) | 1:A:143:HIS:HE1 | 1:A:160:PHE:HE1 | 2 | 0.38 |
| (1,1024) | 1:A:143:HIS:HE1 | 1:A:160:PHE:HE2 | 2 | 0.38 |
| (1,1024) | 1:A:143:HIS:HE1 | 1:A:160:PHE:HE1 | 6 | 0.38 |
| (1,1024) | 1:A:143:HIS:HE1 | 1:A:160:PHE:HE2 | 6 | 0.38 |
| (1,1020) | 1:A:142:ALA:HB1 | 1:A:145:ASP:H | 14 | 0.38 |
| (1,1020) | 1:A:142:ALA:HB2 | 1:A:145:ASP:H | 14 | 0.38 |
| (1,1020) | 1:A:142:ALA:HB3 | 1:A:145:ASP:H | 14 | 0.38 |
| (7,417) | 1:A:194:HIS:H | 1:A:211:VAL:HG11 | 2 | 0.37 |
| (7,417) | 1:A:194:HIS:H | 1:A:211:VAL:HG12 | 2 | 0.37 |
| (7,417) | 1:A:194:HIS:H | 1:A:211:VAL:HG13 | 2 | 0.37 |
| (7,417) | 1:A:194:HIS:H | 1:A:211:VAL:HG11 | 8 | 0.37 |
| (7,417) | 1:A:194:HIS:H | 1:A:211:VAL:HG12 | 8 | 0.37 |
| (7,417) | 1:A:194:HIS:H | 1:A:211:VAL:HG13 | 8 | 0.37 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD11 | 1:A:186:ILE:H | 10 | 0.37 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD12 | 1:A:186:ILE:H | 10 | 0.37 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD13 | 1:A:186:ILE:H | 10 | 0.37 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:134:ILE:HD11 | 12 | 0.37 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:134:ILE:HD12 | 12 | 0.37 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:134:ILE:HD13 | 12 | 0.37 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:134:ILE:HD11 | 12 | 0.37 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:134:ILE:HD12 | 12 | 0.37 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:134:ILE:HD13 | 12 | 0.37 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:134:ILE:HD11 | 12 | 0.37 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:134:ILE:HD12 | 12 | 0.37 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:134:ILE:HD13 | 12 | 0.37 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD11 | 1 | 0.37 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD12 | 1 | 0.37 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD13 | 1 | 0.37 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD11 | 1 | 0.37 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD12 | 1 | 0.37 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD13 | 1 | 0.37 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD11 | 1 | 0.37 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD12 | 1 | 0.37 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD13 | 1 | 0.37 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:111:LYS:H | 9 | 0.37 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:111:LYS:H | 9 | 0.37 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:111:LYS:H | 9 | 0.37 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG2 | 6 | 0.37 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG3 | 6 | 0.37 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG2 | 6 | 0.37 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG3 | 6 | 0.37 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG2 | 6 | 0.37 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG3 | 6 | 0.37 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG2 | 12 | 0.37 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG3 | 12 | 0.37 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG2 | 12 | 0.37 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG3 | 12 | 0.37 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG2 | 12 | 0.37 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG3 | 12 | 0.37 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG11 | 1:A:137:GLY:HA2 | 5 | 0.37 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG11 | 1:A:137:GLY:HA3 | 5 | 0.37 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG12 | 1:A:137:GLY:HA2 | 5 | 0.37 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG12 | 1:A:137:GLY:HA3 | 5 | 0.37 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG13 | 1:A:137:GLY:HA2 | 5 | 0.37 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG13 | 1:A:137:GLY:HA3 | 5 | 0.37 |
| (7,190) | 1:A:91:TYR:HE1 | 1:A:113:LEU:HD11 | 9 | 0.37 |
| (7,190) | 1:A:91:TYR:HE1 | 1:A:113:LEU:HD12 | 9 | 0.37 |
| (7,190) | 1:A:91:TYR:HE1 | 1:A:113:LEU:HD13 | 9 | 0.37 |
| (7,190) | 1:A:91:TYR:HE2 | 1:A:113:LEU:HD11 | 9 | 0.37 |
| (7,190) | 1:A:91:TYR:HE2 | 1:A:113:LEU:HD12 | 9 | 0.37 |
| (7,190) | 1:A:91:TYR:HE2 | 1:A:113:LEU:HD13 | 9 | 0.37 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG11 | 1:A:124:PHE:HE1 | 12 | 0.37 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG11 | 1:A:124:PHE:HE2 | 12 | 0.37 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG12 | 1:A:124:PHE:HE1 | 12 | 0.37 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG12 | 1:A:124:PHE:HE2 | 12 | 0.37 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG13 | 1:A:124:PHE:HE1 | 12 | 0.37 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG13 | 1:A:124:PHE:HE2 | 12 | 0.37 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:H | 12 | 0.37 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:H | 12 | 0.37 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:H | 12 | 0.37 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:H | 13 | 0.37 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:H | 13 | 0.37 |
| (7,144) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:H | 13 | 0.37 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:H | 14 | 0.37 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:H | 14 | 0.37 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:H | 14 | 0.37 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:H | 16 | 0.37 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:H | 16 | 0.37 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:H | 16 | 0.37 |
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:188:PHE:HE1 | 9 | 0.37 |
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:188:PHE:HE2 | 9 | 0.37 |
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:188:PHE:HE1 | 9 | 0.37 |
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:188:PHE:HE2 | 9 | 0.37 |
| (1,891) | 1:A:124:PHE:HD1 | 1:A:125:ARG:H | 8 | 0.37 |
| (1,891) | 1:A:124:PHE:HD2 | 1:A:125:ARG:H | 8 | 0.37 |
| (1,882) | 1:A:122:LEU:HG | 1:A:123:HIS:H | 12 | 0.37 |
| (1,87) | 1:A:21:ARG:H | 1:A:22:PHE:HB2 | 12 | 0.37 |
| (1,87) | 1:A:21:ARG:H | 1:A:22:PHE:HB3 | 12 | 0.37 |
| (1,820) | 1:A:117:GLY:HA3 | 1:A:119:GLU:H | 13 | 0.37 |
| (1,819) | 1:A:117:GLY:HA2 | 1:A:122:LEU:H | 16 | 0.37 |
| (1,755) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:114:ASN:H | 7 | 0.37 |
| (1,726) | 1:A:109:VAL:HB | 1:A:110:SER:H | 4 | 0.37 |
| (1,726) | 1:A:109:VAL:HB | 1:A:110:SER:H | 5 | 0.37 |
| (1,692) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:106:ASP:HB2 | 1 | 0.37 |
| (1,692) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:106:ASP:HB3 | 1 | 0.37 |
| (1,692) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:106:ASP:HB2 | 4 | 0.37 |
| (1,692) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:106:ASP:HB3 | 4 | 0.37 |
| (1,538) | 1:A:92:ARG:H | 1:A:93:ILE:H | 3 | 0.37 |
| (1,538) | 1:A:92:ARG:H | 1:A:93:ILE:H | 11 | 0.37 |
| (1,480) | 1:A:88:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB2 | 5 | 0.37 |
| (1,480) | 1:A:88:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB3 | 5 | 0.37 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG21 | 1:A:53:MET:HB2 | 14 | 0.37 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG21 | 1:A:53:MET:HB3 | 14 | 0.37 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG22 | 1:A:53:MET:HB2 | 14 | 0.37 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG22 | 1:A:53:MET:HB3 | 14 | 0.37 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG23 | 1:A:53:MET:HB2 | 14 | 0.37 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG23 | 1:A:53:MET:HB3 | 14 | 0.37 |
| (1,270) | 1:A:49:PRO:HB2 | 1:A:50:ILE:HG21 | 1 | 0.37 |
| (1,270) | 1:A:49:PRO:HB2 | 1:A:50:ILE:HG22 | 1 | 0.37 |
| (1,270) | 1:A:49:PRO:HB2 | 1:A:50:ILE:HG23 | 1 | 0.37 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA2 | 1:A:206:SER:HB2 | 9 | 0.37 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA2 | 1:A:206:SER:HB3 | 9 | 0.37 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA3 | 1:A:206:SER:HB2 | 9 | 0.37 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA3 | 1:A:206:SER:HB3 | 9 | 0.37 |
| (1,244) | 1:A:46:PHE:H | 1:A:48:LEU:H | 13 | 0.37 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE1 | 1:A:43:GLN:HG2 | 2 | 0.37 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE1 | 1:A:43:GLN:HG3 | 2 | 0.37 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE2 | 1:A:43:GLN:HG2 | 2 | 0.37 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE2 | 1:A:43:GLN:HG3 | 2 | 0.37 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE3 | 1:A:43:GLN:HG2 | 2 | 0.37 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE3 | 1:A:43:GLN:HG3 | 2 | 0.37 |
| (1,183) | 1:A:42:MET:H | 1:A:44:LYS:H | 2 | 0.37 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE2 | 1:A:237:LEU:HB2 | 4 | 0.37 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE2 | 1:A:237:LEU:HB3 | 4 | 0.37 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE3 | 1:A:237:LEU:HB2 | 4 | 0.37 |
| (1,1472) | 1:A:236:LYS:HE3 | 1:A:237:LEU:HB3 | 4 | 0.37 |
| (1,1467) | 1:A:236:LYS:H | 1:A:236:LYS:HG2 | 15 | 0.37 |
| (1,1467) | 1:A:236:LYS:H | 1:A:236:LYS:HG3 | 15 | 0.37 |
| (1,1452) | 1:A:234:ILE:HB | 1:A:238:TYR:HD1 | 1 | 0.37 |
| (1,1452) | 1:A:234:ILE:HB | 1:A:238:TYR:HD2 | 1 | 0.37 |
| (1,1452) | 1:A:234:ILE:HB | 1:A:238:TYR:HD1 | 9 | 0.37 |
| (1,1452) | 1:A:234:ILE:HB | 1:A:238:TYR:HD2 | 9 | 0.37 |
| (1,1386) | 1:A:223:ASN:H | 1:A:224:PHE:HB2 | 12 | 0.37 |
| (1,1386) | 1:A:223:ASN:H | 1:A:224:PHE:HB3 | 12 | 0.37 |
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:230:ASP:HA | 13 | 0.37 |
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:230:ASP:HA | 13 | 0.37 |
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:230:ASP:HA | 13 | 0.37 |
| (1,1161) | 1:A:173:ASP:H | 1:A:175:ASP:H | 13 | 0.37 |
| (1,1147) | 1:A:172:PHE:HB2 | 1:A:173:ASP:H | 14 | 0.37 |
| (1,1131) | 1:A:170:ALA:H | 1:A:171:HIS:HD2 | 16 | 0.37 |
| (1,1126) | 1:A:165:GLY:HA2 | 1:A:167:GLY:H | 16 | 0.37 |
| (1,1126) | 1:A:165:GLY:HA3 | 1:A:167:GLY:H | 16 | 0.37 |
| (1,1125) | 1:A:165:GLY:H | 1:A:167:GLY:H | 2 | 0.37 |
| (1,1097) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:168:GLY:HA2 | 3 | 0.37 |
| (1,1095) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:160:PHE:HD1 | 8 | 0.37 |
| (1,1095) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:160:PHE:HD2 | 8 | 0.37 |
| (1,1095) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:160:PHE:HD1 | 16 | 0.37 |
| (1,1095) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:160:PHE:HD2 | 16 | 0.37 |
| (1,1080) | 1:A:158:HIS:H | 1:A:158:HIS:HE1 | 10 | 0.37 |
| (1,1050) | 1:A:155:THR:HA | 1:A:157:ALA:H | 3 | 0.37 |
| (1,1050) | 1:A:155:THR:HA | 1:A:157:ALA:H | 5 | 0.37 |
| (1,1024) | 1:A:143:HIS:HE1 | 1:A:160:PHE:HE1 | 1 | 0.37 |
| (1,1024) | 1:A:143:HIS:HE1 | 1:A:160:PHE:HE2 | 1 | 0.37 |
| (1,1024) | 1:A:143:HIS:HE1 | 1:A:160:PHE:HE1 | 5 | 0.37 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1024) | 1:A:143:HIS:HE1 | 1:A:160:PHE:HE2 | 5 | 0.37 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:59:ILE:HG21 | 10 | 0.36 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:59:ILE:HG22 | 10 | 0.36 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:59:ILE:HG23 | 10 | 0.36 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:59:ILE:HG21 | 10 | 0.36 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:59:ILE:HG22 | 10 | 0.36 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:59:ILE:HG23 | 10 | 0.36 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:59:ILE:HG21 | 10 | 0.36 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:59:ILE:HG22 | 10 | 0.36 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:59:ILE:HG23 | 10 | 0.36 |
| (7,5) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:54:LEU:HD11 | 15 | 0.36 |
| (7,5) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:54:LEU:HD12 | 15 | 0.36 |
| (7,5) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:54:LEU:HD13 | 15 | 0.36 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:111:LYS:H | 1 | 0.36 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:111:LYS:H | 1 | 0.36 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:111:LYS:H | 1 | 0.36 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG11 | 1:A:138:PHE:H | 4 | 0.36 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG12 | 1:A:138:PHE:H | 4 | 0.36 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG13 | 1:A:138:PHE:H | 4 | 0.36 |
| (7,242) | 1:A:102:HIS:HD2 | 1:A:105:VAL:HG11 | 3 | 0.36 |
| (7,242) | 1:A:102:HIS:HD2 | 1:A:105:VAL:HG12 | 3 | 0.36 |
| (7,242) | 1:A:102:HIS:HD2 | 1:A:105:VAL:HG13 | 3 | 0.36 |
| (7,241) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG11 | 13 | 0.36 |
| (7,241) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG12 | 13 | 0.36 |
| (7,241) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG13 | 13 | 0.36 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG11 | 1:A:137:GLY:HA2 | 16 | 0.36 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG11 | 1:A:137:GLY:HA3 | 16 | 0.36 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG12 | 1:A:137:GLY:HA2 | 16 | 0.36 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG12 | 1:A:137:GLY:HA3 | 16 | 0.36 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG13 | 1:A:137:GLY:HA2 | 16 | 0.36 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG13 | 1:A:137:GLY:HA3 | 16 | 0.36 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG21 | 13 | 0.36 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG22 | 13 | 0.36 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG23 | 13 | 0.36 |
| (7,159) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:90:THR:H | 16 | 0.36 |
| (7,159) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:90:THR:H | 16 | 0.36 |
| (7,159) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:90:THR:H | 16 | 0.36 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:H | 1 | 0.36 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:H | 1 | 0.36 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:H | 1 | 0.36 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD11 | 1:A:137:GLY:H | 14 | 0.36 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD12 | 1:A:137:GLY:H | 14 | 0.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD13 | 1:A:137:GLY:H | 14 | 0.36 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB2 | 1:A:125:ARG:HD2 | 9 | 0.36 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB2 | 1:A:125:ARG:HD3 | 9 | 0.36 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB3 | 1:A:125:ARG:HD2 | 9 | 0.36 |
| (1,893) | 1:A:125:ARG:HB3 | 1:A:125:ARG:HD3 | 9 | 0.36 |
| (1,819) | 1:A:117:GLY:HA2 | 1:A:122:LEU:H | 10 | 0.36 |
| (1,726) | 1:A:109:VAL:HB | 1:A:110:SER:H | 15 | 0.36 |
| (1,721) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:188:PHE:HE1 | 4 | 0.36 |
| (1,721) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:188:PHE:HE2 | 4 | 0.36 |
| (1,693) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:107:ARG:H | 14 | 0.36 |
| (1,692) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:106:ASP:HB2 | 8 | 0.36 |
| (1,692) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:106:ASP:HB3 | 8 | 0.36 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG21 | 1:A:188:PHE:HD1 | 5 | 0.36 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG21 | 1:A:188:PHE:HD2 | 5 | 0.36 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG22 | 1:A:188:PHE:HD1 | 5 | 0.36 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG22 | 1:A:188:PHE:HD2 | 5 | 0.36 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG23 | 1:A:188:PHE:HD1 | 5 | 0.36 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG23 | 1:A:188:PHE:HD2 | 5 | 0.36 |
| (1,606) | 1:A:96:TYR:HA | 1:A:102:HIS:HD2 | 2 | 0.36 |
| (1,56) | 1:A:18:TYR:HB2 | 1:A:20:LYS:H | 3 | 0.36 |
| (1,56) | 1:A:18:TYR:HB3 | 1:A:20:LYS:H | 3 | 0.36 |
| (1,56) | 1:A:18:TYR:HB2 | 1:A:20:LYS:H | 14 | 0.36 |
| (1,56) | 1:A:18:TYR:HB3 | 1:A:20:LYS:H | 14 | 0.36 |
| (1,538) | 1:A:92:ARG:H | 1:A:93:ILE:H | 7 | 0.36 |
| (1,538) | 1:A:92:ARG:H | 1:A:93:ILE:H | 9 | 0.36 |
| (1,538) | 1:A:92:ARG:H | 1:A:93:ILE:H | 12 | 0.36 |
| (1,538) | 1:A:92:ARG:H | 1:A:93:ILE:H | 16 | 0.36 |
| (1,486) | 1:A:89:VAL:H | 1:A:123:HIS:HD2 | 9 | 0.36 |
| (1,44) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:18:TYR:H | 5 | 0.36 |
| (1,406) | 1:A:69:VAL:H | 1:A:159:ALA:H | 4 | 0.36 |
| (1,406) | 1:A:69:VAL:H | 1:A:159:ALA:H | 4 | 0.36 |
| (1,401) | 1:A:68:GLY:H | 1:A:159:ALA:H | 3 | 0.36 |
| (1,384) | 1:A:67:CYS:HA | 1:A:69:VAL:H | 1 | 0.36 |
| (1,384) | 1:A:67:CYS:HA | 1:A:69:VAL:H | 9 | 0.36 |
| (1,347) | 1:A:61:ILE:HA | 1:A:63:GLN:H | 14 | 0.36 |
| (1,326) | 1:A:59:ILE:HA | 1:A:62:MET:HE1 | 11 | 0.36 |
| (1,326) | 1:A:59:ILE:HA | 1:A:62:MET:HE2 | 11 | 0.36 |
| (1,326) | 1:A:59:ILE:HA | 1:A:62:MET:HE3 | 11 | 0.36 |
| (1,304) | 1:A:57:ARG:H | 1:A:59:ILE:H | 5 | 0.36 |
| (1,304) | 1:A:57:ARG:H | 1:A:59:ILE:H | 11 | 0.36 |
| (1,212) | 1:A:43:GLN:H | 1:A:45:PHE:H | 15 | 0.36 |
| (1,183) | 1:A:42:MET:H | 1:A:44:LYS:H | 1 | 0.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,166) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:41:GLU:HG2 | 10 | 0.36 |
| (1,1452) | 1:A:234:ILE:HB | 1:A:238:TYR:HD1 | 12 | 0.36 |
| (1,1452) | 1:A:234:ILE:HB | 1:A:238:TYR:HD2 | 12 | 0.36 |
| (1,1406) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:HG2 | 16 | 0.36 |
| (1,1406) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:HG3 | 16 | 0.36 |
| (1,1402) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HB | 11 | 0.36 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:225:LYS:HD2 | 2 | 0.36 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:225:LYS:HD3 | 2 | 0.36 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:225:LYS:HD2 | 2 | 0.36 |
| (1,1390) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:225:LYS:HD3 | 2 | 0.36 |
| (1,1341) | 1:A:207:ASP:H | 1:A:213:TYR:HE1 | 11 | 0.36 |
| (1,1341) | 1:A:207:ASP:H | 1:A:213:TYR:HE2 | 11 | 0.36 |
| (1,1311) | 1:A:202:MET:HA | 1:A:234:ILE:HD11 | 12 | 0.36 |
| (1,1311) | 1:A:202:MET:HA | 1:A:234:ILE:HD12 | 12 | 0.36 |
| (1,1311) | 1:A:202:MET:HA | 1:A:234:ILE:HD13 | 12 | 0.36 |
| (1,1241) | 1:A:189:LEU:H | 1:A:191:ALA:H | 6 | 0.36 |
| (1,1147) | 1:A:172:PHE:HB2 | 1:A:173:ASP:H | 9 | 0.36 |
| (1,1060) | 1:A:156:LEU:HB3 | 1:A:178:TRP:HH2 | 7 | 0.36 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:59:ILE:HG21 | 6 | 0.35 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:59:ILE:HG22 | 6 | 0.35 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:59:ILE:HG23 | 6 | 0.35 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:59:ILE:HG21 | 6 | 0.35 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:59:ILE:HG22 | 6 | 0.35 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:59:ILE:HG23 | 6 | 0.35 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:59:ILE:HG21 | 6 | 0.35 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:59:ILE:HG22 | 6 | 0.35 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:59:ILE:HG23 | 6 | 0.35 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD11 | 1:A:58:VAL:HB | 10 | 0.35 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD12 | 1:A:58:VAL:HB | 10 | 0.35 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD13 | 1:A:58:VAL:HB | 10 | 0.35 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD11 | 1:A:186:ILE:H | 12 | 0.35 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD12 | 1:A:186:ILE:H | 12 | 0.35 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD13 | 1:A:186:ILE:H | 12 | 0.35 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:238:TYR:HD1 | 3 | 0.35 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:238:TYR:HD2 | 3 | 0.35 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:238:TYR:HD1 | 3 | 0.35 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:238:TYR:HD2 | 3 | 0.35 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:238:TYR:HD1 | 3 | 0.35 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:238:TYR:HD2 | 3 | 0.35 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:134:ILE:HD11 | 9 | 0.35 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:134:ILE:HD12 | 9 | 0.35 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:134:ILE:HD13 | 9 | 0.35 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:134:ILE:HD11 | 9 | 0.35 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:134:ILE:HD12 | 9 | 0.35 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:134:ILE:HD13 | 9 | 0.35 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:134:ILE:HD11 | 9 | 0.35 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:134:ILE:HD12 | 9 | 0.35 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:134:ILE:HD13 | 9 | 0.35 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD11 | 12 | 0.35 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD12 | 12 | 0.35 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD13 | 12 | 0.35 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD11 | 12 | 0.35 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD12 | 12 | 0.35 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD13 | 12 | 0.35 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD11 | 12 | 0.35 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD12 | 12 | 0.35 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD13 | 12 | 0.35 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD11 | 14 | 0.35 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD12 | 14 | 0.35 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD13 | 14 | 0.35 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD11 | 14 | 0.35 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD12 | 14 | 0.35 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD13 | 14 | 0.35 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD11 | 14 | 0.35 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD12 | 14 | 0.35 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD13 | 14 | 0.35 |
| (7,3) | 1:A:12:TRP:HH2 | 1:A:39:LEU:HD11 | 7 | 0.35 |
| (7,3) | 1:A:12:TRP:HH2 | 1:A:39:LEU:HD12 | 7 | 0.35 |
| (7,3) | 1:A:12:TRP:HH2 | 1:A:39:LEU:HD13 | 7 | 0.35 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD11 | 16 | 0.35 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD12 | 16 | 0.35 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD13 | 16 | 0.35 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD11 | 16 | 0.35 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD12 | 16 | 0.35 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD13 | 16 | 0.35 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD11 | 16 | 0.35 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD12 | 16 | 0.35 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD13 | 16 | 0.35 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:111:LYS:H | 5 | 0.35 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:111:LYS:H | 5 | 0.35 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:111:LYS:H | 5 | 0.35 |
| (7,242) | 1:A:102:HIS:HD2 | 1:A:105:VAL:HG11 | 7 | 0.35 |
| (7,242) | 1:A:102:HIS:HD2 | 1:A:105:VAL:HG12 | 7 | 0.35 |
| (7,242) | 1:A:102:HIS:HD2 | 1:A:105:VAL:HG13 | 7 | 0.35 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:188:PHE:HE1 | 14 | 0.35 |
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:188:PHE:HE2 | 14 | 0.35 |
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:188:PHE:HE1 | 14 | 0.35 |
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:188:PHE:HE2 | 14 | 0.35 |
| (1,945) | 1:A:134:ILE:H | 1:A:136:ILE:HD11 | 3 | 0.35 |
| (1,945) | 1:A:134:ILE:H | 1:A:136:ILE:HD12 | 3 | 0.35 |
| (1,945) | 1:A:134:ILE:H | 1:A:136:ILE:HD13 | 3 | 0.35 |
| (1,901) | 1:A:126:LYS:HD2 | 1:A:127:VAL:HB | 12 | 0.35 |
| (1,901) | 1:A:126:LYS:HD3 | 1:A:127:VAL:HB | 12 | 0.35 |
| (1,882) | 1:A:122:LEU:HG | 1:A:123:HIS:H | 6 | 0.35 |
| (1,882) | 1:A:122:LEU:HG | 1:A:123:HIS:H | 14 | 0.35 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HE1 | 5 | 0.35 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HE2 | 5 | 0.35 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB3 | 1:A:238:TYR:HE1 | 5 | 0.35 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB3 | 1:A:238:TYR:HE2 | 5 | 0.35 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HE1 | 8 | 0.35 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HE2 | 8 | 0.35 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB3 | 1:A:238:TYR:HE1 | 8 | 0.35 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB3 | 1:A:238:TYR:HE2 | 8 | 0.35 |
| (1,819) | 1:A:117:GLY:HA2 | 1:A:122:LEU:H | 7 | 0.35 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HB2 | 11 | 0.35 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HB3 | 11 | 0.35 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HB2 | 11 | 0.35 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HB3 | 11 | 0.35 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HB2 | 11 | 0.35 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HB3 | 11 | 0.35 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HB2 | 14 | 0.35 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HB3 | 14 | 0.35 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HB2 | 14 | 0.35 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HB3 | 14 | 0.35 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HB2 | 14 | 0.35 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HB3 | 14 | 0.35 |
| (1,755) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:114:ASN:H | 14 | 0.35 |
| (1,738) | 1:A:111:LYS:HA | 1:A:113:LEU:H | 5 | 0.35 |
| (1,738) | 1:A:111:LYS:HA | 1:A:113:LEU:H | 7 | 0.35 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB1 | 8 | 0.35 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB2 | 8 | 0.35 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB3 | 8 | 0.35 |
| (1,693) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:107:ARG:H | 9 | 0.35 |
| (1,692) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:106:ASP:HB2 | 15 | 0.35 |
| (1,692) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:106:ASP:HB3 | 15 | 0.35 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG21 | 1:A:188:PHE:HD1 | 2 | 0.35 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG21 | 1:A:188:PHE:HD2 | 2 | 0.35 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG22 | 1:A:188:PHE:HD1 | 2 | 0.35 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG22 | 1:A:188:PHE:HD2 | 2 | 0.35 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG23 | 1:A:188:PHE:HD1 | 2 | 0.35 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG23 | 1:A:188:PHE:HD2 | 2 | 0.35 |
| (1,538) | 1:A:92:ARG:H | 1:A:93:ILE:H | 8 | 0.35 |
| (1,538) | 1:A:92:ARG:H | 1:A:93:ILE:H | 10 | 0.35 |
| (1,538) | 1:A:92:ARG:H | 1:A:93:ILE:H | 14 | 0.35 |
| (1,451) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:234:ILE:HG13 | 8 | 0.35 |
| (1,451) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:234:ILE:HG13 | 8 | 0.35 |
| (1,448) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:202:MET:HA | 11 | 0.35 |
| (1,448) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:202:MET:HA | 11 | 0.35 |
| (1,301) | 1:A:56:SER:HB3 | 1:A:58:VAL:H | 2 | 0.35 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA2 | 1:A:206:SER:HB2 | 12 | 0.35 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA2 | 1:A:206:SER:HB3 | 12 | 0.35 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA3 | 1:A:206:SER:HB2 | 12 | 0.35 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA3 | 1:A:206:SER:HB3 | 12 | 0.35 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA2 | 1:A:206:SER:HB2 | 14 | 0.35 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA2 | 1:A:206:SER:HB3 | 14 | 0.35 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA3 | 1:A:206:SER:HB2 | 14 | 0.35 |
| (1,264) | 1:A:47:GLY:HA3 | 1:A:206:SER:HB3 | 14 | 0.35 |
| (1,212) | 1:A:43:GLN:H | 1:A:45:PHE:H | 1 | 0.35 |
| (1,212) | 1:A:43:GLN:H | 1:A:45:PHE:H | 8 | 0.35 |
| (1,200) | 1:A:42:MET:HG2 | 1:A:61:ILE:HD11 | 16 | 0.35 |
| (1,200) | 1:A:42:MET:HG2 | 1:A:61:ILE:HD12 | 16 | 0.35 |
| (1,200) | 1:A:42:MET:HG2 | 1:A:61:ILE:HD13 | 16 | 0.35 |
| (1,200) | 1:A:42:MET:HG3 | 1:A:61:ILE:HD11 | 16 | 0.35 |
| (1,200) | 1:A:42:MET:HG3 | 1:A:61:ILE:HD12 | 16 | 0.35 |
| (1,200) | 1:A:42:MET:HG3 | 1:A:61:ILE:HD13 | 16 | 0.35 |
| (1,156) | 1:A:38:LYS:HA | 1:A:41:GLU:HG3 | 8 | 0.35 |
| (1,1473) | 1:A:236:LYS:HG2 | 1:A:237:LEU:H | 15 | 0.35 |
| (1,1473) | 1:A:236:LYS:HG3 | 1:A:237:LEU:H | 15 | 0.35 |
| (1,1467) | 1:A:236:LYS:H | 1:A:236:LYS:HG2 | 4 | 0.35 |
| (1,1467) | 1:A:236:LYS:H | 1:A:236:LYS:HG3 | 4 | 0.35 |
| (1,1467) | 1:A:236:LYS:H | 1:A:236:LYS:HG2 | 8 | 0.35 |
| (1,1467) | 1:A:236:LYS:H | 1:A:236:LYS:HG3 | 8 | 0.35 |
| (1,1452) | 1:A:234:ILE:HB | 1:A:238:TYR:HD1 | 3 | 0.35 |
| (1,1452) | 1:A:234:ILE:HB | 1:A:238:TYR:HD2 | 3 | 0.35 |
| (1,1413) | 1:A:231:ILE:H | 1:A:232:LYS:HB3 | 10 | 0.35 |
| (1,1406) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:HG2 | 3 | 0.35 |
| (1,1406) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:HG3 | 3 | 0.35 |
| (1,1399) | 1:A:228:GLN:HA | 1:A:230:ASP:HB2 | 1 | 0.35 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1399) | 1:A:228:GLN:HA | 1:A:230:ASP:HB3 | 1 | 0.35 |
| (1,1392) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:226:LEU:HA | 5 | 0.35 |
| (1,1392) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:226:LEU:HA | 5 | 0.35 |
| (1,1308) | 1:A:202:MET:H | 1:A:234:ILE:HD11 | 7 | 0.35 |
| (1,1308) | 1:A:202:MET:H | 1:A:234:ILE:HD12 | 7 | 0.35 |
| (1,1308) | 1:A:202:MET:H | 1:A:234:ILE:HD13 | 7 | 0.35 |
| (1,1307) | 1:A:202:MET:H | 1:A:202:MET:HE1 | 11 | 0.35 |
| (1,1307) | 1:A:202:MET:H | 1:A:202:MET:HE2 | 11 | 0.35 |
| (1,1307) | 1:A:202:MET:H | 1:A:202:MET:HE3 | 11 | 0.35 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD11 | 12 | 0.35 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD12 | 12 | 0.35 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD13 | 12 | 0.35 |
| (1,1199) | 1:A:178:TRP:HZ2 | 1:A:186:ILE:HG13 | 8 | 0.35 |
| (1,1198) | 1:A:178:TRP:HZ2 | 1:A:186:ILE:HB | 1 | 0.35 |
| (1,1193) | 1:A:178:TRP:HE3 | 1:A:188:PHE:H | 14 | 0.35 |
| (1,1193) | 1:A:178:TRP:HE3 | 1:A:188:PHE:H | 15 | 0.35 |
| (1,1181) | 1:A:177:ARG:H | 1:A:186:ILE:H | 6 | 0.35 |
| (1,11) | 1:A:10:LEU:H | 1:A:13:GLU:H | 11 | 0.35 |
| (1,1098) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:169:ASP:H | 8 | 0.35 |
| (1,1060) | 1:A:156:LEU:HB3 | 1:A:178:TRP:HH2 | 15 | 0.35 |
| (1,1039) | 1:A:150:ASP:HB2 | 1:A:155:THR:HG21 | 15 | 0.35 |
| (1,1039) | 1:A:150:ASP:HB2 | 1:A:155:THR:HG22 | 15 | 0.35 |
| (1,1039) | 1:A:150:ASP:HB2 | 1:A:155:THR:HG23 | 15 | 0.35 |
| (1,1039) | 1:A:150:ASP:HB3 | 1:A:155:THR:HG21 | 15 | 0.35 |
| (1,1039) | 1:A:150:ASP:HB3 | 1:A:155:THR:HG22 | 15 | 0.35 |
| (1,1039) | 1:A:150:ASP:HB3 | 1:A:155:THR:HG23 | 15 | 0.35 |
| (1,1) | 1:A:2:GLN:HG2 | 1:A:3:GLU:H | 4 | 0.35 |
| (1,1) | 1:A:2:GLN:HG3 | 1:A:3:GLU:H | 4 | 0.35 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD11 | 1:A:186:ILE:H | 7 | 0.34 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD12 | 1:A:186:ILE:H | 7 | 0.34 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD13 | 1:A:186:ILE:H | 7 | 0.34 |
| (7,332) | 1:A:116:TRP:HB2 | 1:A:226:LEU:HD11 | 13 | 0.34 |
| (7,332) | 1:A:116:TRP:HB2 | 1:A:226:LEU:HD12 | 13 | 0.34 |
| (7,332) | 1:A:116:TRP:HB2 | 1:A:226:LEU:HD13 | 13 | 0.34 |
| (7,322) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD11 | 5 | 0.34 |
| (7,322) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD12 | 5 | 0.34 |
| (7,322) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD13 | 5 | 0.34 |
| (7,322) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD11 | 5 | 0.34 |
| (7,322) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD12 | 5 | 0.34 |
| (7,322) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD13 | 5 | 0.34 |
| (7,322) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD11 | 5 | 0.34 |
| (7,322) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD12 | 5 | 0.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,322) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD13 | 5 | 0.34 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:111:LYS:H | 12 | 0.34 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:111:LYS:H | 12 | 0.34 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:111:LYS:H | 12 | 0.34 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG11 | 1:A:124:PHE:HE1 | 10 | 0.34 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG11 | 1:A:124:PHE:HE2 | 10 | 0.34 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG12 | 1:A:124:PHE:HE1 | 10 | 0.34 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG12 | 1:A:124:PHE:HE2 | 10 | 0.34 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG13 | 1:A:124:PHE:HE1 | 10 | 0.34 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG13 | 1:A:124:PHE:HE2 | 10 | 0.34 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG11 | 1:A:124:PHE:HE1 | 11 | 0.34 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG11 | 1:A:124:PHE:HE2 | 11 | 0.34 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG12 | 1:A:124:PHE:HE1 | 11 | 0.34 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG12 | 1:A:124:PHE:HE2 | 11 | 0.34 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG13 | 1:A:124:PHE:HE1 | 11 | 0.34 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG13 | 1:A:124:PHE:HE2 | 11 | 0.34 |
| (7,15) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:72:VAL:HG21 | 6 | 0.34 |
| (7,15) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:72:VAL:HG22 | 6 | 0.34 |
| (7,15) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:72:VAL:HG23 | 6 | 0.34 |
| (1,951) | 1:A:134:ILE:HD11 | 1:A:135:MET:H | 15 | 0.34 |
| (1,951) | 1:A:134:ILE:HD12 | 1:A:135:MET:H | 15 | 0.34 |
| (1,951) | 1:A:134:ILE:HD13 | 1:A:135:MET:H | 15 | 0.34 |
| (1,915) | 1:A:128:VAL:HB | 1:A:129:TRP:HD1 | 9 | 0.34 |
| (1,901) | 1:A:126:LYS:HD2 | 1:A:127:VAL:HB | 5 | 0.34 |
| (1,901) | 1:A:126:LYS:HD3 | 1:A:127:VAL:HB | 5 | 0.34 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HE1 | 14 | 0.34 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HE2 | 14 | 0.34 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB3 | 1:A:238:TYR:HE1 | 14 | 0.34 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB3 | 1:A:238:TYR:HE2 | 14 | 0.34 |
| (1,820) | 1:A:117:GLY:HA3 | 1:A:119:GLU:H | 7 | 0.34 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB1 | 5 | 0.34 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB2 | 5 | 0.34 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB3 | 5 | 0.34 |
| (1,730) | 1:A:110:SER:H | 1:A:112:ALA:H | 8 | 0.34 |
| (1,726) | 1:A:109:VAL:HB | 1:A:110:SER:H | 2 | 0.34 |
| (1,694) | 1:A:105:VAL:HA | 1:A:188:PHE:HE1 | 13 | 0.34 |
| (1,694) | 1:A:105:VAL:HA | 1:A:188:PHE:HE2 | 13 | 0.34 |
| (1,606) | 1:A:96:TYR:HA | 1:A:102:HIS:HD2 | 1 | 0.34 |
| (1,58) | 1:A:18:TYR:HB2 | 1:A:20:LYS:H | 5 | 0.34 |
| (1,538) | 1:A:92:ARG:H | 1:A:93:ILE:H | 1 | 0.34 |
| (1,538) | 1:A:92:ARG:H | 1:A:93:ILE:H | 4 | 0.34 |
| (1,538) | 1:A:92:ARG:H | 1:A:93:ILE:H | 5 | 0.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,538) | 1:A:92:ARG:H | 1:A:93:ILE:H | 13 | 0.34 |
| (1,538) | 1:A:92:ARG:H | 1:A:93:ILE:H | 15 | 0.34 |
| (1,53) | 1:A:18:TYR:H | 1:A:21:ARG:HG2 | 16 | 0.34 |
| (1,485) | 1:A:89:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB2 | 10 | 0.34 |
| (1,485) | 1:A:89:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB3 | 10 | 0.34 |
| (1,485) | 1:A:89:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB2 | 16 | 0.34 |
| (1,485) | 1:A:89:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB3 | 16 | 0.34 |
| (1,480) | 1:A:88:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB2 | 2 | 0.34 |
| (1,480) | 1:A:88:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB3 | 2 | 0.34 |
| (1,452) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:237:LEU:HG | 5 | 0.34 |
| (1,452) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:237:LEU:HG | 5 | 0.34 |
| (1,451) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:234:ILE:HG13 | 13 | 0.34 |
| (1,451) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:234:ILE:HG13 | 13 | 0.34 |
| (1,344) | 1:A:61:ILE:H | 1:A:63:GLN:HG2 | 6 | 0.34 |
| (1,344) | 1:A:61:ILE:H | 1:A:63:GLN:HG3 | 6 | 0.34 |
| (1,327) | 1:A:59:ILE:HB | 1:A:60:GLU:H | 2 | 0.34 |
| (1,32) | 1:A:15:ALA:H | 1:A:17:ASP:H | 8 | 0.34 |
| (1,27) | 1:A:14:GLN:H | 1:A:16:GLN:H | 12 | 0.34 |
| (1,183) | 1:A:42:MET:H | 1:A:44:LYS:H | 7 | 0.34 |
| (1,1473) | 1:A:236:LYS:HG2 | 1:A:237:LEU:H | 8 | 0.34 |
| (1,1473) | 1:A:236:LYS:HG3 | 1:A:237:LEU:H | 8 | 0.34 |
| (1,1452) | 1:A:234:ILE:HB | 1:A:238:TYR:HD1 | 5 | 0.34 |
| (1,1452) | 1:A:234:ILE:HB | 1:A:238:TYR:HD2 | 5 | 0.34 |
| (1,1452) | 1:A:234:ILE:HB | 1:A:238:TYR:HD1 | 10 | 0.34 |
| (1,1452) | 1:A:234:ILE:HB | 1:A:238:TYR:HD2 | 10 | 0.34 |
| (1,1360) | 1:A:211:VAL:H | 1:A:213:TYR:H | 5 | 0.34 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:228:GLN:H | 10 | 0.34 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:228:GLN:H | 10 | 0.34 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:228:GLN:H | 10 | 0.34 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD11 | 7 | 0.34 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD12 | 7 | 0.34 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD13 | 7 | 0.34 |
| (1,1111) | 1:A:161:ALA:H | 1:A:163:GLY:H | 14 | 0.34 |
| (1,1041) | 1:A:153:GLY:H | 1:A:154:ASN:H | 3 | 0.34 |
| (1,1041) | 1:A:153:GLY:H | 1:A:154:ASN:H | 5 | 0.34 |
| (1,1018) | 1:A:141:GLY:H | 1:A:150:ASP:H | 6 | 0.34 |
| (7,67) | 1:A:57:ARG:HB2 | 1:A:58:VAL:HG21 | 15 | 0.33 |
| (7,67) | 1:A:57:ARG:HB2 | 1:A:58:VAL:HG22 | 15 | 0.33 |
| (7,67) | 1:A:57:ARG:HB2 | 1:A:58:VAL:HG23 | 15 | 0.33 |
| (7,67) | 1:A:57:ARG:HB3 | 1:A:58:VAL:HG21 | 15 | 0.33 |
| (7,67) | 1:A:57:ARG:HB3 | 1:A:58:VAL:HG22 | 15 | 0.33 |
| (7,67) | 1:A:57:ARG:HB3 | 1:A:58:VAL:HG23 | 15 | 0.33 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD11 | 1:A:198:HIS:H | 15 | 0.33 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD12 | 1:A:198:HIS:H | 15 | 0.33 |
| (7,423) | 1:A:196:LEU:HD13 | 1:A:198:HIS:H | 15 | 0.33 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD11 | 1:A:58:VAL:HB | 4 | 0.33 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD12 | 1:A:58:VAL:HB | 4 | 0.33 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD13 | 1:A:58:VAL:HB | 4 | 0.33 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD11 | 1:A:58:VAL:HB | 9 | 0.33 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD12 | 1:A:58:VAL:HB | 9 | 0.33 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD13 | 1:A:58:VAL:HB | 9 | 0.33 |
| (7,417) | 1:A:194:HIS:H | 1:A:211:VAL:HG11 | 15 | 0.33 |
| (7,417) | 1:A:194:HIS:H | 1:A:211:VAL:HG12 | 15 | 0.33 |
| (7,417) | 1:A:194:HIS:H | 1:A:211:VAL:HG13 | 15 | 0.33 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD11 | 1:A:186:ILE:H | 11 | 0.33 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD12 | 1:A:186:ILE:H | 11 | 0.33 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD13 | 1:A:186:ILE:H | 11 | 0.33 |
| (7,329) | 1:A:116:TRP:H | 1:A:200:LEU:HD11 | 6 | 0.33 |
| (7,329) | 1:A:116:TRP:H | 1:A:200:LEU:HD12 | 6 | 0.33 |
| (7,329) | 1:A:116:TRP:H | 1:A:200:LEU:HD13 | 6 | 0.33 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD11 | 6 | 0.33 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD12 | 6 | 0.33 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD13 | 6 | 0.33 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD11 | 6 | 0.33 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD12 | 6 | 0.33 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD13 | 6 | 0.33 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD11 | 6 | 0.33 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD12 | 6 | 0.33 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD13 | 6 | 0.33 |
| (7,256) | 1:A:107:ARG:HG2 | 1:A:108:LEU:HD21 | 11 | 0.33 |
| (7,256) | 1:A:107:ARG:HG2 | 1:A:108:LEU:HD22 | 11 | 0.33 |
| (7,256) | 1:A:107:ARG:HG2 | 1:A:108:LEU:HD23 | 11 | 0.33 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG2 | 15 | 0.33 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG3 | 15 | 0.33 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG2 | 15 | 0.33 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG3 | 15 | 0.33 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG2 | 15 | 0.33 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG3 | 15 | 0.33 |
| (7,159) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:90:THR:H | 11 | 0.33 |
| (7,159) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:90:THR:H | 11 | 0.33 |
| (7,159) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:90:THR:H | 11 | 0.33 |
| (1,882) | 1:A:122:LEU:HG | 1:A:123:HIS:H | 13 | 0.33 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HE1 | 15 | 0.33 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HE2 | 15 | 0.33 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB3 | 1:A:238:TYR:HE1 | 15 | 0.33 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB3 | 1:A:238:TYR:HE2 | 15 | 0.33 |
| (1,820) | 1:A:117:GLY:HA3 | 1:A:119:GLU:H | 2 | 0.33 |
| (1,79) | 1:A:20:LYS:HG2 | 1:A:21:ARG:H | 4 | 0.33 |
| (1,79) | 1:A:20:LYS:HG3 | 1:A:21:ARG:H | 4 | 0.33 |
| (1,785) | 1:A:116:TRP:H | 1:A:118:LYS:H | 7 | 0.33 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HB2 | 10 | 0.33 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HB3 | 10 | 0.33 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HB2 | 10 | 0.33 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HB3 | 10 | 0.33 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HB2 | 10 | 0.33 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HB3 | 10 | 0.33 |
| (1,755) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:114:ASN:H | 12 | 0.33 |
| (1,721) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:188:PHE:HE1 | 2 | 0.33 |
| (1,721) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:188:PHE:HE2 | 2 | 0.33 |
| (1,698) | 1:A:106:ASP:H | 1:A:107:ARG:HG2 | 9 | 0.33 |
| (1,698) | 1:A:106:ASP:H | 1:A:107:ARG:HG3 | 9 | 0.33 |
| (1,693) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:107:ARG:H | 13 | 0.33 |
| (1,56) | 1:A:18:TYR:HB2 | 1:A:20:LYS:H | 5 | 0.33 |
| (1,56) | 1:A:18:TYR:HB3 | 1:A:20:LYS:H | 5 | 0.33 |
| (1,56) | 1:A:18:TYR:HB2 | 1:A:20:LYS:H | 15 | 0.33 |
| (1,56) | 1:A:18:TYR:HB3 | 1:A:20:LYS:H | 15 | 0.33 |
| (1,538) | 1:A:92:ARG:H | 1:A:93:ILE:H | 6 | 0.33 |
| (1,485) | 1:A:89:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB2 | 11 | 0.33 |
| (1,485) | 1:A:89:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB3 | 11 | 0.33 |
| (1,443) | 1:A:82:PRO:HD2 | 1:A:83:LYS:HG2 | 1 | 0.33 |
| (1,443) | 1:A:82:PRO:HD2 | 1:A:83:LYS:HG3 | 1 | 0.33 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG2 | 1:A:163:GLY:HA2 | 5 | 0.33 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG2 | 1:A:163:GLY:HA3 | 5 | 0.33 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG3 | 1:A:163:GLY:HA2 | 5 | 0.33 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG3 | 1:A:163:GLY:HA3 | 5 | 0.33 |
| (1,412) | 1:A:70:PRO:HD2 | 1:A:147:TYR:HD1 | 9 | 0.33 |
| (1,412) | 1:A:70:PRO:HD2 | 1:A:147:TYR:HD2 | 9 | 0.33 |
| (1,412) | 1:A:70:PRO:HD3 | 1:A:147:TYR:HD1 | 9 | 0.33 |
| (1,412) | 1:A:70:PRO:HD3 | 1:A:147:TYR:HD2 | 9 | 0.33 |
| (1,400) | 1:A:68:GLY:H | 1:A:158:HIS:HB3 | 3 | 0.33 |
| (1,395) | 1:A:68:GLY:H | 1:A:155:THR:HA | 9 | 0.33 |
| (1,384) | 1:A:67:CYS:HA | 1:A:69:VAL:H | 5 | 0.33 |
| (1,384) | 1:A:67:CYS:HA | 1:A:69:VAL:H | 7 | 0.33 |
| (1,327) | 1:A:59:ILE:HB | 1:A:60:GLU:H | 15 | 0.33 |
| (1,292) | 1:A:55:ASN:H | 1:A:58:VAL:H | 10 | 0.33 |
| (1,27) | 1:A:14:GLN:H | 1:A:16:GLN:H | 6 | 0.33 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,232) | 1:A:45:PHE:H | 1:A:46:PHE:HD1 | 6 | 0.33 |
| (1,232) | 1:A:45:PHE:H | 1:A:46:PHE:HD2 | 6 | 0.33 |
| (1,213) | 1:A:43:GLN:HA | 1:A:48:LEU:H | 6 | 0.33 |
| (1,169) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:52:GLY:HA2 | 11 | 0.33 |
| (1,1406) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:HG2 | 11 | 0.33 |
| (1,1406) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:HG3 | 11 | 0.33 |
| (1,1241) | 1:A:189:LEU:H | 1:A:191:ALA:H | 13 | 0.33 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD11 | 4 | 0.33 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD12 | 4 | 0.33 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD13 | 4 | 0.33 |
| (1,1187) | 1:A:178:TRP:H | 1:A:178:TRP:HE1 | 2 | 0.33 |
| (1,1163) | 1:A:173:ASP:H | 1:A:178:TRP:HE1 | 16 | 0.33 |
| (1,1160) | 1:A:173:ASP:H | 1:A:174:GLU:H | 2 | 0.33 |
| (1,1060) | 1:A:156:LEU:HB3 | 1:A:178:TRP:HH2 | 4 | 0.33 |
| (1,1050) | 1:A:155:THR:HA | 1:A:157:ALA:H | 10 | 0.33 |
| (1,1041) | 1:A:153:GLY:H | 1:A:154:ASN:H | 1 | 0.33 |
| (1,1041) | 1:A:153:GLY:H | 1:A:154:ASN:H | 6 | 0.33 |
| (1,1041) | 1:A:153:GLY:H | 1:A:154:ASN:H | 8 | 0.33 |
| (1,1022) | 1:A:143:HIS:H | 1:A:145:ASP:H | 2 | 0.33 |
| (1,1022) | 1:A:143:HIS:H | 1:A:145:ASP:H | 2 | 0.33 |
| (1,1022) | 1:A:143:HIS:H | 1:A:145:ASP:H | 11 | 0.33 |
| (1,1022) | 1:A:143:HIS:H | 1:A:145:ASP:H | 11 | 0.33 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG21 | 11 | 0.32 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG22 | 11 | 0.32 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG23 | 11 | 0.32 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD11 | 14 | 0.32 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD12 | 14 | 0.32 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD13 | 14 | 0.32 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD11 | 14 | 0.32 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD12 | 14 | 0.32 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD13 | 14 | 0.32 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD11 | 14 | 0.32 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD12 | 14 | 0.32 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD13 | 14 | 0.32 |
| (7,241) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG11 | 3 | 0.32 |
| (7,241) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG12 | 3 | 0.32 |
| (7,241) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG13 | 3 | 0.32 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG2 | 5 | 0.32 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG3 | 5 | 0.32 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG2 | 5 | 0.32 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG3 | 5 | 0.32 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG2 | 5 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG3 | 5 | 0.32 |
| (7,190) | 1:A:91:TYR:HE1 | 1:A:113:LEU:HD11 | 16 | 0.32 |
| (7,190) | 1:A:91:TYR:HE1 | 1:A:113:LEU:HD12 | 16 | 0.32 |
| (7,190) | 1:A:91:TYR:HE1 | 1:A:113:LEU:HD13 | 16 | 0.32 |
| (7,190) | 1:A:91:TYR:HE2 | 1:A:113:LEU:HD11 | 16 | 0.32 |
| (7,190) | 1:A:91:TYR:HE2 | 1:A:113:LEU:HD12 | 16 | 0.32 |
| (7,190) | 1:A:91:TYR:HE2 | 1:A:113:LEU:HD13 | 16 | 0.32 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG21 | 1 | 0.32 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG22 | 1 | 0.32 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG23 | 1 | 0.32 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:H | 3 | 0.32 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:H | 3 | 0.32 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:H | 3 | 0.32 |
| (5,2) | 1:A:66:ARG:NH2 | 1:A:71:ASP:OD1 | 7 | 0.32 |
| (1,996) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:178:TRP:HE1 | 10 | 0.32 |
| (1,996) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:178:TRP:HE1 | 10 | 0.32 |
| (1,945) | 1:A:134:ILE:H | 1:A:136:ILE:HD11 | 5 | 0.32 |
| (1,945) | 1:A:134:ILE:H | 1:A:136:ILE:HD12 | 5 | 0.32 |
| (1,945) | 1:A:134:ILE:H | 1:A:136:ILE:HD13 | 5 | 0.32 |
| (1,901) | 1:A:126:LYS:HD2 | 1:A:127:VAL:HB | 2 | 0.32 |
| (1,901) | 1:A:126:LYS:HD3 | 1:A:127:VAL:HB | 2 | 0.32 |
| (1,882) | 1:A:122:LEU:HG | 1:A:123:HIS:H | 1 | 0.32 |
| (1,882) | 1:A:122:LEU:HG | 1:A:123:HIS:H | 3 | 0.32 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:202:MET:HE1 | 1 | 0.32 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:202:MET:HE2 | 1 | 0.32 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:202:MET:HE3 | 1 | 0.32 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:202:MET:HE1 | 1 | 0.32 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:202:MET:HE2 | 1 | 0.32 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:202:MET:HE3 | 1 | 0.32 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:202:MET:HE1 | 1 | 0.32 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:202:MET:HE2 | 1 | 0.32 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:202:MET:HE3 | 1 | 0.32 |
| (1,820) | 1:A:117:GLY:HA3 | 1:A:119:GLU:H | 5 | 0.32 |
| (1,785) | 1:A:116:TRP:H | 1:A:118:LYS:H | 3 | 0.32 |
| (1,761) | 1:A:113:LEU:HB2 | 1:A:124:PHE:HD1 | 2 | 0.32 |
| (1,761) | 1:A:113:LEU:HB2 | 1:A:124:PHE:HD2 | 2 | 0.32 |
| (1,761) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:124:PHE:HD1 | 2 | 0.32 |
| (1,761) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:124:PHE:HD2 | 2 | 0.32 |
| (1,761) | 1:A:113:LEU:HB2 | 1:A:124:PHE:HD1 | 15 | 0.32 |
| (1,761) | 1:A:113:LEU:HB2 | 1:A:124:PHE:HD2 | 15 | 0.32 |
| (1,761) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:124:PHE:HD1 | 15 | 0.32 |
| (1,761) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:124:PHE:HD2 | 15 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,75) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:22:PHE:H | 12 | 0.32 |
| (1,693) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:107:ARG:H | 7 | 0.32 |
| (1,631) | 1:A:98:ARG:H | 1:A:100:LEU:H | 2 | 0.32 |
| (1,56) | 1:A:18:TYR:HB2 | 1:A:20:LYS:H | 8 | 0.32 |
| (1,56) | 1:A:18:TYR:HB3 | 1:A:20:LYS:H | 8 | 0.32 |
| (1,538) | 1:A:92:ARG:H | 1:A:93:ILE:H | 2 | 0.32 |
| (1,53) | 1:A:18:TYR:H | 1:A:21:ARG:HG2 | 7 | 0.32 |
| (1,486) | 1:A:89:VAL:H | 1:A:123:HIS:HD2 | 11 | 0.32 |
| (1,454) | 1:A:83:LYS:HE2 | 1:A:202:MET:HE1 | 8 | 0.32 |
| (1,454) | 1:A:83:LYS:HE2 | 1:A:202:MET:HE2 | 8 | 0.32 |
| (1,454) | 1:A:83:LYS:HE2 | 1:A:202:MET:HE3 | 8 | 0.32 |
| (1,454) | 1:A:83:LYS:HE3 | 1:A:202:MET:HE1 | 8 | 0.32 |
| (1,454) | 1:A:83:LYS:HE3 | 1:A:202:MET:HE2 | 8 | 0.32 |
| (1,454) | 1:A:83:LYS:HE3 | 1:A:202:MET:HE3 | 8 | 0.32 |
| (1,451) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:234:ILE:HG13 | 5 | 0.32 |
| (1,451) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:234:ILE:HG13 | 5 | 0.32 |
| (1,449) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:202:MET:HE1 | 5 | 0.32 |
| (1,449) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:202:MET:HE2 | 5 | 0.32 |
| (1,449) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:202:MET:HE3 | 5 | 0.32 |
| (1,449) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:202:MET:HE1 | 5 | 0.32 |
| (1,449) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:202:MET:HE2 | 5 | 0.32 |
| (1,449) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:202:MET:HE3 | 5 | 0.32 |
| (1,443) | 1:A:82:PRO:HD2 | 1:A:83:LYS:HG2 | 6 | 0.32 |
| (1,443) | 1:A:82:PRO:HD2 | 1:A:83:LYS:HG3 | 6 | 0.32 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG2 | 1:A:163:GLY:HA2 | 1 | 0.32 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG2 | 1:A:163:GLY:HA3 | 1 | 0.32 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG3 | 1:A:163:GLY:HA2 | 1 | 0.32 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG3 | 1:A:163:GLY:HA3 | 1 | 0.32 |
| (1,438) | 1:A:79:PRO:HG2 | 1:A:161:ALA:HB1 | 10 | 0.32 |
| (1,438) | 1:A:79:PRO:HG2 | 1:A:161:ALA:HB2 | 10 | 0.32 |
| (1,438) | 1:A:79:PRO:HG2 | 1:A:161:ALA:HB3 | 10 | 0.32 |
| (1,438) | 1:A:79:PRO:HG3 | 1:A:161:ALA:HB1 | 10 | 0.32 |
| (1,438) | 1:A:79:PRO:HG3 | 1:A:161:ALA:HB2 | 10 | 0.32 |
| (1,438) | 1:A:79:PRO:HG3 | 1:A:161:ALA:HB3 | 10 | 0.32 |
| (1,408) | 1:A:69:VAL:HA | 1:A:70:PRO:HG2 | 11 | 0.32 |
| (1,408) | 1:A:69:VAL:HA | 1:A:70:PRO:HG3 | 11 | 0.32 |
| (1,27) | 1:A:14:GLN:H | 1:A:16:GLN:H | 9 | 0.32 |
| (1,183) | 1:A:42:MET:H | 1:A:44:LYS:H | 14 | 0.32 |
| (1,169) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:52:GLY:HA2 | 14 | 0.32 |
| (1,168) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:52:GLY:H | 8 | 0.32 |
| (1,1467) | 1:A:236:LYS:H | 1:A:236:LYS:HG2 | 3 | 0.32 |
| (1,1467) | 1:A:236:LYS:H | 1:A:236:LYS:HG3 | 3 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1413) | 1:A:231:ILE:H | 1:A:232:LYS:HB3 | 1 | 0.32 |
| (1,1406) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:HG2 | 12 | 0.32 |
| (1,1406) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:HG3 | 12 | 0.32 |
| (1,1147) | 1:A:172:PHE:HB2 | 1:A:173:ASP:H | 10 | 0.32 |
| (1,1147) | 1:A:172:PHE:HB2 | 1:A:173:ASP:H | 15 | 0.32 |
| (1,112) | 1:A:25:TYR:HE1 | 1:A:27:SER:HB2 | 14 | 0.32 |
| (1,112) | 1:A:25:TYR:HE1 | 1:A:27:SER:HB3 | 14 | 0.32 |
| (1,112) | 1:A:25:TYR:HE2 | 1:A:27:SER:HB2 | 14 | 0.32 |
| (1,112) | 1:A:25:TYR:HE2 | 1:A:27:SER:HB3 | 14 | 0.32 |
| (1,1080) | 1:A:158:HIS:H | 1:A:158:HIS:HE1 | 2 | 0.32 |
| (1,1041) | 1:A:153:GLY:H | 1:A:154:ASN:H | 16 | 0.32 |
| (1,1024) | 1:A:143:HIS:HE1 | 1:A:160:PHE:HE1 | 3 | 0.32 |
| (1,1024) | 1:A:143:HIS:HE1 | 1:A:160:PHE:HE2 | 3 | 0.32 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:56:SER:H | 16 | 0.31 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:56:SER:H | 16 | 0.31 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:56:SER:H | 16 | 0.31 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:211:VAL:HG11 | 11 | 0.31 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:211:VAL:HG12 | 11 | 0.31 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:211:VAL:HG13 | 11 | 0.31 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:211:VAL:HG11 | 11 | 0.31 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:211:VAL:HG12 | 11 | 0.31 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:211:VAL:HG13 | 11 | 0.31 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:211:VAL:HG11 | 11 | 0.31 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:211:VAL:HG12 | 11 | 0.31 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:211:VAL:HG13 | 11 | 0.31 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:173:ASP:HB2 | 3 | 0.31 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:173:ASP:HB3 | 3 | 0.31 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:173:ASP:HB2 | 3 | 0.31 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:173:ASP:HB3 | 3 | 0.31 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:173:ASP:HB2 | 3 | 0.31 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:173:ASP:HB3 | 3 | 0.31 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:173:ASP:HB2 | 13 | 0.31 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:173:ASP:HB3 | 13 | 0.31 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:173:ASP:HB2 | 13 | 0.31 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:173:ASP:HB3 | 13 | 0.31 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:173:ASP:HB2 | 13 | 0.31 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:173:ASP:HB3 | 13 | 0.31 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG11 | 1:A:137:GLY:HA2 | 8 | 0.31 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG11 | 1:A:137:GLY:HA3 | 8 | 0.31 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG12 | 1:A:137:GLY:HA2 | 8 | 0.31 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG12 | 1:A:137:GLY:HA3 | 8 | 0.31 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG13 | 1:A:137:GLY:HA2 | 8 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG13 | 1:A:137:GLY:HA3 | 8 | 0.31 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG11 | 1:A:137:GLY:HA2 | 9 | 0.31 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG11 | 1:A:137:GLY:HA3 | 9 | 0.31 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG12 | 1:A:137:GLY:HA2 | 9 | 0.31 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG12 | 1:A:137:GLY:HA3 | 9 | 0.31 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG13 | 1:A:137:GLY:HA2 | 9 | 0.31 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG13 | 1:A:137:GLY:HA3 | 9 | 0.31 |
| (7,19) | 1:A:24:LEU:HD21 | 1:A:70:PRO:HG2 | 10 | 0.31 |
| (7,19) | 1:A:24:LEU:HD21 | 1:A:70:PRO:HG3 | 10 | 0.31 |
| (7,19) | 1:A:24:LEU:HD22 | 1:A:70:PRO:HG2 | 10 | 0.31 |
| (7,19) | 1:A:24:LEU:HD22 | 1:A:70:PRO:HG3 | 10 | 0.31 |
| (7,19) | 1:A:24:LEU:HD23 | 1:A:70:PRO:HG2 | 10 | 0.31 |
| (7,19) | 1:A:24:LEU:HD23 | 1:A:70:PRO:HG3 | 10 | 0.31 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG21 | 7 | 0.31 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG22 | 7 | 0.31 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG23 | 7 | 0.31 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG11 | 1:A:124:PHE:HE1 | 13 | 0.31 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG11 | 1:A:124:PHE:HE2 | 13 | 0.31 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG12 | 1:A:124:PHE:HE1 | 13 | 0.31 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG12 | 1:A:124:PHE:HE2 | 13 | 0.31 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG13 | 1:A:124:PHE:HE1 | 13 | 0.31 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG13 | 1:A:124:PHE:HE2 | 13 | 0.31 |
| (7,15) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:72:VAL:HG21 | 10 | 0.31 |
| (7,15) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:72:VAL:HG22 | 10 | 0.31 |
| (7,15) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:72:VAL:HG23 | 10 | 0.31 |
| (6,2) | 1:A:90:THR:HG1 | 1:A:133:ASP:OD2 | 10 | 0.31 |
| (1,985) | 1:A:137:GLY:H | 1:A:170:ALA:H | 16 | 0.31 |
| (1,915) | 1:A:128:VAL:HB | 1:A:129:TRP:HD1 | 4 | 0.31 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HE1 | 2 | 0.31 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HE2 | 2 | 0.31 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB3 | 1:A:238:TYR:HE1 | 2 | 0.31 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB3 | 1:A:238:TYR:HE2 | 2 | 0.31 |
| (1,87) | 1:A:21:ARG:H | 1:A:22:PHE:HB2 | 9 | 0.31 |
| (1,87) | 1:A:21:ARG:H | 1:A:22:PHE:HB3 | 9 | 0.31 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:202:MET:HE1 | 2 | 0.31 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:202:MET:HE2 | 2 | 0.31 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:202:MET:HE3 | 2 | 0.31 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:202:MET:HE1 | 2 | 0.31 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:202:MET:HE2 | 2 | 0.31 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:202:MET:HE3 | 2 | 0.31 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:202:MET:HE1 | 2 | 0.31 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:202:MET:HE2 | 2 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:202:MET:HE3 | 2 | 0.31 |
| (1,818) | 1:A:117:GLY:HA2 | 1:A:120:ILE:HG21 | 10 | 0.31 |
| (1,818) | 1:A:117:GLY:HA2 | 1:A:120:ILE:HG22 | 10 | 0.31 |
| (1,818) | 1:A:117:GLY:HA2 | 1:A:120:ILE:HG23 | 10 | 0.31 |
| (1,818) | 1:A:117:GLY:HA2 | 1:A:120:ILE:HG21 | 10 | 0.31 |
| (1,818) | 1:A:117:GLY:HA2 | 1:A:120:ILE:HG22 | 10 | 0.31 |
| (1,818) | 1:A:117:GLY:HA2 | 1:A:120:ILE:HG23 | 10 | 0.31 |
| (1,802) | 1:A:116:TRP:HE1 | 1:A:202:MET:HB2 | 12 | 0.31 |
| (1,802) | 1:A:116:TRP:HE1 | 1:A:202:MET:HB3 | 12 | 0.31 |
| (1,801) | 1:A:116:TRP:HE1 | 1:A:198:HIS:H | 6 | 0.31 |
| (1,79) | 1:A:20:LYS:HG2 | 1:A:21:ARG:H | 13 | 0.31 |
| (1,79) | 1:A:20:LYS:HG3 | 1:A:21:ARG:H | 13 | 0.31 |
| (1,785) | 1:A:116:TRP:H | 1:A:118:LYS:H | 12 | 0.31 |
| (1,755) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:114:ASN:H | 2 | 0.31 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB1 | 11 | 0.31 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB2 | 11 | 0.31 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB3 | 11 | 0.31 |
| (1,721) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:188:PHE:HE1 | 6 | 0.31 |
| (1,721) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:188:PHE:HE2 | 6 | 0.31 |
| (1,692) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:106:ASP:HB2 | 2 | 0.31 |
| (1,692) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:106:ASP:HB3 | 2 | 0.31 |
| (1,606) | 1:A:96:TYR:HA | 1:A:102:HIS:HD2 | 15 | 0.31 |
| (1,603) | 1:A:95:SER:HB2 | 1:A:138:PHE:HD1 | 5 | 0.31 |
| (1,603) | 1:A:95:SER:HB2 | 1:A:138:PHE:HD2 | 5 | 0.31 |
| (1,603) | 1:A:95:SER:HB3 | 1:A:138:PHE:HD1 | 5 | 0.31 |
| (1,603) | 1:A:95:SER:HB3 | 1:A:138:PHE:HD2 | 5 | 0.31 |
| (1,568) | 1:A:92:ARG:HE | 1:A:127:VAL:HB | 1 | 0.31 |
| (1,553) | 1:A:92:ARG:HB2 | 1:A:131:THR:HA | 12 | 0.31 |
| (1,532) | 1:A:91:TYR:HD1 | 1:A:126:LYS:HA | 12 | 0.31 |
| (1,532) | 1:A:91:TYR:HD2 | 1:A:126:LYS:HA | 12 | 0.31 |
| (1,53) | 1:A:18:TYR:H | 1:A:21:ARG:HG2 | 2 | 0.31 |
| (1,486) | 1:A:89:VAL:H | 1:A:123:HIS:HD2 | 3 | 0.31 |
| (1,46) | 1:A:16:GLN:HE21 | 1:A:35:LEU:H | 4 | 0.31 |
| (1,46) | 1:A:16:GLN:HE22 | 1:A:35:LEU:H | 4 | 0.31 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG2 | 1:A:163:GLY:HA2 | 2 | 0.31 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG2 | 1:A:163:GLY:HA3 | 2 | 0.31 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG3 | 1:A:163:GLY:HA2 | 2 | 0.31 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG3 | 1:A:163:GLY:HA3 | 2 | 0.31 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG2 | 1:A:163:GLY:HA2 | 13 | 0.31 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG2 | 1:A:163:GLY:HA3 | 13 | 0.31 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG3 | 1:A:163:GLY:HA2 | 13 | 0.31 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG3 | 1:A:163:GLY:HA3 | 13 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,408) | 1:A:69:VAL:HA | 1:A:70:PRO:HG2 | 8 | 0.31 |
| (1,408) | 1:A:69:VAL:HA | 1:A:70:PRO:HG3 | 8 | 0.31 |
| (1,401) | 1:A:68:GLY:H | 1:A:159:ALA:H | 7 | 0.31 |
| (1,353) | 1:A:61:ILE:HB | 1:A:215:THR:HG21 | 7 | 0.31 |
| (1,353) | 1:A:61:ILE:HB | 1:A:215:THR:HG22 | 7 | 0.31 |
| (1,353) | 1:A:61:ILE:HB | 1:A:215:THR:HG23 | 7 | 0.31 |
| (1,353) | 1:A:61:ILE:HB | 1:A:215:THR:HG21 | 8 | 0.31 |
| (1,353) | 1:A:61:ILE:HB | 1:A:215:THR:HG22 | 8 | 0.31 |
| (1,353) | 1:A:61:ILE:HB | 1:A:215:THR:HG23 | 8 | 0.31 |
| (1,232) | 1:A:45:PHE:H | 1:A:46:PHE:HD1 | 12 | 0.31 |
| (1,232) | 1:A:45:PHE:H | 1:A:46:PHE:HD2 | 12 | 0.31 |
| (1,192) | 1:A:42:MET:HE1 | 1:A:61:ILE:HB | 11 | 0.31 |
| (1,192) | 1:A:42:MET:HE2 | 1:A:61:ILE:HB | 11 | 0.31 |
| (1,192) | 1:A:42:MET:HE3 | 1:A:61:ILE:HB | 11 | 0.31 |
| (1,183) | 1:A:42:MET:H | 1:A:44:LYS:H | 3 | 0.31 |
| (1,169) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:52:GLY:HA2 | 6 | 0.31 |
| (1,169) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:52:GLY:HA2 | 10 | 0.31 |
| (1,1452) | 1:A:234:ILE:HB | 1:A:238:TYR:HD1 | 8 | 0.31 |
| (1,1452) | 1:A:234:ILE:HB | 1:A:238:TYR:HD2 | 8 | 0.31 |
| (1,1434) | 1:A:232:LYS:HB3 | 1:A:233:GLY:H | 6 | 0.31 |
| (1,1434) | 1:A:232:LYS:HB3 | 1:A:233:GLY:H | 7 | 0.31 |
| (1,1434) | 1:A:232:LYS:HB3 | 1:A:233:GLY:H | 14 | 0.31 |
| (1,1405) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:H | 12 | 0.31 |
| (1,1405) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:H | 12 | 0.31 |
| (1,1402) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HB | 6 | 0.31 |
| (1,1398) | 1:A:228:GLN:H | 1:A:230:ASP:HB2 | 3 | 0.31 |
| (1,1398) | 1:A:228:GLN:H | 1:A:230:ASP:HB3 | 3 | 0.31 |
| (1,1241) | 1:A:189:LEU:H | 1:A:191:ALA:H | 4 | 0.31 |
| (1,1126) | 1:A:165:GLY:HA2 | 1:A:167:GLY:H | 11 | 0.31 |
| (1,1126) | 1:A:165:GLY:HA3 | 1:A:167:GLY:H | 11 | 0.31 |
| (1,1058) | 1:A:156:LEU:HB2 | 1:A:178:TRP:HH2 | 3 | 0.31 |
| (1,1058) | 1:A:156:LEU:HB3 | 1:A:178:TRP:HH2 | 3 | 0.31 |
| (1,1050) | 1:A:155:THR:HA | 1:A:157:ALA:H | 1 | 0.31 |
| (1,1041) | 1:A:153:GLY:H | 1:A:154:ASN:H | 13 | 0.31 |
| (1,1024) | 1:A:143:HIS:HE1 | 1:A:160:PHE:HE1 | 8 | 0.31 |
| (1,1024) | 1:A:143:HIS:HE1 | 1:A:160:PHE:HE2 | 8 | 0.31 |
| (1,1008) | 1:A:139:ALA:HB1 | 1:A:143:HIS:HD2 | 9 | 0.31 |
| (1,1008) | 1:A:139:ALA:HB2 | 1:A:143:HIS:HD2 | 9 | 0.31 |
| (1,1008) | 1:A:139:ALA:HB3 | 1:A:143:HIS:HD2 | 9 | 0.31 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:59:ILE:HG21 | 4 | 0.3 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:59:ILE:HG22 | 4 | 0.3 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:59:ILE:HG23 | 4 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:59:ILE:HG21 | 4 | 0.3 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:59:ILE:HG22 | 4 | 0.3 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:59:ILE:HG23 | 4 | 0.3 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:59:ILE:HG21 | 4 | 0.3 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:59:ILE:HG22 | 4 | 0.3 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:59:ILE:HG23 | 4 | 0.3 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD11 | 1:A:186:ILE:H | 15 | 0.3 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD12 | 1:A:186:ILE:H | 15 | 0.3 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD13 | 1:A:186:ILE:H | 15 | 0.3 |
| (7,368) | 1:A:127:VAL:HG11 | 1:A:129:TRP:H | 9 | 0.3 |
| (7,368) | 1:A:127:VAL:HG12 | 1:A:129:TRP:H | 9 | 0.3 |
| (7,368) | 1:A:127:VAL:HG13 | 1:A:129:TRP:H | 9 | 0.3 |
| (7,364) | 1:A:127:VAL:HG11 | 1:A:129:TRP:H | 9 | 0.3 |
| (7,364) | 1:A:127:VAL:HG12 | 1:A:129:TRP:H | 9 | 0.3 |
| (7,364) | 1:A:127:VAL:HG13 | 1:A:129:TRP:H | 9 | 0.3 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG21 | 16 | 0.3 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG22 | 16 | 0.3 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG23 | 16 | 0.3 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:134:ILE:HD11 | 13 | 0.3 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:134:ILE:HD12 | 13 | 0.3 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:134:ILE:HD13 | 13 | 0.3 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:134:ILE:HD11 | 13 | 0.3 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:134:ILE:HD12 | 13 | 0.3 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:134:ILE:HD13 | 13 | 0.3 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:134:ILE:HD11 | 13 | 0.3 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:134:ILE:HD12 | 13 | 0.3 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:134:ILE:HD13 | 13 | 0.3 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD11 | 15 | 0.3 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD12 | 15 | 0.3 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD13 | 15 | 0.3 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD11 | 15 | 0.3 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD12 | 15 | 0.3 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD13 | 15 | 0.3 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD11 | 15 | 0.3 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD12 | 15 | 0.3 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD13 | 15 | 0.3 |
| (7,301) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:196:LEU:HD11 | 4 | 0.3 |
| (7,301) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:196:LEU:HD12 | 4 | 0.3 |
| (7,301) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:196:LEU:HD13 | 4 | 0.3 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:111:LYS:H | 6 | 0.3 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:111:LYS:H | 6 | 0.3 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:111:LYS:H | 6 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG11 | 1:A:138:PHE:H | 5 | 0.3 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG12 | 1:A:138:PHE:H | 5 | 0.3 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG13 | 1:A:138:PHE:H | 5 | 0.3 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG2 | 3 | 0.3 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG3 | 3 | 0.3 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG2 | 3 | 0.3 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG3 | 3 | 0.3 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG2 | 3 | 0.3 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG3 | 3 | 0.3 |
| (7,205) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HE1 | 11 | 0.3 |
| (7,205) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HE2 | 11 | 0.3 |
| (7,205) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HE3 | 11 | 0.3 |
| (7,205) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HE1 | 11 | 0.3 |
| (7,205) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HE2 | 11 | 0.3 |
| (7,205) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HE3 | 11 | 0.3 |
| (7,205) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HE1 | 11 | 0.3 |
| (7,205) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HE2 | 11 | 0.3 |
| (7,205) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HE3 | 11 | 0.3 |
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:188:PHE:HE1 | 12 | 0.3 |
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:188:PHE:HE2 | 12 | 0.3 |
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:188:PHE:HE1 | 12 | 0.3 |
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:188:PHE:HE2 | 12 | 0.3 |
| (1,994) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:139:ALA:H | 11 | 0.3 |
| (1,994) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:139:ALA:H | 11 | 0.3 |
| (1,951) | 1:A:134:ILE:HD11 | 1:A:135:MET:H | 5 | 0.3 |
| (1,951) | 1:A:134:ILE:HD12 | 1:A:135:MET:H | 5 | 0.3 |
| (1,951) | 1:A:134:ILE:HD13 | 1:A:135:MET:H | 5 | 0.3 |
| (1,915) | 1:A:128:VAL:HB | 1:A:129:TRP:HD1 | 5 | 0.3 |
| (1,901) | 1:A:126:LYS:HD2 | 1:A:127:VAL:HB | 13 | 0.3 |
| (1,901) | 1:A:126:LYS:HD3 | 1:A:127:VAL:HB | 13 | 0.3 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:238:TYR:HB2 | 4 | 0.3 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:238:TYR:HB3 | 4 | 0.3 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:238:TYR:HB2 | 4 | 0.3 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:238:TYR:HB3 | 4 | 0.3 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:238:TYR:HB2 | 4 | 0.3 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:238:TYR:HB3 | 4 | 0.3 |
| (1,820) | 1:A:117:GLY:HA3 | 1:A:119:GLU:H | 4 | 0.3 |
| (1,777) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:224:PHE:HB2 | 6 | 0.3 |
| (1,777) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:224:PHE:HB3 | 6 | 0.3 |
| (1,777) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:224:PHE:HB2 | 6 | 0.3 |
| (1,777) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:224:PHE:HB3 | 6 | 0.3 |
| (1,777) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:224:PHE:HB2 | 6 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,777) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:224:PHE:HB3 | 6 | 0.3 |
| (1,761) | 1:A:113:LEU:HB2 | 1:A:124:PHE:HD1 | 5 | 0.3 |
| (1,761) | 1:A:113:LEU:HB2 | 1:A:124:PHE:HD2 | 5 | 0.3 |
| (1,761) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:124:PHE:HD1 | 5 | 0.3 |
| (1,761) | 1:A:113:LEU:HB3 | 1:A:124:PHE:HD2 | 5 | 0.3 |
| (1,730) | 1:A:110:SER:H | 1:A:112:ALA:H | 10 | 0.3 |
| (1,721) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:188:PHE:HE1 | 11 | 0.3 |
| (1,721) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:188:PHE:HE2 | 11 | 0.3 |
| (1,698) | 1:A:106:ASP:H | 1:A:107:ARG:HG2 | 7 | 0.3 |
| (1,698) | 1:A:106:ASP:H | 1:A:107:ARG:HG3 | 7 | 0.3 |
| (1,694) | 1:A:105:VAL:HA | 1:A:188:PHE:HE1 | 9 | 0.3 |
| (1,694) | 1:A:105:VAL:HA | 1:A:188:PHE:HE2 | 9 | 0.3 |
| (1,693) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:107:ARG:H | 12 | 0.3 |
| (1,692) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:106:ASP:HB2 | 3 | 0.3 |
| (1,692) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:106:ASP:HB3 | 3 | 0.3 |
| (1,692) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:106:ASP:HB2 | 6 | 0.3 |
| (1,692) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:106:ASP:HB3 | 6 | 0.3 |
| (1,631) | 1:A:98:ARG:H | 1:A:100:LEU:H | 8 | 0.3 |
| (1,461) | 1:A:84:TRP:H | 1:A:234:ILE:HD11 | 8 | 0.3 |
| (1,461) | 1:A:84:TRP:H | 1:A:234:ILE:HD12 | 8 | 0.3 |
| (1,461) | 1:A:84:TRP:H | 1:A:234:ILE:HD13 | 8 | 0.3 |
| (1,408) | 1:A:69:VAL:HA | 1:A:70:PRO:HG2 | 1 | 0.3 |
| (1,408) | 1:A:69:VAL:HA | 1:A:70:PRO:HG3 | 1 | 0.3 |
| (1,408) | 1:A:69:VAL:HA | 1:A:70:PRO:HG2 | 13 | 0.3 |
| (1,408) | 1:A:69:VAL:HA | 1:A:70:PRO:HG3 | 13 | 0.3 |
| (1,406) | 1:A:69:VAL:H | 1:A:159:ALA:H | 16 | 0.3 |
| (1,406) | 1:A:69:VAL:H | 1:A:159:ALA:H | 16 | 0.3 |
| (1,402) | 1:A:68:GLY:H | 1:A:198:HIS:HD2 | 1 | 0.3 |
| (1,401) | 1:A:68:GLY:H | 1:A:159:ALA:H | 2 | 0.3 |
| (1,386) | 1:A:67:CYS:HB2 | 1:A:69:VAL:H | 15 | 0.3 |
| (1,386) | 1:A:67:CYS:HB3 | 1:A:69:VAL:H | 15 | 0.3 |
| (1,375) | 1:A:66:ARG:H | 1:A:22:PHE:HZ | 7 | 0.3 |
| (1,336) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:MET:HG2 | 15 | 0.3 |
| (1,336) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:MET:HG3 | 15 | 0.3 |
| (1,327) | 1:A:59:ILE:HB | 1:A:60:GLU:H | 7 | 0.3 |
| (1,314) | 1:A:58:VAL:H | 1:A:60:GLU:H | 4 | 0.3 |
| (1,292) | 1:A:55:ASN:H | 1:A:58:VAL:H | 5 | 0.3 |
| (1,277) | 1:A:50:ILE:H | 1:A:51:THR:H | 6 | 0.3 |
| (1,269) | 1:A:48:LEU:HG | 1:A:215:THR:HG21 | 6 | 0.3 |
| (1,269) | 1:A:48:LEU:HG | 1:A:215:THR:HG22 | 6 | 0.3 |
| (1,269) | 1:A:48:LEU:HG | 1:A:215:THR:HG23 | 6 | 0.3 |
| (1,257) | 1:A:46:PHE:HE1 | 1:A:61:ILE:HA | 11 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,257) | 1:A:46:PHE:HE2 | 1:A:61:ILE:HA | 11 | 0.3 |
| (1,183) | 1:A:42:MET:H | 1:A:44:LYS:H | 8 | 0.3 |
| (1,183) | 1:A:42:MET:H | 1:A:44:LYS:H | 12 | 0.3 |
| (1,169) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:52:GLY:HA2 | 15 | 0.3 |
| (1,168) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:52:GLY:H | 14 | 0.3 |
| (1,166) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:41:GLU:HG2 | 6 | 0.3 |
| (1,160) | 1:A:39:LEU:H | 1:A:40:LYS:HB2 | 7 | 0.3 |
| (1,160) | 1:A:39:LEU:H | 1:A:40:LYS:HB3 | 7 | 0.3 |
| (1,1452) | 1:A:234:ILE:HB | 1:A:238:TYR:HD1 | 16 | 0.3 |
| (1,1452) | 1:A:234:ILE:HB | 1:A:238:TYR:HD2 | 16 | 0.3 |
| (1,1440) | 1:A:233:GLY:HA2 | 1:A:235:GLN:H | 7 | 0.3 |
| (1,1399) | 1:A:228:GLN:HA | 1:A:230:ASP:HB2 | 12 | 0.3 |
| (1,1399) | 1:A:228:GLN:HA | 1:A:230:ASP:HB3 | 12 | 0.3 |
| (1,1360) | 1:A:211:VAL:H | 1:A:213:TYR:H | 14 | 0.3 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:228:GLN:H | 1 | 0.3 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:228:GLN:H | 1 | 0.3 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:228:GLN:H | 1 | 0.3 |
| (1,1295) | 1:A:199:SER:H | 1:A:201:GLY:H | 14 | 0.3 |
| (1,1210) | 1:A:179:THR:HG21 | 1:A:181:GLY:H | 5 | 0.3 |
| (1,1210) | 1:A:179:THR:HG22 | 1:A:181:GLY:H | 5 | 0.3 |
| (1,1210) | 1:A:179:THR:HG23 | 1:A:181:GLY:H | 5 | 0.3 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD11 | 10 | 0.3 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD12 | 10 | 0.3 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD13 | 10 | 0.3 |
| (1,1199) | 1:A:178:TRP:HZ2 | 1:A:186:ILE:HG13 | 10 | 0.3 |
| (1,1095) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:160:PHE:HD1 | 3 | 0.3 |
| (1,1095) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:160:PHE:HD2 | 3 | 0.3 |
| (1,1095) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:160:PHE:HD1 | 14 | 0.3 |
| (1,1095) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:160:PHE:HD2 | 14 | 0.3 |
| (1,1041) | 1:A:153:GLY:H | 1:A:154:ASN:H | 11 | 0.3 |
| (1,1024) | 1:A:143:HIS:HE1 | 1:A:160:PHE:HE1 | 4 | 0.3 |
| (1,1024) | 1:A:143:HIS:HE1 | 1:A:160:PHE:HE2 | 4 | 0.3 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:56:SER:H | 1 | 0.29 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:56:SER:H | 1 | 0.29 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:56:SER:H | 1 | 0.29 |
| (7,440) | 1:A:211:VAL:HG21 | 1:A:226:LEU:HD21 | 6 | 0.29 |
| (7,440) | 1:A:211:VAL:HG21 | 1:A:226:LEU:HD22 | 6 | 0.29 |
| (7,440) | 1:A:211:VAL:HG21 | 1:A:226:LEU:HD23 | 6 | 0.29 |
| (7,440) | 1:A:211:VAL:HG22 | 1:A:226:LEU:HD21 | 6 | 0.29 |
| (7,440) | 1:A:211:VAL:HG22 | 1:A:226:LEU:HD22 | 6 | 0.29 |
| (7,440) | 1:A:211:VAL:HG22 | 1:A:226:LEU:HD23 | 6 | 0.29 |
| (7,440) | 1:A:211:VAL:HG23 | 1:A:226:LEU:HD21 | 6 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,440) | 1:A:211:VAL:HG23 | 1:A:226:LEU:HD22 | 6 | 0.29 |
| (7,440) | 1:A:211:VAL:HG23 | 1:A:226:LEU:HD23 | 6 | 0.29 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD11 | 1:A:58:VAL:HB | 7 | 0.29 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD12 | 1:A:58:VAL:HB | 7 | 0.29 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD13 | 1:A:58:VAL:HB | 7 | 0.29 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD11 | 1:A:58:VAL:HB | 14 | 0.29 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD12 | 1:A:58:VAL:HB | 14 | 0.29 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD13 | 1:A:58:VAL:HB | 14 | 0.29 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG21 | 5 | 0.29 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG22 | 5 | 0.29 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG23 | 5 | 0.29 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:111:LYS:H | 10 | 0.29 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:111:LYS:H | 10 | 0.29 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:111:LYS:H | 10 | 0.29 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:111:LYS:H | 13 | 0.29 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:111:LYS:H | 13 | 0.29 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:111:LYS:H | 13 | 0.29 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:111:LYS:H | 15 | 0.29 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:111:LYS:H | 15 | 0.29 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:111:LYS:H | 15 | 0.29 |
| (7,242) | 1:A:102:HIS:HD2 | 1:A:105:VAL:HG11 | 12 | 0.29 |
| (7,242) | 1:A:102:HIS:HD2 | 1:A:105:VAL:HG12 | 12 | 0.29 |
| (7,242) | 1:A:102:HIS:HD2 | 1:A:105:VAL:HG13 | 12 | 0.29 |
| (1,99) | 1:A:23:TYR:HB2 | 1:A:72:VAL:H | 11 | 0.29 |
| (1,99) | 1:A:23:TYR:HB3 | 1:A:72:VAL:H | 11 | 0.29 |
| (1,981) | 1:A:136:ILE:HG21 | 1:A:170:ALA:H | 11 | 0.29 |
| (1,981) | 1:A:136:ILE:HG22 | 1:A:170:ALA:H | 11 | 0.29 |
| (1,981) | 1:A:136:ILE:HG23 | 1:A:170:ALA:H | 11 | 0.29 |
| (1,820) | 1:A:117:GLY:HA3 | 1:A:119:GLU:H | 15 | 0.29 |
| (1,820) | 1:A:117:GLY:HA3 | 1:A:119:GLU:H | 16 | 0.29 |
| (1,801) | 1:A:116:TRP:HE1 | 1:A:198:HIS:H | 11 | 0.29 |
| (1,777) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:224:PHE:HB2 | 1 | 0.29 |
| (1,777) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:224:PHE:HB3 | 1 | 0.29 |
| (1,777) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:224:PHE:HB2 | 1 | 0.29 |
| (1,777) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:224:PHE:HB3 | 1 | 0.29 |
| (1,777) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:224:PHE:HB2 | 1 | 0.29 |
| (1,777) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:224:PHE:HB3 | 1 | 0.29 |
| (1,777) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:224:PHE:HB2 | 13 | 0.29 |
| (1,777) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:224:PHE:HB3 | 13 | 0.29 |
| (1,777) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:224:PHE:HB2 | 13 | 0.29 |
| (1,777) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:224:PHE:HB3 | 13 | 0.29 |
| (1,777) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:224:PHE:HB2 | 13 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,777) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:224:PHE:HB3 | 13 | 0.29 |
| (1,738) | 1:A:111:LYS:HA | 1:A:113:LEU:H | 16 | 0.29 |
| (1,721) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:188:PHE:HE1 | 15 | 0.29 |
| (1,721) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:188:PHE:HE2 | 15 | 0.29 |
| (1,61) | 1:A:18:TYR:HB3 | 1:A:20:LYS:H | 9 | 0.29 |
| (1,514) | 1:A:91:TYR:H | 1:A:126:LYS:HA | 4 | 0.29 |
| (1,486) | 1:A:89:VAL:H | 1:A:123:HIS:HD2 | 5 | 0.29 |
| (1,485) | 1:A:89:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB2 | 9 | 0.29 |
| (1,485) | 1:A:89:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB3 | 9 | 0.29 |
| (1,46) | 1:A:16:GLN:HE21 | 1:A:35:LEU:H | 1 | 0.29 |
| (1,46) | 1:A:16:GLN:HE22 | 1:A:35:LEU:H | 1 | 0.29 |
| (1,408) | 1:A:69:VAL:HA | 1:A:70:PRO:HG2 | 6 | 0.29 |
| (1,408) | 1:A:69:VAL:HA | 1:A:70:PRO:HG3 | 6 | 0.29 |
| (1,408) | 1:A:69:VAL:HA | 1:A:70:PRO:HG2 | 15 | 0.29 |
| (1,408) | 1:A:69:VAL:HA | 1:A:70:PRO:HG3 | 15 | 0.29 |
| (1,406) | 1:A:69:VAL:H | 1:A:159:ALA:H | 14 | 0.29 |
| (1,406) | 1:A:69:VAL:H | 1:A:159:ALA:H | 14 | 0.29 |
| (1,395) | 1:A:68:GLY:H | 1:A:155:THR:HA | 4 | 0.29 |
| (1,384) | 1:A:67:CYS:HA | 1:A:69:VAL:H | 8 | 0.29 |
| (1,353) | 1:A:61:ILE:HB | 1:A:215:THR:HG21 | 10 | 0.29 |
| (1,353) | 1:A:61:ILE:HB | 1:A:215:THR:HG22 | 10 | 0.29 |
| (1,353) | 1:A:61:ILE:HB | 1:A:215:THR:HG23 | 10 | 0.29 |
| (1,213) | 1:A:43:GLN:HA | 1:A:48:LEU:H | 14 | 0.29 |
| (1,192) | 1:A:42:MET:HE1 | 1:A:61:ILE:HB | 3 | 0.29 |
| (1,192) | 1:A:42:MET:HE2 | 1:A:61:ILE:HB | 3 | 0.29 |
| (1,192) | 1:A:42:MET:HE3 | 1:A:61:ILE:HB | 3 | 0.29 |
| (1,171) | 1:A:40:LYS:HB2 | 1:A:52:GLY:H | 7 | 0.29 |
| (1,171) | 1:A:40:LYS:HB3 | 1:A:52:GLY:H | 7 | 0.29 |
| (1,1452) | 1:A:234:ILE:HB | 1:A:238:TYR:HD1 | 7 | 0.29 |
| (1,1452) | 1:A:234:ILE:HB | 1:A:238:TYR:HD2 | 7 | 0.29 |
| (1,1452) | 1:A:234:ILE:HB | 1:A:238:TYR:HD1 | 11 | 0.29 |
| (1,1452) | 1:A:234:ILE:HB | 1:A:238:TYR:HD2 | 11 | 0.29 |
| (1,1413) | 1:A:231:ILE:H | 1:A:232:LYS:HB3 | 16 | 0.29 |
| (1,1406) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:HG2 | 5 | 0.29 |
| (1,1406) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:HG3 | 5 | 0.29 |
| (1,1406) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:HG2 | 15 | 0.29 |
| (1,1406) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:HG3 | 15 | 0.29 |
| (1,1402) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HB | 2 | 0.29 |
| (1,1398) | 1:A:228:GLN:H | 1:A:230:ASP:HB2 | 11 | 0.29 |
| (1,1398) | 1:A:228:GLN:H | 1:A:230:ASP:HB3 | 11 | 0.29 |
| (1,1392) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:226:LEU:HA | 1 | 0.29 |
| (1,1392) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:226:LEU:HA | 1 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1307) | 1:A:202:MET:H | 1:A:202:MET:HE1 | 3 | 0.29 |
| (1,1307) | 1:A:202:MET:H | 1:A:202:MET:HE2 | 3 | 0.29 |
| (1,1307) | 1:A:202:MET:H | 1:A:202:MET:HE3 | 3 | 0.29 |
| (1,1295) | 1:A:199:SER:H | 1:A:201:GLY:H | 15 | 0.29 |
| (1,122) | 1:A:29:THR:HG21 | 1:A:34:SER:HB2 | 12 | 0.29 |
| (1,122) | 1:A:29:THR:HG21 | 1:A:34:SER:HB3 | 12 | 0.29 |
| (1,122) | 1:A:29:THR:HG22 | 1:A:34:SER:HB2 | 12 | 0.29 |
| (1,122) | 1:A:29:THR:HG22 | 1:A:34:SER:HB3 | 12 | 0.29 |
| (1,122) | 1:A:29:THR:HG23 | 1:A:34:SER:HB2 | 12 | 0.29 |
| (1,122) | 1:A:29:THR:HG23 | 1:A:34:SER:HB3 | 12 | 0.29 |
| (1,1198) | 1:A:178:TRP:HZ2 | 1:A:186:ILE:HB | 4 | 0.29 |
| (1,1160) | 1:A:173:ASP:H | 1:A:174:GLU:H | 3 | 0.29 |
| (1,1147) | 1:A:172:PHE:HB2 | 1:A:173:ASP:H | 12 | 0.29 |
| (1,1097) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:168:GLY:HA2 | 12 | 0.29 |
| (1,1084) | 1:A:158:HIS:HD2 | 1:A:171:HIS:H | 13 | 0.29 |
| (1,1080) | 1:A:158:HIS:H | 1:A:158:HIS:HE1 | 14 | 0.29 |
| (1,1041) | 1:A:153:GLY:H | 1:A:154:ASN:H | 2 | 0.29 |
| (1,1041) | 1:A:153:GLY:H | 1:A:154:ASN:H | 4 | 0.29 |
| (1,1041) | 1:A:153:GLY:H | 1:A:154:ASN:H | 10 | 0.29 |
| (1,1041) | 1:A:153:GLY:H | 1:A:154:ASN:H | 14 | 0.29 |
| (1,1) | 1:A:2:GLN:HG2 | 1:A:3:GLU:H | 5 | 0.29 |
| (1,1) | 1:A:2:GLN:HG3 | 1:A:3:GLU:H | 5 | 0.29 |
| (7,8) | 1:A:19:LEU:HD11 | 1:A:42:MET:HE1 | 9 | 0.28 |
| (7,8) | 1:A:19:LEU:HD11 | 1:A:42:MET:HE2 | 9 | 0.28 |
| (7,8) | 1:A:19:LEU:HD11 | 1:A:42:MET:HE3 | 9 | 0.28 |
| (7,8) | 1:A:19:LEU:HD12 | 1:A:42:MET:HE1 | 9 | 0.28 |
| (7,8) | 1:A:19:LEU:HD12 | 1:A:42:MET:HE2 | 9 | 0.28 |
| (7,8) | 1:A:19:LEU:HD12 | 1:A:42:MET:HE3 | 9 | 0.28 |
| (7,8) | 1:A:19:LEU:HD13 | 1:A:42:MET:HE1 | 9 | 0.28 |
| (7,8) | 1:A:19:LEU:HD13 | 1:A:42:MET:HE2 | 9 | 0.28 |
| (7,8) | 1:A:19:LEU:HD13 | 1:A:42:MET:HE3 | 9 | 0.28 |
| (7,433) | 1:A:200:LEU:HD11 | 1:A:201:GLY:H | 9 | 0.28 |
| (7,433) | 1:A:200:LEU:HD12 | 1:A:201:GLY:H | 9 | 0.28 |
| (7,433) | 1:A:200:LEU:HD13 | 1:A:201:GLY:H | 9 | 0.28 |
| (7,433) | 1:A:200:LEU:HD11 | 1:A:201:GLY:H | 14 | 0.28 |
| (7,433) | 1:A:200:LEU:HD12 | 1:A:201:GLY:H | 14 | 0.28 |
| (7,433) | 1:A:200:LEU:HD13 | 1:A:201:GLY:H | 14 | 0.28 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:173:ASP:HB2 | 1 | 0.28 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:173:ASP:HB3 | 1 | 0.28 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:173:ASP:HB2 | 1 | 0.28 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:173:ASP:HB3 | 1 | 0.28 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:173:ASP:HB2 | 1 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:173:ASP:HB3 | 1 | 0.28 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG21 | 1 | 0.28 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG22 | 1 | 0.28 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG23 | 1 | 0.28 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG21 | 2 | 0.28 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG22 | 2 | 0.28 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG23 | 2 | 0.28 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG21 | 14 | 0.28 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG22 | 14 | 0.28 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG23 | 14 | 0.28 |
| (7,24) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:39:LEU:HD11 | 13 | 0.28 |
| (7,24) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:39:LEU:HD12 | 13 | 0.28 |
| (7,24) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:39:LEU:HD13 | 13 | 0.28 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG2 | 4 | 0.28 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG3 | 4 | 0.28 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG2 | 4 | 0.28 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG3 | 4 | 0.28 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG2 | 4 | 0.28 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG3 | 4 | 0.28 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG2 | 11 | 0.28 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG3 | 11 | 0.28 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG2 | 11 | 0.28 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG3 | 11 | 0.28 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG2 | 11 | 0.28 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG3 | 11 | 0.28 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG11 | 1:A:137:GLY:HA2 | 7 | 0.28 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG11 | 1:A:137:GLY:HA3 | 7 | 0.28 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG12 | 1:A:137:GLY:HA2 | 7 | 0.28 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG12 | 1:A:137:GLY:HA3 | 7 | 0.28 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG13 | 1:A:137:GLY:HA2 | 7 | 0.28 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG13 | 1:A:137:GLY:HA3 | 7 | 0.28 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG11 | 1:A:137:GLY:HA2 | 15 | 0.28 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG11 | 1:A:137:GLY:HA3 | 15 | 0.28 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG12 | 1:A:137:GLY:HA2 | 15 | 0.28 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG12 | 1:A:137:GLY:HA3 | 15 | 0.28 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG13 | 1:A:137:GLY:HA2 | 15 | 0.28 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG13 | 1:A:137:GLY:HA3 | 15 | 0.28 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:HB2 | 7 | 0.28 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:HB3 | 7 | 0.28 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:HB2 | 7 | 0.28 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:HB3 | 7 | 0.28 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:HB2 | 7 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:HB3 | 7 | 0.28 |
| (7,12) | 1:A:23:TYR:H | 1:A:72:VAL:HG21 | 11 | 0.28 |
| (7,12) | 1:A:23:TYR:H | 1:A:72:VAL:HG22 | 11 | 0.28 |
| (7,12) | 1:A:23:TYR:H | 1:A:72:VAL:HG23 | 11 | 0.28 |
| (5,2) | 1:A:66:ARG:NH2 | 1:A:71:ASP:OD1 | 8 | 0.28 |
| (1,994) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:139:ALA:H | 14 | 0.28 |
| (1,994) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:139:ALA:H | 14 | 0.28 |
| (1,94) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:24:LEU:H | 9 | 0.28 |
| (1,882) | 1:A:122:LEU:HG | 1:A:123:HIS:H | 7 | 0.28 |
| (1,738) | 1:A:111:LYS:HA | 1:A:113:LEU:H | 3 | 0.28 |
| (1,738) | 1:A:111:LYS:HA | 1:A:113:LEU:H | 14 | 0.28 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB1 | 14 | 0.28 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB2 | 14 | 0.28 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB3 | 14 | 0.28 |
| (1,692) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:106:ASP:HB2 | 7 | 0.28 |
| (1,692) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:106:ASP:HB3 | 7 | 0.28 |
| (1,631) | 1:A:98:ARG:H | 1:A:100:LEU:H | 5 | 0.28 |
| (1,61) | 1:A:18:TYR:HB3 | 1:A:20:LYS:H | 7 | 0.28 |
| (1,532) | 1:A:91:TYR:HD1 | 1:A:126:LYS:HA | 15 | 0.28 |
| (1,532) | 1:A:91:TYR:HD2 | 1:A:126:LYS:HA | 15 | 0.28 |
| (1,434) | 1:A:78:PHE:H | 1:A:78:PHE:HD1 | 3 | 0.28 |
| (1,434) | 1:A:78:PHE:H | 1:A:78:PHE:HD2 | 3 | 0.28 |
| (1,408) | 1:A:69:VAL:HA | 1:A:70:PRO:HG2 | 10 | 0.28 |
| (1,408) | 1:A:69:VAL:HA | 1:A:70:PRO:HG3 | 10 | 0.28 |
| (1,408) | 1:A:69:VAL:HA | 1:A:70:PRO:HG2 | 12 | 0.28 |
| (1,408) | 1:A:69:VAL:HA | 1:A:70:PRO:HG3 | 12 | 0.28 |
| (1,408) | 1:A:69:VAL:HA | 1:A:70:PRO:HG2 | 14 | 0.28 |
| (1,408) | 1:A:69:VAL:HA | 1:A:70:PRO:HG3 | 14 | 0.28 |
| (1,400) | 1:A:68:GLY:H | 1:A:158:HIS:HB3 | 1 | 0.28 |
| (1,400) | 1:A:68:GLY:H | 1:A:158:HIS:HB3 | 14 | 0.28 |
| (1,333) | 1:A:59:ILE:HG21 | 1:A:63:GLN:HE21 | 7 | 0.28 |
| (1,333) | 1:A:59:ILE:HG21 | 1:A:63:GLN:HE22 | 7 | 0.28 |
| (1,333) | 1:A:59:ILE:HG22 | 1:A:63:GLN:HE21 | 7 | 0.28 |
| (1,333) | 1:A:59:ILE:HG22 | 1:A:63:GLN:HE22 | 7 | 0.28 |
| (1,333) | 1:A:59:ILE:HG23 | 1:A:63:GLN:HE21 | 7 | 0.28 |
| (1,333) | 1:A:59:ILE:HG23 | 1:A:63:GLN:HE22 | 7 | 0.28 |
| (1,27) | 1:A:14:GLN:H | 1:A:16:GLN:H | 11 | 0.28 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE1 | 1:A:43:GLN:HG2 | 11 | 0.28 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE1 | 1:A:43:GLN:HG3 | 11 | 0.28 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE2 | 1:A:43:GLN:HG2 | 11 | 0.28 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE2 | 1:A:43:GLN:HG3 | 11 | 0.28 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE3 | 1:A:43:GLN:HG2 | 11 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE3 | 1:A:43:GLN:HG3 | 11 | 0.28 |
| (1,183) | 1:A:42:MET:H | 1:A:44:LYS:H | 5 | 0.28 |
| (1,171) | 1:A:40:LYS:HB2 | 1:A:52:GLY:H | 5 | 0.28 |
| (1,171) | 1:A:40:LYS:HB3 | 1:A:52:GLY:H | 5 | 0.28 |
| (1,168) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:52:GLY:H | 11 | 0.28 |
| (1,156) | 1:A:38:LYS:HA | 1:A:41:GLU:HG3 | 10 | 0.28 |
| (1,153) | 1:A:38:LYS:HA | 1:A:40:LYS:HB2 | 4 | 0.28 |
| (1,153) | 1:A:38:LYS:HA | 1:A:40:LYS:HB3 | 4 | 0.28 |
| (1,1467) | 1:A:236:LYS:H | 1:A:236:LYS:HG2 | 2 | 0.28 |
| (1,1467) | 1:A:236:LYS:H | 1:A:236:LYS:HG3 | 2 | 0.28 |
| (1,1452) | 1:A:234:ILE:HB | 1:A:238:TYR:HD1 | 6 | 0.28 |
| (1,1452) | 1:A:234:ILE:HB | 1:A:238:TYR:HD2 | 6 | 0.28 |
| (1,1452) | 1:A:234:ILE:HB | 1:A:238:TYR:HD1 | 15 | 0.28 |
| (1,1452) | 1:A:234:ILE:HB | 1:A:238:TYR:HD2 | 15 | 0.28 |
| (1,1406) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:HG2 | 13 | 0.28 |
| (1,1406) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:HG3 | 13 | 0.28 |
| (1,1398) | 1:A:228:GLN:H | 1:A:230:ASP:HB2 | 13 | 0.28 |
| (1,1398) | 1:A:228:GLN:H | 1:A:230:ASP:HB3 | 13 | 0.28 |
| (1,1392) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:226:LEU:HA | 14 | 0.28 |
| (1,1392) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:226:LEU:HA | 14 | 0.28 |
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:230:ASP:HA | 12 | 0.28 |
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:230:ASP:HA | 12 | 0.28 |
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:230:ASP:HA | 12 | 0.28 |
| (1,1308) | 1:A:202:MET:H | 1:A:234:ILE:HD11 | 2 | 0.28 |
| (1,1308) | 1:A:202:MET:H | 1:A:234:ILE:HD12 | 2 | 0.28 |
| (1,1308) | 1:A:202:MET:H | 1:A:234:ILE:HD13 | 2 | 0.28 |
| (1,1198) | 1:A:178:TRP:HZ2 | 1:A:186:ILE:HB | 2 | 0.28 |
| (1,1064) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:178:TRP:HZ3 | 9 | 0.28 |
| (1,1050) | 1:A:155:THR:HA | 1:A:157:ALA:H | 2 | 0.28 |
| (1,1020) | 1:A:142:ALA:HB1 | 1:A:145:ASP:H | 11 | 0.28 |
| (1,1020) | 1:A:142:ALA:HB2 | 1:A:145:ASP:H | 11 | 0.28 |
| (1,1020) | 1:A:142:ALA:HB3 | 1:A:145:ASP:H | 11 | 0.28 |
| (7,417) | 1:A:194:HIS:H | 1:A:211:VAL:HG11 | 5 | 0.27 |
| (7,417) | 1:A:194:HIS:H | 1:A:211:VAL:HG12 | 5 | 0.27 |
| (7,417) | 1:A:194:HIS:H | 1:A:211:VAL:HG13 | 5 | 0.27 |
| (7,417) | 1:A:194:HIS:H | 1:A:211:VAL:HG11 | 9 | 0.27 |
| (7,417) | 1:A:194:HIS:H | 1:A:211:VAL:HG12 | 9 | 0.27 |
| (7,417) | 1:A:194:HIS:H | 1:A:211:VAL:HG13 | 9 | 0.27 |
| (7,417) | 1:A:194:HIS:H | 1:A:211:VAL:HG11 | 12 | 0.27 |
| (7,417) | 1:A:194:HIS:H | 1:A:211:VAL:HG12 | 12 | 0.27 |
| (7,417) | 1:A:194:HIS:H | 1:A:211:VAL:HG13 | 12 | 0.27 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD11 | 1:A:186:ILE:H | 8 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD12 | 1:A:186:ILE:H | 8 | 0.27 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD13 | 1:A:186:ILE:H | 8 | 0.27 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG21 | 6 | 0.27 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG22 | 6 | 0.27 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG23 | 6 | 0.27 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG21 | 10 | 0.27 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG22 | 10 | 0.27 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG23 | 10 | 0.27 |
| (7,301) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:196:LEU:HD11 | 10 | 0.27 |
| (7,301) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:196:LEU:HD12 | 10 | 0.27 |
| (7,301) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:196:LEU:HD13 | 10 | 0.27 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG11 | 1:A:138:PHE:H | 16 | 0.27 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG12 | 1:A:138:PHE:H | 16 | 0.27 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG13 | 1:A:138:PHE:H | 16 | 0.27 |
| (7,241) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG11 | 7 | 0.27 |
| (7,241) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG12 | 7 | 0.27 |
| (7,241) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG13 | 7 | 0.27 |
| (7,241) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG11 | 11 | 0.27 |
| (7,241) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG12 | 11 | 0.27 |
| (7,241) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG13 | 11 | 0.27 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD11 | 1:A:104:THR:HG21 | 8 | 0.27 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD11 | 1:A:104:THR:HG22 | 8 | 0.27 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD11 | 1:A:104:THR:HG23 | 8 | 0.27 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD12 | 1:A:104:THR:HG21 | 8 | 0.27 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD12 | 1:A:104:THR:HG22 | 8 | 0.27 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD12 | 1:A:104:THR:HG23 | 8 | 0.27 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD13 | 1:A:104:THR:HG21 | 8 | 0.27 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD13 | 1:A:104:THR:HG22 | 8 | 0.27 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD13 | 1:A:104:THR:HG23 | 8 | 0.27 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG2 | 2 | 0.27 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG3 | 2 | 0.27 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG2 | 2 | 0.27 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG3 | 2 | 0.27 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG2 | 2 | 0.27 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG3 | 2 | 0.27 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG11 | 1:A:137:GLY:HA2 | 1 | 0.27 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG11 | 1:A:137:GLY:HA3 | 1 | 0.27 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG12 | 1:A:137:GLY:HA2 | 1 | 0.27 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG12 | 1:A:137:GLY:HA3 | 1 | 0.27 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG13 | 1:A:137:GLY:HA2 | 1 | 0.27 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG13 | 1:A:137:GLY:HA3 | 1 | 0.27 |
| (7,159) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:90:THR:H | 3 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,159) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:90:THR:H | 3 | 0.27 |
| (7,159) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:90:THR:H | 3 | 0.27 |
| (7,159) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:90:THR:H | 12 | 0.27 |
| (7,159) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:90:THR:H | 12 | 0.27 |
| (7,159) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:90:THR:H | 12 | 0.27 |
| (7,12) | 1:A:23:TYR:H | 1:A:72:VAL:HG21 | 10 | 0.27 |
| (7,12) | 1:A:23:TYR:H | 1:A:72:VAL:HG22 | 10 | 0.27 |
| (7,12) | 1:A:23:TYR:H | 1:A:72:VAL:HG23 | 10 | 0.27 |
| (4,15) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:171:HIS:CG | 6 | 0.27 |
| (1,981) | 1:A:136:ILE:HG21 | 1:A:170:ALA:H | 15 | 0.27 |
| (1,981) | 1:A:136:ILE:HG22 | 1:A:170:ALA:H | 15 | 0.27 |
| (1,981) | 1:A:136:ILE:HG23 | 1:A:170:ALA:H | 15 | 0.27 |
| (1,951) | 1:A:134:ILE:HD11 | 1:A:135:MET:H | 3 | 0.27 |
| (1,951) | 1:A:134:ILE:HD12 | 1:A:135:MET:H | 3 | 0.27 |
| (1,951) | 1:A:134:ILE:HD13 | 1:A:135:MET:H | 3 | 0.27 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:238:TYR:HB2 | 9 | 0.27 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:238:TYR:HB3 | 9 | 0.27 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:238:TYR:HB2 | 9 | 0.27 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:238:TYR:HB3 | 9 | 0.27 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:238:TYR:HB2 | 9 | 0.27 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:238:TYR:HB3 | 9 | 0.27 |
| (1,818) | 1:A:117:GLY:HA2 | 1:A:120:ILE:HG21 | 3 | 0.27 |
| (1,818) | 1:A:117:GLY:HA2 | 1:A:120:ILE:HG22 | 3 | 0.27 |
| (1,818) | 1:A:117:GLY:HA2 | 1:A:120:ILE:HG23 | 3 | 0.27 |
| (1,818) | 1:A:117:GLY:HA2 | 1:A:120:ILE:HG21 | 3 | 0.27 |
| (1,818) | 1:A:117:GLY:HA2 | 1:A:120:ILE:HG22 | 3 | 0.27 |
| (1,818) | 1:A:117:GLY:HA2 | 1:A:120:ILE:HG23 | 3 | 0.27 |
| (1,802) | 1:A:116:TRP:HE1 | 1:A:202:MET:HB2 | 6 | 0.27 |
| (1,802) | 1:A:116:TRP:HE1 | 1:A:202:MET:HB3 | 6 | 0.27 |
| (1,755) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:114:ASN:H | 5 | 0.27 |
| (1,75) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:22:PHE:H | 2 | 0.27 |
| (1,730) | 1:A:110:SER:H | 1:A:112:ALA:H | 3 | 0.27 |
| (1,730) | 1:A:110:SER:H | 1:A:112:ALA:H | 5 | 0.27 |
| (1,721) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:188:PHE:HE1 | 9 | 0.27 |
| (1,721) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:188:PHE:HE2 | 9 | 0.27 |
| (1,721) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:188:PHE:HE1 | 10 | 0.27 |
| (1,721) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:188:PHE:HE2 | 10 | 0.27 |
| (1,692) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:106:ASP:HB2 | 11 | 0.27 |
| (1,692) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:106:ASP:HB3 | 11 | 0.27 |
| (1,687) | 1:A:104:THR:HG21 | 1:A:108:LEU:HG | 14 | 0.27 |
| (1,687) | 1:A:104:THR:HG22 | 1:A:108:LEU:HG | 14 | 0.27 |
| (1,687) | 1:A:104:THR:HG23 | 1:A:108:LEU:HG | 14 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,61) | 1:A:18:TYR:HB3 | 1:A:20:LYS:H | 2 | 0.27 |
| (1,564) | 1:A:92:ARG:HD2 | 1:A:132:ALA:HB1 | 12 | 0.27 |
| (1,564) | 1:A:92:ARG:HD2 | 1:A:132:ALA:HB2 | 12 | 0.27 |
| (1,564) | 1:A:92:ARG:HD2 | 1:A:132:ALA:HB3 | 12 | 0.27 |
| (1,561) | 1:A:92:ARG:HD2 | 1:A:132:ALA:H | 7 | 0.27 |
| (1,561) | 1:A:92:ARG:HD3 | 1:A:132:ALA:H | 7 | 0.27 |
| (1,53) | 1:A:18:TYR:H | 1:A:21:ARG:HG2 | 15 | 0.27 |
| (1,485) | 1:A:89:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB2 | 13 | 0.27 |
| (1,485) | 1:A:89:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB3 | 13 | 0.27 |
| (1,461) | 1:A:84:TRP:H | 1:A:234:ILE:HD11 | 13 | 0.27 |
| (1,461) | 1:A:84:TRP:H | 1:A:234:ILE:HD12 | 13 | 0.27 |
| (1,461) | 1:A:84:TRP:H | 1:A:234:ILE:HD13 | 13 | 0.27 |
| (1,451) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:234:ILE:HG13 | 9 | 0.27 |
| (1,451) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:234:ILE:HG13 | 9 | 0.27 |
| (1,448) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:202:MET:HA | 15 | 0.27 |
| (1,448) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:202:MET:HA | 15 | 0.27 |
| (1,443) | 1:A:82:PRO:HD2 | 1:A:83:LYS:HG2 | 7 | 0.27 |
| (1,443) | 1:A:82:PRO:HD2 | 1:A:83:LYS:HG3 | 7 | 0.27 |
| (1,42) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:16:GLN:HE21 | 6 | 0.27 |
| (1,42) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:16:GLN:HE22 | 6 | 0.27 |
| (1,408) | 1:A:69:VAL:HA | 1:A:70:PRO:HG2 | 4 | 0.27 |
| (1,408) | 1:A:69:VAL:HA | 1:A:70:PRO:HG3 | 4 | 0.27 |
| (1,314) | 1:A:58:VAL:H | 1:A:60:GLU:H | 5 | 0.27 |
| (1,314) | 1:A:58:VAL:H | 1:A:60:GLU:H | 15 | 0.27 |
| (1,278) | 1:A:50:ILE:H | 1:A:51:THR:HG21 | 7 | 0.27 |
| (1,278) | 1:A:50:ILE:H | 1:A:51:THR:HG22 | 7 | 0.27 |
| (1,278) | 1:A:50:ILE:H | 1:A:51:THR:HG23 | 7 | 0.27 |
| (1,277) | 1:A:50:ILE:H | 1:A:51:THR:H | 1 | 0.27 |
| (1,170) | 1:A:40:LYS:HB2 | 1:A:41:GLU:HA | 2 | 0.27 |
| (1,170) | 1:A:40:LYS:HB3 | 1:A:41:GLU:HA | 2 | 0.27 |
| (1,169) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:52:GLY:HA2 | 9 | 0.27 |
| (1,160) | 1:A:39:LEU:H | 1:A:40:LYS:HB2 | 14 | 0.27 |
| (1,160) | 1:A:39:LEU:H | 1:A:40:LYS:HB3 | 14 | 0.27 |
| (1,1452) | 1:A:234:ILE:HB | 1:A:238:TYR:HD1 | 4 | 0.27 |
| (1,1452) | 1:A:234:ILE:HB | 1:A:238:TYR:HD2 | 4 | 0.27 |
| (1,1405) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:H | 16 | 0.27 |
| (1,1405) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:H | 16 | 0.27 |
| (1,1399) | 1:A:228:GLN:HA | 1:A:230:ASP:HB2 | 6 | 0.27 |
| (1,1399) | 1:A:228:GLN:HA | 1:A:230:ASP:HB3 | 6 | 0.27 |
| (1,1389) | 1:A:224:PHE:HE1 | 1:A:225:LYS:H | 7 | 0.27 |
| (1,1389) | 1:A:224:PHE:HE2 | 1:A:225:LYS:H | 7 | 0.27 |
| (1,1389) | 1:A:224:PHE:HE1 | 1:A:225:LYS:H | 12 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1389) | 1:A:224:PHE:HE2 | 1:A:225:LYS:H | 12 | 0.27 |
| (1,1386) | 1:A:223:ASN:H | 1:A:224:PHE:HB2 | 9 | 0.27 |
| (1,1386) | 1:A:223:ASN:H | 1:A:224:PHE:HB3 | 9 | 0.27 |
| (1,1295) | 1:A:199:SER:H | 1:A:201:GLY:H | 11 | 0.27 |
| (1,1181) | 1:A:177:ARG:H | 1:A:186:ILE:H | 9 | 0.27 |
| (1,1095) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:160:PHE:HD1 | 1 | 0.27 |
| (1,1095) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:160:PHE:HD2 | 1 | 0.27 |
| (1,1024) | 1:A:143:HIS:HE1 | 1:A:160:PHE:HE1 | 7 | 0.27 |
| (1,1024) | 1:A:143:HIS:HE1 | 1:A:160:PHE:HE2 | 7 | 0.27 |
| (7,73) | 1:A:58:VAL:HG11 | 1:A:62:MET:HE1 | 11 | 0.26 |
| (7,73) | 1:A:58:VAL:HG11 | 1:A:62:MET:HE2 | 11 | 0.26 |
| (7,73) | 1:A:58:VAL:HG11 | 1:A:62:MET:HE3 | 11 | 0.26 |
| (7,73) | 1:A:58:VAL:HG12 | 1:A:62:MET:HE1 | 11 | 0.26 |
| (7,73) | 1:A:58:VAL:HG12 | 1:A:62:MET:HE2 | 11 | 0.26 |
| (7,73) | 1:A:58:VAL:HG12 | 1:A:62:MET:HE3 | 11 | 0.26 |
| (7,73) | 1:A:58:VAL:HG13 | 1:A:62:MET:HE1 | 11 | 0.26 |
| (7,73) | 1:A:58:VAL:HG13 | 1:A:62:MET:HE2 | 11 | 0.26 |
| (7,73) | 1:A:58:VAL:HG13 | 1:A:62:MET:HE3 | 11 | 0.26 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:59:ILE:HG21 | 1 | 0.26 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:59:ILE:HG22 | 1 | 0.26 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:59:ILE:HG23 | 1 | 0.26 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:59:ILE:HG21 | 1 | 0.26 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:59:ILE:HG22 | 1 | 0.26 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:59:ILE:HG23 | 1 | 0.26 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:59:ILE:HG21 | 1 | 0.26 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:59:ILE:HG22 | 1 | 0.26 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:59:ILE:HG23 | 1 | 0.26 |
| (7,368) | 1:A:127:VAL:HG11 | 1:A:129:TRP:H | 4 | 0.26 |
| (7,368) | 1:A:127:VAL:HG12 | 1:A:129:TRP:H | 4 | 0.26 |
| (7,368) | 1:A:127:VAL:HG13 | 1:A:129:TRP:H | 4 | 0.26 |
| (7,364) | 1:A:127:VAL:HG11 | 1:A:129:TRP:H | 4 | 0.26 |
| (7,364) | 1:A:127:VAL:HG12 | 1:A:129:TRP:H | 4 | 0.26 |
| (7,364) | 1:A:127:VAL:HG13 | 1:A:129:TRP:H | 4 | 0.26 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD11 | 8 | 0.26 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD12 | 8 | 0.26 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD13 | 8 | 0.26 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD11 | 8 | 0.26 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD12 | 8 | 0.26 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD13 | 8 | 0.26 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD11 | 8 | 0.26 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD12 | 8 | 0.26 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD13 | 8 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD11 | 9 | 0.26 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD12 | 9 | 0.26 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB1 | 1:A:196:LEU:HD13 | 9 | 0.26 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD11 | 9 | 0.26 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD12 | 9 | 0.26 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB2 | 1:A:196:LEU:HD13 | 9 | 0.26 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD11 | 9 | 0.26 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD12 | 9 | 0.26 |
| (7,299) | 1:A:112:ALA:HB3 | 1:A:196:LEU:HD13 | 9 | 0.26 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG11 | 1:A:138:PHE:H | 3 | 0.26 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG12 | 1:A:138:PHE:H | 3 | 0.26 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG13 | 1:A:138:PHE:H | 3 | 0.26 |
| (7,242) | 1:A:102:HIS:HD2 | 1:A:105:VAL:HG11 | 14 | 0.26 |
| (7,242) | 1:A:102:HIS:HD2 | 1:A:105:VAL:HG12 | 14 | 0.26 |
| (7,242) | 1:A:102:HIS:HD2 | 1:A:105:VAL:HG13 | 14 | 0.26 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD11 | 1:A:104:THR:HG21 | 10 | 0.26 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD11 | 1:A:104:THR:HG22 | 10 | 0.26 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD11 | 1:A:104:THR:HG23 | 10 | 0.26 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD12 | 1:A:104:THR:HG21 | 10 | 0.26 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD12 | 1:A:104:THR:HG22 | 10 | 0.26 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD12 | 1:A:104:THR:HG23 | 10 | 0.26 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD13 | 1:A:104:THR:HG21 | 10 | 0.26 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD13 | 1:A:104:THR:HG22 | 10 | 0.26 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD13 | 1:A:104:THR:HG23 | 10 | 0.26 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG2 | 1 | 0.26 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG3 | 1 | 0.26 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG2 | 1 | 0.26 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG3 | 1 | 0.26 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG2 | 1 | 0.26 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG3 | 1 | 0.26 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG21 | 12 | 0.26 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG22 | 12 | 0.26 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG23 | 12 | 0.26 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:HB2 | 13 | 0.26 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:HB3 | 13 | 0.26 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:HB2 | 13 | 0.26 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:HB3 | 13 | 0.26 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:HB2 | 13 | 0.26 |
| (7,142) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:HB3 | 13 | 0.26 |
| (1,994) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:139:ALA:H | 15 | 0.26 |
| (1,994) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:139:ALA:H | 15 | 0.26 |
| (1,985) | 1:A:137:GLY:H | 1:A:170:ALA:H | 6 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,945) | 1:A:134:ILE:H | 1:A:136:ILE:HD11 | 1 | 0.26 |
| (1,945) | 1:A:134:ILE:H | 1:A:136:ILE:HD12 | 1 | 0.26 |
| (1,945) | 1:A:134:ILE:H | 1:A:136:ILE:HD13 | 1 | 0.26 |
| (1,945) | 1:A:134:ILE:H | 1:A:136:ILE:HD11 | 15 | 0.26 |
| (1,945) | 1:A:134:ILE:H | 1:A:136:ILE:HD12 | 15 | 0.26 |
| (1,945) | 1:A:134:ILE:H | 1:A:136:ILE:HD13 | 15 | 0.26 |
| (1,920) | 1:A:129:TRP:HB2 | 1:A:130:GLY:H | 6 | 0.26 |
| (1,920) | 1:A:129:TRP:HB3 | 1:A:130:GLY:H | 6 | 0.26 |
| (1,915) | 1:A:128:VAL:HB | 1:A:129:TRP:HD1 | 2 | 0.26 |
| (1,820) | 1:A:117:GLY:HA3 | 1:A:119:GLU:H | 6 | 0.26 |
| (1,820) | 1:A:117:GLY:HA3 | 1:A:119:GLU:H | 11 | 0.26 |
| (1,801) | 1:A:116:TRP:HE1 | 1:A:198:HIS:H | 5 | 0.26 |
| (1,79) | 1:A:20:LYS:HG2 | 1:A:21:ARG:H | 6 | 0.26 |
| (1,79) | 1:A:20:LYS:HG3 | 1:A:21:ARG:H | 6 | 0.26 |
| (1,755) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:114:ASN:H | 4 | 0.26 |
| (1,738) | 1:A:111:LYS:HA | 1:A:113:LEU:H | 4 | 0.26 |
| (1,711) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:110:SER:H | 7 | 0.26 |
| (1,698) | 1:A:106:ASP:H | 1:A:107:ARG:HG2 | 8 | 0.26 |
| (1,698) | 1:A:106:ASP:H | 1:A:107:ARG:HG3 | 8 | 0.26 |
| (1,56) | 1:A:18:TYR:HB2 | 1:A:20:LYS:H | 2 | 0.26 |
| (1,56) | 1:A:18:TYR:HB3 | 1:A:20:LYS:H | 2 | 0.26 |
| (1,468) | 1:A:84:TRP:HE1 | 1:A:200:LEU:H | 8 | 0.26 |
| (1,461) | 1:A:84:TRP:H | 1:A:234:ILE:HD11 | 12 | 0.26 |
| (1,461) | 1:A:84:TRP:H | 1:A:234:ILE:HD12 | 12 | 0.26 |
| (1,461) | 1:A:84:TRP:H | 1:A:234:ILE:HD13 | 12 | 0.26 |
| (1,451) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:234:ILE:HG13 | 7 | 0.26 |
| (1,451) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:234:ILE:HG13 | 7 | 0.26 |
| (1,408) | 1:A:69:VAL:HA | 1:A:70:PRO:HG2 | 2 | 0.26 |
| (1,408) | 1:A:69:VAL:HA | 1:A:70:PRO:HG3 | 2 | 0.26 |
| (1,408) | 1:A:69:VAL:HA | 1:A:70:PRO:HG2 | 3 | 0.26 |
| (1,408) | 1:A:69:VAL:HA | 1:A:70:PRO:HG3 | 3 | 0.26 |
| (1,408) | 1:A:69:VAL:HA | 1:A:70:PRO:HG2 | 5 | 0.26 |
| (1,408) | 1:A:69:VAL:HA | 1:A:70:PRO:HG3 | 5 | 0.26 |
| (1,408) | 1:A:69:VAL:HA | 1:A:70:PRO:HG2 | 7 | 0.26 |
| (1,408) | 1:A:69:VAL:HA | 1:A:70:PRO:HG3 | 7 | 0.26 |
| (1,401) | 1:A:68:GLY:H | 1:A:159:ALA:H | 8 | 0.26 |
| (1,384) | 1:A:67:CYS:HA | 1:A:69:VAL:H | 14 | 0.26 |
| (1,384) | 1:A:67:CYS:HA | 1:A:69:VAL:H | 16 | 0.26 |
| (1,380) | 1:A:66:ARG:HE | 1:A:22:PHE:HZ | 1 | 0.26 |
| (1,378) | 1:A:66:ARG:H | 1:A:156:LEU:H | 6 | 0.26 |
| (1,378) | 1:A:66:ARG:H | 1:A:156:LEU:H | 6 | 0.26 |
| (1,327) | 1:A:59:ILE:HB | 1:A:60:GLU:H | 13 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,277) | 1:A:50:ILE:H | 1:A:51:THR:H | 7 | 0.26 |
| (1,272) | 1:A:49:PRO:HG2 | 1:A:50:ILE:HA | 11 | 0.26 |
| (1,272) | 1:A:49:PRO:HG2 | 1:A:50:ILE:HA | 13 | 0.26 |
| (1,205) | 1:A:42:MET:HG3 | 1:A:46:PHE:HD1 | 12 | 0.26 |
| (1,205) | 1:A:42:MET:HG3 | 1:A:46:PHE:HD2 | 12 | 0.26 |
| (1,170) | 1:A:40:LYS:HB2 | 1:A:41:GLU:HA | 3 | 0.26 |
| (1,170) | 1:A:40:LYS:HB3 | 1:A:41:GLU:HA | 3 | 0.26 |
| (1,170) | 1:A:40:LYS:HB2 | 1:A:41:GLU:HA | 13 | 0.26 |
| (1,170) | 1:A:40:LYS:HB3 | 1:A:41:GLU:HA | 13 | 0.26 |
| (1,166) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:41:GLU:HG2 | 8 | 0.26 |
| (1,1485) | 1:A:237:LEU:HG | 1:A:238:TYR:H | 10 | 0.26 |
| (1,1473) | 1:A:236:LYS:HG2 | 1:A:237:LEU:H | 2 | 0.26 |
| (1,1473) | 1:A:236:LYS:HG3 | 1:A:237:LEU:H | 2 | 0.26 |
| (1,1452) | 1:A:234:ILE:HB | 1:A:238:TYR:HD1 | 2 | 0.26 |
| (1,1452) | 1:A:234:ILE:HB | 1:A:238:TYR:HD2 | 2 | 0.26 |
| (1,1440) | 1:A:233:GLY:HA2 | 1:A:235:GLN:H | 13 | 0.26 |
| (1,1413) | 1:A:231:ILE:H | 1:A:232:LYS:HB3 | 6 | 0.26 |
| (1,1399) | 1:A:228:GLN:HA | 1:A:230:ASP:HB2 | 4 | 0.26 |
| (1,1399) | 1:A:228:GLN:HA | 1:A:230:ASP:HB3 | 4 | 0.26 |
| (1,1360) | 1:A:211:VAL:H | 1:A:213:TYR:H | 2 | 0.26 |
| (1,1295) | 1:A:199:SER:H | 1:A:201:GLY:H | 4 | 0.26 |
| (1,129) | 1:A:34:SER:HA | 1:A:36:GLU:H | 6 | 0.26 |
| (1,1289) | 1:A:198:HIS:H | 1:A:202:MET:HB2 | 1 | 0.26 |
| (1,1289) | 1:A:198:HIS:H | 1:A:202:MET:HB3 | 1 | 0.26 |
| (1,1193) | 1:A:178:TRP:HE3 | 1:A:188:PHE:H | 1 | 0.26 |
| (1,1100) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:198:HIS:HB2 | 14 | 0.26 |
| (1,1097) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:168:GLY:HA2 | 4 | 0.26 |
| (1,1095) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:160:PHE:HD1 | 2 | 0.26 |
| (1,1095) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:160:PHE:HD2 | 2 | 0.26 |
| (1,1095) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:160:PHE:HD1 | 4 | 0.26 |
| (1,1095) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:160:PHE:HD2 | 4 | 0.26 |
| (1,1058) | 1:A:156:LEU:HB2 | 1:A:178:TRP:HH2 | 9 | 0.26 |
| (1,1058) | 1:A:156:LEU:HB3 | 1:A:178:TRP:HH2 | 9 | 0.26 |
| (1,1041) | 1:A:153:GLY:H | 1:A:154:ASN:H | 7 | 0.26 |
| (7,433) | 1:A:200:LEU:HD11 | 1:A:201:GLY:H | 8 | 0.25 |
| (7,433) | 1:A:200:LEU:HD12 | 1:A:201:GLY:H | 8 | 0.25 |
| (7,433) | 1:A:200:LEU:HD13 | 1:A:201:GLY:H | 8 | 0.25 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD11 | 1:A:58:VAL:HB | 16 | 0.25 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD12 | 1:A:58:VAL:HB | 16 | 0.25 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD13 | 1:A:58:VAL:HB | 16 | 0.25 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD11 | 1:A:186:ILE:H | 2 | 0.25 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD12 | 1:A:186:ILE:H | 2 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD13 | 1:A:186:ILE:H | 2 | 0.25 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG21 | 3 | 0.25 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG22 | 3 | 0.25 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG23 | 3 | 0.25 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG21 | 8 | 0.25 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG22 | 8 | 0.25 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG23 | 8 | 0.25 |
| (7,334) | 1:A:116:TRP:HB3 | 1:A:226:LEU:HD11 | 3 | 0.25 |
| (7,334) | 1:A:116:TRP:HB3 | 1:A:226:LEU:HD12 | 3 | 0.25 |
| (7,334) | 1:A:116:TRP:HB3 | 1:A:226:LEU:HD13 | 3 | 0.25 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:111:LYS:H | 3 | 0.25 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:111:LYS:H | 3 | 0.25 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:111:LYS:H | 3 | 0.25 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:136:ILE:HD11 | 13 | 0.25 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:136:ILE:HD12 | 13 | 0.25 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:136:ILE:HD13 | 13 | 0.25 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:136:ILE:HD11 | 13 | 0.25 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:136:ILE:HD12 | 13 | 0.25 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:136:ILE:HD13 | 13 | 0.25 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:136:ILE:HD11 | 13 | 0.25 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:136:ILE:HD12 | 13 | 0.25 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:136:ILE:HD13 | 13 | 0.25 |
| (7,242) | 1:A:102:HIS:HD2 | 1:A:105:VAL:HG11 | 11 | 0.25 |
| (7,242) | 1:A:102:HIS:HD2 | 1:A:105:VAL:HG12 | 11 | 0.25 |
| (7,242) | 1:A:102:HIS:HD2 | 1:A:105:VAL:HG13 | 11 | 0.25 |
| (7,241) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG11 | 1 | 0.25 |
| (7,241) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG12 | 1 | 0.25 |
| (7,241) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG13 | 1 | 0.25 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG2 | 10 | 0.25 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG3 | 10 | 0.25 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG2 | 10 | 0.25 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG3 | 10 | 0.25 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG2 | 10 | 0.25 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG3 | 10 | 0.25 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG11 | 1:A:137:GLY:HA2 | 6 | 0.25 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG11 | 1:A:137:GLY:HA3 | 6 | 0.25 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG12 | 1:A:137:GLY:HA2 | 6 | 0.25 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG12 | 1:A:137:GLY:HA3 | 6 | 0.25 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG13 | 1:A:137:GLY:HA2 | 6 | 0.25 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG13 | 1:A:137:GLY:HA3 | 6 | 0.25 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG11 | 1:A:124:PHE:HE1 | 8 | 0.25 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG11 | 1:A:124:PHE:HE2 | 8 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG12 | 1:A:124:PHE:HE1 | 8 | 0.25 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG12 | 1:A:124:PHE:HE2 | 8 | 0.25 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG13 | 1:A:124:PHE:HE1 | 8 | 0.25 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG13 | 1:A:124:PHE:HE2 | 8 | 0.25 |
| (4,13) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:158:HIS:CG | 6 | 0.25 |
| (3,4) | 3:A:301:CA:CA | 1:A:169:ASP:OD2 | 14 | 0.25 |
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:188:PHE:HE1 | 1 | 0.25 |
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:188:PHE:HE2 | 1 | 0.25 |
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:188:PHE:HE1 | 1 | 0.25 |
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:188:PHE:HE2 | 1 | 0.25 |
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:188:PHE:HE1 | 6 | 0.25 |
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:188:PHE:HE2 | 6 | 0.25 |
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:188:PHE:HE1 | 6 | 0.25 |
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:188:PHE:HE2 | 6 | 0.25 |
| (1,94) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:24:LEU:H | 1 | 0.25 |
| (1,915) | 1:A:128:VAL:HB | 1:A:129:TRP:HD1 | 6 | 0.25 |
| (1,87) | 1:A:21:ARG:H | 1:A:22:PHE:HB2 | 4 | 0.25 |
| (1,87) | 1:A:21:ARG:H | 1:A:22:PHE:HB3 | 4 | 0.25 |
| (1,820) | 1:A:117:GLY:HA3 | 1:A:119:GLU:H | 12 | 0.25 |
| (1,802) | 1:A:116:TRP:HE1 | 1:A:202:MET:HB2 | 11 | 0.25 |
| (1,802) | 1:A:116:TRP:HE1 | 1:A:202:MET:HB3 | 11 | 0.25 |
| (1,785) | 1:A:116:TRP:H | 1:A:118:LYS:H | 5 | 0.25 |
| (1,785) | 1:A:116:TRP:H | 1:A:118:LYS:H | 14 | 0.25 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HB2 | 8 | 0.25 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HB3 | 8 | 0.25 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HB2 | 8 | 0.25 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HB3 | 8 | 0.25 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HB2 | 8 | 0.25 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HB3 | 8 | 0.25 |
| (1,738) | 1:A:111:LYS:HA | 1:A:113:LEU:H | 12 | 0.25 |
| (1,711) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:110:SER:H | 11 | 0.25 |
| (1,694) | 1:A:105:VAL:HA | 1:A:188:PHE:HE1 | 4 | 0.25 |
| (1,694) | 1:A:105:VAL:HA | 1:A:188:PHE:HE2 | 4 | 0.25 |
| (1,693) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:107:ARG:H | 4 | 0.25 |
| (1,670) | 1:A:103:ILE:HD11 | 1:A:104:THR:H | 16 | 0.25 |
| (1,670) | 1:A:103:ILE:HD12 | 1:A:104:THR:H | 16 | 0.25 |
| (1,670) | 1:A:103:ILE:HD13 | 1:A:104:THR:H | 16 | 0.25 |
| (1,606) | 1:A:96:TYR:HA | 1:A:102:HIS:HD2 | 9 | 0.25 |
| (1,568) | 1:A:92:ARG:HE | 1:A:127:VAL:HB | 11 | 0.25 |
| (1,559) | 1:A:92:ARG:HD2 | 1:A:128:VAL:H | 3 | 0.25 |
| (1,559) | 1:A:92:ARG:HD3 | 1:A:128:VAL:H | 3 | 0.25 |
| (1,519) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:134:ILE:HG21 | 12 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,519) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:134:ILE:HG22 | 12 | 0.25 |
| (1,519) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:134:ILE:HG23 | 12 | 0.25 |
| (1,514) | 1:A:91:TYR:H | 1:A:126:LYS:HA | 12 | 0.25 |
| (1,486) | 1:A:89:VAL:H | 1:A:123:HIS:HD2 | 2 | 0.25 |
| (1,47) | 1:A:16:GLN:HG2 | 1:A:17:ASP:H | 15 | 0.25 |
| (1,47) | 1:A:16:GLN:HG3 | 1:A:17:ASP:H | 15 | 0.25 |
| (1,461) | 1:A:84:TRP:H | 1:A:234:ILE:HD11 | 6 | 0.25 |
| (1,461) | 1:A:84:TRP:H | 1:A:234:ILE:HD12 | 6 | 0.25 |
| (1,461) | 1:A:84:TRP:H | 1:A:234:ILE:HD13 | 6 | 0.25 |
| (1,451) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:234:ILE:HG13 | 3 | 0.25 |
| (1,451) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:234:ILE:HG13 | 3 | 0.25 |
| (1,443) | 1:A:82:PRO:HD2 | 1:A:83:LYS:HG2 | 2 | 0.25 |
| (1,443) | 1:A:82:PRO:HD2 | 1:A:83:LYS:HG3 | 2 | 0.25 |
| (1,443) | 1:A:82:PRO:HD2 | 1:A:83:LYS:HG2 | 9 | 0.25 |
| (1,443) | 1:A:82:PRO:HD2 | 1:A:83:LYS:HG3 | 9 | 0.25 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG2 | 1:A:163:GLY:HA2 | 10 | 0.25 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG2 | 1:A:163:GLY:HA3 | 10 | 0.25 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG3 | 1:A:163:GLY:HA2 | 10 | 0.25 |
| (1,439) | 1:A:79:PRO:HG3 | 1:A:163:GLY:HA3 | 10 | 0.25 |
| (1,408) | 1:A:69:VAL:HA | 1:A:70:PRO:HG2 | 16 | 0.25 |
| (1,408) | 1:A:69:VAL:HA | 1:A:70:PRO:HG3 | 16 | 0.25 |
| (1,402) | 1:A:68:GLY:H | 1:A:198:HIS:HD2 | 3 | 0.25 |
| (1,401) | 1:A:68:GLY:H | 1:A:159:ALA:H | 1 | 0.25 |
| (1,4) | 1:A:4:ALA:HB1 | 1:A:59:ILE:HB | 9 | 0.25 |
| (1,4) | 1:A:4:ALA:HB2 | 1:A:59:ILE:HB | 9 | 0.25 |
| (1,4) | 1:A:4:ALA:HB3 | 1:A:59:ILE:HB | 9 | 0.25 |
| (1,304) | 1:A:57:ARG:H | 1:A:59:ILE:H | 1 | 0.25 |
| (1,297) | 1:A:56:SER:HB2 | 1:A:58:VAL:H | 2 | 0.25 |
| (1,297) | 1:A:56:SER:HB3 | 1:A:58:VAL:H | 2 | 0.25 |
| (1,272) | 1:A:49:PRO:HG2 | 1:A:50:ILE:HA | 7 | 0.25 |
| (1,257) | 1:A:46:PHE:HE1 | 1:A:61:ILE:HA | 9 | 0.25 |
| (1,257) | 1:A:46:PHE:HE2 | 1:A:61:ILE:HA | 9 | 0.25 |
| (1,257) | 1:A:46:PHE:HE1 | 1:A:61:ILE:HA | 13 | 0.25 |
| (1,257) | 1:A:46:PHE:HE2 | 1:A:61:ILE:HA | 13 | 0.25 |
| (1,213) | 1:A:43:GLN:HA | 1:A:48:LEU:H | 12 | 0.25 |
| (1,168) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:52:GLY:H | 2 | 0.25 |
| (1,166) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:41:GLU:HG2 | 2 | 0.25 |
| (1,161) | 1:A:39:LEU:H | 1:A:41:GLU:H | 5 | 0.25 |
| (1,133) | 1:A:34:SER:HB2 | 1:A:37:ALA:HB1 | 12 | 0.25 |
| (1,133) | 1:A:34:SER:HB2 | 1:A:37:ALA:HB2 | 12 | 0.25 |
| (1,133) | 1:A:34:SER:HB2 | 1:A:37:ALA:HB3 | 12 | 0.25 |
| (1,133) | 1:A:34:SER:HB3 | 1:A:37:ALA:HB1 | 12 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,133) | 1:A:34:SER:HB3 | 1:A:37:ALA:HB2 | 12 | 0.25 |
| (1,133) | 1:A:34:SER:HB3 | 1:A:37:ALA:HB3 | 12 | 0.25 |
| (1,1311) | 1:A:202:MET:HA | 1:A:234:ILE:HD11 | 11 | 0.25 |
| (1,1311) | 1:A:202:MET:HA | 1:A:234:ILE:HD12 | 11 | 0.25 |
| (1,1311) | 1:A:202:MET:HA | 1:A:234:ILE:HD13 | 11 | 0.25 |
| (1,1295) | 1:A:199:SER:H | 1:A:201:GLY:H | 8 | 0.25 |
| (1,1289) | 1:A:198:HIS:H | 1:A:202:MET:HB2 | 14 | 0.25 |
| (1,1289) | 1:A:198:HIS:H | 1:A:202:MET:HB3 | 14 | 0.25 |
| (1,108) | 1:A:25:TYR:HB3 | 1:A:26:ASP:HA | 12 | 0.25 |
| (1,105) | 1:A:25:TYR:H | 1:A:25:TYR:HD1 | 5 | 0.25 |
| (1,105) | 1:A:25:TYR:H | 1:A:25:TYR:HD2 | 5 | 0.25 |
| (1,1041) | 1:A:153:GLY:H | 1:A:154:ASN:H | 12 | 0.25 |
| (1,1024) | 1:A:143:HIS:HE1 | 1:A:160:PHE:HE1 | 9 | 0.25 |
| (1,1024) | 1:A:143:HIS:HE1 | 1:A:160:PHE:HE2 | 9 | 0.25 |
| (1,1020) | 1:A:142:ALA:HB1 | 1:A:145:ASP:H | 16 | 0.25 |
| (1,1020) | 1:A:142:ALA:HB2 | 1:A:145:ASP:H | 16 | 0.25 |
| (1,1020) | 1:A:142:ALA:HB3 | 1:A:145:ASP:H | 16 | 0.25 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HD11 | 5 | 0.24 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HD12 | 5 | 0.24 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HD13 | 5 | 0.24 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HD11 | 5 | 0.24 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HD12 | 5 | 0.24 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HD13 | 5 | 0.24 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HD11 | 5 | 0.24 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HD12 | 5 | 0.24 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HD13 | 5 | 0.24 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD11 | 1:A:58:VAL:HB | 2 | 0.24 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD12 | 1:A:58:VAL:HB | 2 | 0.24 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD13 | 1:A:58:VAL:HB | 2 | 0.24 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD11 | 1:A:186:ILE:H | 1 | 0.24 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD12 | 1:A:186:ILE:H | 1 | 0.24 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD13 | 1:A:186:ILE:H | 1 | 0.24 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD11 | 1:A:186:ILE:H | 5 | 0.24 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD12 | 1:A:186:ILE:H | 5 | 0.24 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD13 | 1:A:186:ILE:H | 5 | 0.24 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:238:TYR:HD1 | 1 | 0.24 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:238:TYR:HD2 | 1 | 0.24 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:238:TYR:HD1 | 1 | 0.24 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:238:TYR:HD2 | 1 | 0.24 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:238:TYR:HD1 | 1 | 0.24 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:238:TYR:HD2 | 1 | 0.24 |
| (7,329) | 1:A:116:TRP:H | 1:A:200:LEU:HD11 | 11 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,329) | 1:A:116:TRP:H | 1:A:200:LEU:HD12 | 11 | 0.24 |
| (7,329) | 1:A:116:TRP:H | 1:A:200:LEU:HD13 | 11 | 0.24 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:111:LYS:H | 8 | 0.24 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:111:LYS:H | 8 | 0.24 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:111:LYS:H | 8 | 0.24 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:136:ILE:HD11 | 6 | 0.24 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:136:ILE:HD12 | 6 | 0.24 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:136:ILE:HD13 | 6 | 0.24 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:136:ILE:HD11 | 6 | 0.24 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:136:ILE:HD12 | 6 | 0.24 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:136:ILE:HD13 | 6 | 0.24 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:136:ILE:HD11 | 6 | 0.24 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:136:ILE:HD12 | 6 | 0.24 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:136:ILE:HD13 | 6 | 0.24 |
| (7,24) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:39:LEU:HD11 | 6 | 0.24 |
| (7,24) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:39:LEU:HD12 | 6 | 0.24 |
| (7,24) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:39:LEU:HD13 | 6 | 0.24 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG11 | 13 | 0.24 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG12 | 13 | 0.24 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG13 | 13 | 0.24 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG2 | 7 | 0.24 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG3 | 7 | 0.24 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG2 | 7 | 0.24 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG3 | 7 | 0.24 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG2 | 7 | 0.24 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG3 | 7 | 0.24 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG11 | 1:A:137:GLY:HA2 | 2 | 0.24 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG11 | 1:A:137:GLY:HA3 | 2 | 0.24 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG12 | 1:A:137:GLY:HA2 | 2 | 0.24 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG12 | 1:A:137:GLY:HA3 | 2 | 0.24 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG13 | 1:A:137:GLY:HA2 | 2 | 0.24 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG13 | 1:A:137:GLY:HA3 | 2 | 0.24 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG11 | 1:A:137:GLY:HA2 | 12 | 0.24 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG11 | 1:A:137:GLY:HA3 | 12 | 0.24 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG12 | 1:A:137:GLY:HA2 | 12 | 0.24 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG12 | 1:A:137:GLY:HA3 | 12 | 0.24 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG13 | 1:A:137:GLY:HA2 | 12 | 0.24 |
| (7,203) | 1:A:94:VAL:HG13 | 1:A:137:GLY:HA3 | 12 | 0.24 |
| (7,190) | 1:A:91:TYR:HE1 | 1:A:113:LEU:HD11 | 10 | 0.24 |
| (7,190) | 1:A:91:TYR:HE1 | 1:A:113:LEU:HD12 | 10 | 0.24 |
| (7,190) | 1:A:91:TYR:HE1 | 1:A:113:LEU:HD13 | 10 | 0.24 |
| (7,190) | 1:A:91:TYR:HE2 | 1:A:113:LEU:HD11 | 10 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,190) | 1:A:91:TYR:HE2 | 1:A:113:LEU:HD12 | 10 | 0.24 |
| (7,190) | 1:A:91:TYR:HE2 | 1:A:113:LEU:HD13 | 10 | 0.24 |
| (7,190) | 1:A:91:TYR:HE1 | 1:A:113:LEU:HD11 | 11 | 0.24 |
| (7,190) | 1:A:91:TYR:HE1 | 1:A:113:LEU:HD12 | 11 | 0.24 |
| (7,190) | 1:A:91:TYR:HE1 | 1:A:113:LEU:HD13 | 11 | 0.24 |
| (7,190) | 1:A:91:TYR:HE2 | 1:A:113:LEU:HD11 | 11 | 0.24 |
| (7,190) | 1:A:91:TYR:HE2 | 1:A:113:LEU:HD12 | 11 | 0.24 |
| (7,190) | 1:A:91:TYR:HE2 | 1:A:113:LEU:HD13 | 11 | 0.24 |
| (7,146) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:90:THR:H | 9 | 0.24 |
| (7,146) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:90:THR:H | 9 | 0.24 |
| (7,146) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:90:THR:H | 9 | 0.24 |
| (7,12) | 1:A:23:TYR:H | 1:A:72:VAL:HG21 | 6 | 0.24 |
| (7,12) | 1:A:23:TYR:H | 1:A:72:VAL:HG22 | 6 | 0.24 |
| (7,12) | 1:A:23:TYR:H | 1:A:72:VAL:HG23 | 6 | 0.24 |
| (7,109) | 1:A:84:TRP:HD1 | 1:A:200:LEU:HD21 | 10 | 0.24 |
| (7,109) | 1:A:84:TRP:HD1 | 1:A:200:LEU:HD22 | 10 | 0.24 |
| (7,109) | 1:A:84:TRP:HD1 | 1:A:200:LEU:HD23 | 10 | 0.24 |
| (6,1) | 1:A:155:THR:HG1 | 1:A:154:ASN:OD1 | 8 | 0.24 |
| (5,2) | 1:A:66:ARG:NH2 | 1:A:71:ASP:OD1 | 9 | 0.24 |
| (4,7) | 3:A:302:CA:CA | 1:A:176:GLU:OE2 | 6 | 0.24 |
| (1,891) | 1:A:124:PHE:HD1 | 1:A:125:ARG:H | 9 | 0.24 |
| (1,891) | 1:A:124:PHE:HD2 | 1:A:125:ARG:H | 9 | 0.24 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HE1 | 12 | 0.24 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HE2 | 12 | 0.24 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB3 | 1:A:238:TYR:HE1 | 12 | 0.24 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB3 | 1:A:238:TYR:HE2 | 12 | 0.24 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:238:TYR:HB2 | 1 | 0.24 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:238:TYR:HB3 | 1 | 0.24 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:238:TYR:HB2 | 1 | 0.24 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:238:TYR:HB3 | 1 | 0.24 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:238:TYR:HB2 | 1 | 0.24 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:238:TYR:HB3 | 1 | 0.24 |
| (1,791) | 1:A:116:TRP:HB3 | 1:A:117:GLY:H | 13 | 0.24 |
| (1,785) | 1:A:116:TRP:H | 1:A:118:LYS:H | 9 | 0.24 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HB2 | 6 | 0.24 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HB3 | 6 | 0.24 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HB2 | 6 | 0.24 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HB3 | 6 | 0.24 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HB2 | 6 | 0.24 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HB3 | 6 | 0.24 |
| (1,757) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:115:MET:HB2 | 11 | 0.24 |
| (1,755) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:114:ASN:H | 16 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,738) | 1:A:111:LYS:HA | 1:A:113:LEU:H | 6 | 0.24 |
| (1,711) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:110:SER:H | 2 | 0.24 |
| (1,711) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:110:SER:H | 5 | 0.24 |
| (1,711) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:110:SER:H | 8 | 0.24 |
| (1,693) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:107:ARG:H | 1 | 0.24 |
| (1,61) | 1:A:18:TYR:HB3 | 1:A:20:LYS:H | 15 | 0.24 |
| (1,561) | 1:A:92:ARG:HD2 | 1:A:132:ALA:H | 14 | 0.24 |
| (1,561) | 1:A:92:ARG:HD3 | 1:A:132:ALA:H | 14 | 0.24 |
| (1,454) | 1:A:83:LYS:HE2 | 1:A:202:MET:HE1 | 15 | 0.24 |
| (1,454) | 1:A:83:LYS:HE2 | 1:A:202:MET:HE2 | 15 | 0.24 |
| (1,454) | 1:A:83:LYS:HE2 | 1:A:202:MET:HE3 | 15 | 0.24 |
| (1,454) | 1:A:83:LYS:HE3 | 1:A:202:MET:HE1 | 15 | 0.24 |
| (1,454) | 1:A:83:LYS:HE3 | 1:A:202:MET:HE2 | 15 | 0.24 |
| (1,454) | 1:A:83:LYS:HE3 | 1:A:202:MET:HE3 | 15 | 0.24 |
| (1,448) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:202:MET:HA | 8 | 0.24 |
| (1,448) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:202:MET:HA | 8 | 0.24 |
| (1,44) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:18:TYR:H | 2 | 0.24 |
| (1,44) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:18:TYR:H | 7 | 0.24 |
| (1,434) | 1:A:78:PHE:H | 1:A:78:PHE:HD1 | 13 | 0.24 |
| (1,434) | 1:A:78:PHE:H | 1:A:78:PHE:HD2 | 13 | 0.24 |
| (1,420) | 1:A:73:ALA:H | 1:A:74:GLU:H | 10 | 0.24 |
| (1,408) | 1:A:69:VAL:HA | 1:A:70:PRO:HG2 | 9 | 0.24 |
| (1,408) | 1:A:69:VAL:HA | 1:A:70:PRO:HG3 | 9 | 0.24 |
| (1,400) | 1:A:68:GLY:H | 1:A:158:HIS:HB3 | 15 | 0.24 |
| (1,4) | 1:A:4:ALA:HB1 | 1:A:59:ILE:HB | 4 | 0.24 |
| (1,4) | 1:A:4:ALA:HB2 | 1:A:59:ILE:HB | 4 | 0.24 |
| (1,4) | 1:A:4:ALA:HB3 | 1:A:59:ILE:HB | 4 | 0.24 |
| (1,384) | 1:A:67:CYS:HA | 1:A:69:VAL:H | 3 | 0.24 |
| (1,384) | 1:A:67:CYS:HA | 1:A:69:VAL:H | 11 | 0.24 |
| (1,371) | 1:A:63:GLN:HB2 | 1:A:64:LYS:H | 15 | 0.24 |
| (1,371) | 1:A:63:GLN:HB3 | 1:A:64:LYS:H | 15 | 0.24 |
| (1,347) | 1:A:61:ILE:HA | 1:A:63:GLN:H | 16 | 0.24 |
| (1,301) | 1:A:56:SER:HB3 | 1:A:58:VAL:H | 13 | 0.24 |
| (1,168) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:52:GLY:H | 1 | 0.24 |
| (1,168) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:52:GLY:H | 9 | 0.24 |
| (1,161) | 1:A:39:LEU:H | 1:A:41:GLU:H | 3 | 0.24 |
| (1,1440) | 1:A:233:GLY:HA2 | 1:A:235:GLN:H | 5 | 0.24 |
| (1,1402) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HB | 8 | 0.24 |
| (1,1347) | 1:A:209:ASN:HD21 | 1:A:210:ALA:HB1 | 1 | 0.24 |
| (1,1347) | 1:A:209:ASN:HD21 | 1:A:210:ALA:HB2 | 1 | 0.24 |
| (1,1347) | 1:A:209:ASN:HD21 | 1:A:210:ALA:HB3 | 1 | 0.24 |
| (1,1347) | 1:A:209:ASN:HD22 | 1:A:210:ALA:HB1 | 1 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1347) | 1:A:209:ASN:HD22 | 1:A:210:ALA:HB2 | 1 | 0.24 |
| (1,1347) | 1:A:209:ASN:HD22 | 1:A:210:ALA:HB3 | 1 | 0.24 |
| (1,1331) | 1:A:205:SER:H | 1:A:213:TYR:H | 6 | 0.24 |
| (1,1308) | 1:A:202:MET:H | 1:A:234:ILE:HD11 | 5 | 0.24 |
| (1,1308) | 1:A:202:MET:H | 1:A:234:ILE:HD12 | 5 | 0.24 |
| (1,1308) | 1:A:202:MET:H | 1:A:234:ILE:HD13 | 5 | 0.24 |
| (1,1308) | 1:A:202:MET:H | 1:A:234:ILE:HD11 | 10 | 0.24 |
| (1,1308) | 1:A:202:MET:H | 1:A:234:ILE:HD12 | 10 | 0.24 |
| (1,1308) | 1:A:202:MET:H | 1:A:234:ILE:HD13 | 10 | 0.24 |
| (1,1295) | 1:A:199:SER:H | 1:A:201:GLY:H | 13 | 0.24 |
| (1,1290) | 1:A:198:HIS:HE1 | 1:A:204:HIS:H | 9 | 0.24 |
| (1,1290) | 1:A:198:HIS:HE1 | 1:A:204:HIS:H | 15 | 0.24 |
| (1,129) | 1:A:34:SER:HA | 1:A:36:GLU:H | 13 | 0.24 |
| (1,1208) | 1:A:179:THR:HB | 1:A:185:GLY:H | 10 | 0.24 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD11 | 2 | 0.24 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD12 | 2 | 0.24 |
| (1,1200) | 1:A:178:TRP:HZ3 | 1:A:186:ILE:HD13 | 2 | 0.24 |
| (1,1160) | 1:A:173:ASP:H | 1:A:174:GLU:H | 1 | 0.24 |
| (1,1126) | 1:A:165:GLY:HA2 | 1:A:167:GLY:H | 14 | 0.24 |
| (1,1126) | 1:A:165:GLY:HA3 | 1:A:167:GLY:H | 14 | 0.24 |
| (1,106) | 1:A:25:TYR:H | 1:A:26:ASP:H | 2 | 0.24 |
| (1,1054) | 1:A:155:THR:HG21 | 1:A:158:HIS:HA | 10 | 0.24 |
| (1,1054) | 1:A:155:THR:HG22 | 1:A:158:HIS:HA | 10 | 0.24 |
| (1,1054) | 1:A:155:THR:HG23 | 1:A:158:HIS:HA | 10 | 0.24 |
| (1,105) | 1:A:25:TYR:H | 1:A:25:TYR:HD1 | 7 | 0.24 |
| (1,105) | 1:A:25:TYR:H | 1:A:25:TYR:HD2 | 7 | 0.24 |
| (1,1041) | 1:A:153:GLY:H | 1:A:154:ASN:H | 15 | 0.24 |
| (7,98) | 1:A:83:LYS:HB2 | 1:A:237:LEU:HD21 | 5 | 0.23 |
| (7,98) | 1:A:83:LYS:HB2 | 1:A:237:LEU:HD22 | 5 | 0.23 |
| (7,98) | 1:A:83:LYS:HB2 | 1:A:237:LEU:HD23 | 5 | 0.23 |
| (7,98) | 1:A:83:LYS:HB3 | 1:A:237:LEU:HD21 | 5 | 0.23 |
| (7,98) | 1:A:83:LYS:HB3 | 1:A:237:LEU:HD22 | 5 | 0.23 |
| (7,98) | 1:A:83:LYS:HB3 | 1:A:237:LEU:HD23 | 5 | 0.23 |
| (7,441) | 1:A:211:VAL:HG21 | 1:A:227:SER:H | 4 | 0.23 |
| (7,441) | 1:A:211:VAL:HG22 | 1:A:227:SER:H | 4 | 0.23 |
| (7,441) | 1:A:211:VAL:HG23 | 1:A:227:SER:H | 4 | 0.23 |
| (7,433) | 1:A:200:LEU:HD11 | 1:A:201:GLY:H | 4 | 0.23 |
| (7,433) | 1:A:200:LEU:HD12 | 1:A:201:GLY:H | 4 | 0.23 |
| (7,433) | 1:A:200:LEU:HD13 | 1:A:201:GLY:H | 4 | 0.23 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD11 | 1:A:186:ILE:H | 14 | 0.23 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD12 | 1:A:186:ILE:H | 14 | 0.23 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD13 | 1:A:186:ILE:H | 14 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,373) | 1:A:128:VAL:HA | 1:A:127:VAL:HG21 | 8 | 0.23 |
| (7,373) | 1:A:128:VAL:HA | 1:A:127:VAL:HG22 | 8 | 0.23 |
| (7,373) | 1:A:128:VAL:HA | 1:A:127:VAL:HG23 | 8 | 0.23 |
| (7,373) | 1:A:128:VAL:HA | 1:A:127:VAL:HG21 | 11 | 0.23 |
| (7,373) | 1:A:128:VAL:HA | 1:A:127:VAL:HG22 | 11 | 0.23 |
| (7,373) | 1:A:128:VAL:HA | 1:A:127:VAL:HG23 | 11 | 0.23 |
| (7,373) | 1:A:128:VAL:HA | 1:A:127:VAL:HG21 | 14 | 0.23 |
| (7,373) | 1:A:128:VAL:HA | 1:A:127:VAL:HG22 | 14 | 0.23 |
| (7,373) | 1:A:128:VAL:HA | 1:A:127:VAL:HG23 | 14 | 0.23 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:238:TYR:HD1 | 7 | 0.23 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:238:TYR:HD2 | 7 | 0.23 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:238:TYR:HD1 | 7 | 0.23 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:238:TYR:HD2 | 7 | 0.23 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:238:TYR:HD1 | 7 | 0.23 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:238:TYR:HD2 | 7 | 0.23 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:134:ILE:HD11 | 16 | 0.23 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:134:ILE:HD12 | 16 | 0.23 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:134:ILE:HD13 | 16 | 0.23 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:134:ILE:HD11 | 16 | 0.23 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:134:ILE:HD12 | 16 | 0.23 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:134:ILE:HD13 | 16 | 0.23 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:134:ILE:HD11 | 16 | 0.23 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:134:ILE:HD12 | 16 | 0.23 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:134:ILE:HD13 | 16 | 0.23 |
| (7,282) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:113:LEU:HD11 | 9 | 0.23 |
| (7,282) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:113:LEU:HD12 | 9 | 0.23 |
| (7,282) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:113:LEU:HD13 | 9 | 0.23 |
| (7,282) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:113:LEU:HD11 | 9 | 0.23 |
| (7,282) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:113:LEU:HD12 | 9 | 0.23 |
| (7,282) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:113:LEU:HD13 | 9 | 0.23 |
| (7,282) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:113:LEU:HD11 | 9 | 0.23 |
| (7,282) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:113:LEU:HD12 | 9 | 0.23 |
| (7,282) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:113:LEU:HD13 | 9 | 0.23 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:136:ILE:HD11 | 11 | 0.23 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:136:ILE:HD12 | 11 | 0.23 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:136:ILE:HD13 | 11 | 0.23 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:136:ILE:HD11 | 11 | 0.23 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:136:ILE:HD12 | 11 | 0.23 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:136:ILE:HD13 | 11 | 0.23 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:136:ILE:HD11 | 11 | 0.23 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:136:ILE:HD12 | 11 | 0.23 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:136:ILE:HD13 | 11 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,242) | 1:A:102:HIS:HD2 | 1:A:105:VAL:HG11 | 1 | 0.23 |
| (7,242) | 1:A:102:HIS:HD2 | 1:A:105:VAL:HG12 | 1 | 0.23 |
| (7,242) | 1:A:102:HIS:HD2 | 1:A:105:VAL:HG13 | 1 | 0.23 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG11 | 16 | 0.23 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG12 | 16 | 0.23 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG13 | 16 | 0.23 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG2 | 9 | 0.23 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG3 | 9 | 0.23 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG2 | 9 | 0.23 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG3 | 9 | 0.23 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG2 | 9 | 0.23 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG3 | 9 | 0.23 |
| (7,107) | 1:A:84:TRP:HD1 | 1:A:122:LEU:HD11 | 10 | 0.23 |
| (7,107) | 1:A:84:TRP:HD1 | 1:A:122:LEU:HD12 | 10 | 0.23 |
| (7,107) | 1:A:84:TRP:HD1 | 1:A:122:LEU:HD13 | 10 | 0.23 |
| (4,23) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:194:HIS:NE2 | 2 | 0.23 |
| (1,981) | 1:A:136:ILE:HG21 | 1:A:170:ALA:H | 1 | 0.23 |
| (1,981) | 1:A:136:ILE:HG22 | 1:A:170:ALA:H | 1 | 0.23 |
| (1,981) | 1:A:136:ILE:HG23 | 1:A:170:ALA:H | 1 | 0.23 |
| (1,981) | 1:A:136:ILE:HG21 | 1:A:170:ALA:H | 5 | 0.23 |
| (1,981) | 1:A:136:ILE:HG22 | 1:A:170:ALA:H | 5 | 0.23 |
| (1,981) | 1:A:136:ILE:HG23 | 1:A:170:ALA:H | 5 | 0.23 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD11 | 1:A:137:GLY:H | 8 | 0.23 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD12 | 1:A:137:GLY:H | 8 | 0.23 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD13 | 1:A:137:GLY:H | 8 | 0.23 |
| (1,951) | 1:A:134:ILE:HD11 | 1:A:135:MET:H | 6 | 0.23 |
| (1,951) | 1:A:134:ILE:HD12 | 1:A:135:MET:H | 6 | 0.23 |
| (1,951) | 1:A:134:ILE:HD13 | 1:A:135:MET:H | 6 | 0.23 |
| (1,915) | 1:A:128:VAL:HB | 1:A:129:TRP:HD1 | 7 | 0.23 |
| (1,776) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:193:THR:HG21 | 8 | 0.23 |
| (1,776) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:193:THR:HG22 | 8 | 0.23 |
| (1,776) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:193:THR:HG23 | 8 | 0.23 |
| (1,776) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:193:THR:HG21 | 8 | 0.23 |
| (1,776) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:193:THR:HG22 | 8 | 0.23 |
| (1,776) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:193:THR:HG23 | 8 | 0.23 |
| (1,776) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:193:THR:HG21 | 8 | 0.23 |
| (1,776) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:193:THR:HG22 | 8 | 0.23 |
| (1,776) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:193:THR:HG23 | 8 | 0.23 |
| (1,769) | 1:A:114:ASN:HA | 1:A:118:LYS:H | 9 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:115:MET:HB2 | 1 | 0.23 |
| (1,755) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:114:ASN:H | 3 | 0.23 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB1 | 3 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB2 | 3 | 0.23 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB3 | 3 | 0.23 |
| (1,721) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:188:PHE:HE1 | 13 | 0.23 |
| (1,721) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:188:PHE:HE2 | 13 | 0.23 |
| (1,698) | 1:A:106:ASP:H | 1:A:107:ARG:HG2 | 1 | 0.23 |
| (1,698) | 1:A:106:ASP:H | 1:A:107:ARG:HG3 | 1 | 0.23 |
| (1,698) | 1:A:106:ASP:H | 1:A:107:ARG:HG2 | 15 | 0.23 |
| (1,698) | 1:A:106:ASP:H | 1:A:107:ARG:HG3 | 15 | 0.23 |
| (1,694) | 1:A:105:VAL:HA | 1:A:188:PHE:HE1 | 8 | 0.23 |
| (1,694) | 1:A:105:VAL:HA | 1:A:188:PHE:HE2 | 8 | 0.23 |
| (1,692) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:106:ASP:HB2 | 12 | 0.23 |
| (1,692) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:106:ASP:HB3 | 12 | 0.23 |
| (1,692) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:106:ASP:HB2 | 13 | 0.23 |
| (1,692) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:106:ASP:HB3 | 13 | 0.23 |
| (1,670) | 1:A:103:ILE:HD11 | 1:A:104:THR:H | 12 | 0.23 |
| (1,670) | 1:A:103:ILE:HD12 | 1:A:104:THR:H | 12 | 0.23 |
| (1,670) | 1:A:103:ILE:HD13 | 1:A:104:THR:H | 12 | 0.23 |
| (1,606) | 1:A:96:TYR:HA | 1:A:102:HIS:HD2 | 8 | 0.23 |
| (1,56) | 1:A:18:TYR:HB2 | 1:A:20:LYS:H | 9 | 0.23 |
| (1,56) | 1:A:18:TYR:HB3 | 1:A:20:LYS:H | 9 | 0.23 |
| (1,547) | 1:A:92:ARG:HA | 1:A:92:ARG:HE | 4 | 0.23 |
| (1,519) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:134:ILE:HG21 | 13 | 0.23 |
| (1,519) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:134:ILE:HG22 | 13 | 0.23 |
| (1,519) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:134:ILE:HG23 | 13 | 0.23 |
| (1,468) | 1:A:84:TRP:HE1 | 1:A:200:LEU:H | 14 | 0.23 |
| (1,448) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:202:MET:HA | 10 | 0.23 |
| (1,448) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:202:MET:HA | 10 | 0.23 |
| (1,314) | 1:A:58:VAL:H | 1:A:60:GLU:H | 13 | 0.23 |
| (1,299) | 1:A:56:SER:HB2 | 1:A:58:VAL:H | 6 | 0.23 |
| (1,278) | 1:A:50:ILE:H | 1:A:51:THR:HG21 | 3 | 0.23 |
| (1,278) | 1:A:50:ILE:H | 1:A:51:THR:HG22 | 3 | 0.23 |
| (1,278) | 1:A:50:ILE:H | 1:A:51:THR:HG23 | 3 | 0.23 |
| (1,277) | 1:A:50:ILE:H | 1:A:51:THR:H | 13 | 0.23 |
| (1,269) | 1:A:48:LEU:HG | 1:A:215:THR:HG21 | 7 | 0.23 |
| (1,269) | 1:A:48:LEU:HG | 1:A:215:THR:HG22 | 7 | 0.23 |
| (1,269) | 1:A:48:LEU:HG | 1:A:215:THR:HG23 | 7 | 0.23 |
| (1,192) | 1:A:42:MET:HE1 | 1:A:61:ILE:HB | 5 | 0.23 |
| (1,192) | 1:A:42:MET:HE2 | 1:A:61:ILE:HB | 5 | 0.23 |
| (1,192) | 1:A:42:MET:HE3 | 1:A:61:ILE:HB | 5 | 0.23 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE1 | 1:A:43:GLN:HG2 | 14 | 0.23 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE1 | 1:A:43:GLN:HG3 | 14 | 0.23 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE2 | 1:A:43:GLN:HG2 | 14 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE2 | 1:A:43:GLN:HG3 | 14 | 0.23 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE3 | 1:A:43:GLN:HG2 | 14 | 0.23 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE3 | 1:A:43:GLN:HG3 | 14 | 0.23 |
| (1,171) | 1:A:40:LYS:HB2 | 1:A:52:GLY:H | 14 | 0.23 |
| (1,171) | 1:A:40:LYS:HB3 | 1:A:52:GLY:H | 14 | 0.23 |
| (1,156) | 1:A:38:LYS:HA | 1:A:41:GLU:HG3 | 6 | 0.23 |
| (1,1405) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:H | 2 | 0.23 |
| (1,1405) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:H | 2 | 0.23 |
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:230:ASP:HA | 3 | 0.23 |
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:230:ASP:HA | 3 | 0.23 |
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:230:ASP:HA | 3 | 0.23 |
| (1,1295) | 1:A:199:SER:H | 1:A:201:GLY:H | 6 | 0.23 |
| (1,123) | 1:A:29:THR:HG21 | 1:A:38:LYS:H | 2 | 0.23 |
| (1,123) | 1:A:29:THR:HG22 | 1:A:38:LYS:H | 2 | 0.23 |
| (1,123) | 1:A:29:THR:HG23 | 1:A:38:LYS:H | 2 | 0.23 |
| (1,1199) | 1:A:178:TRP:HZ2 | 1:A:186:ILE:HG13 | 12 | 0.23 |
| (1,1193) | 1:A:178:TRP:HE3 | 1:A:188:PHE:H | 16 | 0.23 |
| (1,1097) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:168:GLY:HA2 | 1 | 0.23 |
| (1,1097) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:168:GLY:HA2 | 9 | 0.23 |
| (1,108) | 1:A:25:TYR:HB3 | 1:A:26:ASP:HA | 8 | 0.23 |
| (1,1060) | 1:A:156:LEU:HB3 | 1:A:178:TRP:HH2 | 10 | 0.23 |
| (1,1060) | 1:A:156:LEU:HB3 | 1:A:178:TRP:HH2 | 12 | 0.23 |
| (1,1058) | 1:A:156:LEU:HB2 | 1:A:178:TRP:HH2 | 6 | 0.23 |
| (1,1058) | 1:A:156:LEU:HB3 | 1:A:178:TRP:HH2 | 6 | 0.23 |
| (1,1054) | 1:A:155:THR:HG21 | 1:A:158:HIS:HA | 15 | 0.23 |
| (1,1054) | 1:A:155:THR:HG22 | 1:A:158:HIS:HA | 15 | 0.23 |
| (1,1054) | 1:A:155:THR:HG23 | 1:A:158:HIS:HA | 15 | 0.23 |
| (1,1041) | 1:A:153:GLY:H | 1:A:154:ASN:H | 9 | 0.23 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:211:VAL:HG11 | 16 | 0.22 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:211:VAL:HG12 | 16 | 0.22 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:211:VAL:HG13 | 16 | 0.22 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:211:VAL:HG11 | 16 | 0.22 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:211:VAL:HG12 | 16 | 0.22 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:211:VAL:HG13 | 16 | 0.22 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:211:VAL:HG11 | 16 | 0.22 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:211:VAL:HG12 | 16 | 0.22 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:211:VAL:HG13 | 16 | 0.22 |
| (7,428) | 1:A:198:HIS:H | 1:A:200:LEU:HG | 5 | 0.22 |
| (7,428) | 1:A:198:HIS:H | 1:A:200:LEU:HG | 10 | 0.22 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG11 | 13 | 0.22 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG12 | 13 | 0.22 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG13 | 13 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,417) | 1:A:194:HIS:H | 1:A:211:VAL:HG11 | 7 | 0.22 |
| (7,417) | 1:A:194:HIS:H | 1:A:211:VAL:HG12 | 7 | 0.22 |
| (7,417) | 1:A:194:HIS:H | 1:A:211:VAL:HG13 | 7 | 0.22 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:173:ASP:HB2 | 5 | 0.22 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:173:ASP:HB3 | 5 | 0.22 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:173:ASP:HB2 | 5 | 0.22 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:173:ASP:HB3 | 5 | 0.22 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:173:ASP:HB2 | 5 | 0.22 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:173:ASP:HB3 | 5 | 0.22 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG21 | 9 | 0.22 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG22 | 9 | 0.22 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG23 | 9 | 0.22 |
| (7,339) | 1:A:116:TRP:HZ2 | 1:A:226:LEU:HD21 | 14 | 0.22 |
| (7,339) | 1:A:116:TRP:HZ2 | 1:A:226:LEU:HD22 | 14 | 0.22 |
| (7,339) | 1:A:116:TRP:HZ2 | 1:A:226:LEU:HD23 | 14 | 0.22 |
| (7,329) | 1:A:116:TRP:H | 1:A:200:LEU:HD11 | 16 | 0.22 |
| (7,329) | 1:A:116:TRP:H | 1:A:200:LEU:HD12 | 16 | 0.22 |
| (7,329) | 1:A:116:TRP:H | 1:A:200:LEU:HD13 | 16 | 0.22 |
| (7,31) | 1:A:43:GLN:H | 1:A:48:LEU:HD11 | 4 | 0.22 |
| (7,31) | 1:A:43:GLN:H | 1:A:48:LEU:HD12 | 4 | 0.22 |
| (7,31) | 1:A:43:GLN:H | 1:A:48:LEU:HD13 | 4 | 0.22 |
| (7,301) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:196:LEU:HD11 | 8 | 0.22 |
| (7,301) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:196:LEU:HD12 | 8 | 0.22 |
| (7,301) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:196:LEU:HD13 | 8 | 0.22 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:111:LYS:H | 11 | 0.22 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:111:LYS:H | 11 | 0.22 |
| (7,278) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:111:LYS:H | 11 | 0.22 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:136:ILE:HD11 | 10 | 0.22 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:136:ILE:HD12 | 10 | 0.22 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:136:ILE:HD13 | 10 | 0.22 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:136:ILE:HD11 | 10 | 0.22 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:136:ILE:HD12 | 10 | 0.22 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:136:ILE:HD13 | 10 | 0.22 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:136:ILE:HD11 | 10 | 0.22 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:136:ILE:HD12 | 10 | 0.22 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:136:ILE:HD13 | 10 | 0.22 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG21 | 15 | 0.22 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG22 | 15 | 0.22 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG23 | 15 | 0.22 |
| (7,15) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:72:VAL:HG21 | 13 | 0.22 |
| (7,15) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:72:VAL:HG22 | 13 | 0.22 |
| (7,15) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:72:VAL:HG23 | 13 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (7,1) | 1:A:10:LEU:H | 1:A:10:LEU:HD11 | 10 | 0.22 |
| (7,1) | 1:A:10:LEU:H | 1:A:10:LEU:HD12 | 10 | 0.22 |
| (7,1) | 1:A:10:LEU:H | 1:A:10:LEU:HD13 | 10 | 0.22 |
| (7,1) | 1:A:10:LEU:H | 1:A:10:LEU:HD21 | 10 | 0.22 |
| (7,1) | 1:A:10:LEU:H | 1:A:10:LEU:HD22 | 10 | 0.22 |
| (7,1) | 1:A:10:LEU:H | 1:A:10:LEU:HD23 | 10 | 0.22 |
| (7,1) | 1:A:10:LEU:H | 1:A:10:LEU:HD11 | 13 | 0.22 |
| (7,1) | 1:A:10:LEU:H | 1:A:10:LEU:HD12 | 13 | 0.22 |
| (7,1) | 1:A:10:LEU:H | 1:A:10:LEU:HD13 | 13 | 0.22 |
| (7,1) | 1:A:10:LEU:H | 1:A:10:LEU:HD21 | 13 | 0.22 |
| (7,1) | 1:A:10:LEU:H | 1:A:10:LEU:HD22 | 13 | 0.22 |
| (7,1) | 1:A:10:LEU:H | 1:A:10:LEU:HD23 | 13 | 0.22 |
| (4,4) | 3:A:301:CA:CA | 1:A:169:ASP:OD2 | 9 | 0.22 |
| (4,23) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:194:HIS:NE2 | 4 | 0.22 |
| (4,23) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:194:HIS:NE2 | 7 | 0.22 |
| (4,23) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:194:HIS:NE2 | 8 | 0.22 |
| (4,23) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:194:HIS:NE2 | 9 | 0.22 |
| (4,23) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:194:HIS:NE2 | 10 | 0.22 |
| (4,23) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:194:HIS:NE2 | 12 | 0.22 |
| (4,23) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:194:HIS:NE2 | 14 | 0.22 |
| (4,23) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:194:HIS:NE2 | 16 | 0.22 |
| (4,19) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:204:HIS:NE2 | 3 | 0.22 |
| (2,3) | 1:A:231:ILE:HD11 | 1:A:232:LYS:HB3 | 11 | 0.22 |
| (2,3) | 1:A:231:ILE:HD12 | 1:A:232:LYS:HB3 | 11 | 0.22 |
| (2,3) | 1:A:231:ILE:HD13 | 1:A:232:LYS:HB3 | 11 | 0.22 |
| (1,985) | 1:A:137:GLY:H | 1:A:170:ALA:H | 4 | 0.22 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD11 | 1:A:137:GLY:H | 4 | 0.22 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD12 | 1:A:137:GLY:H | 4 | 0.22 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD13 | 1:A:137:GLY:H | 4 | 0.22 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD11 | 1:A:137:GLY:H | 7 | 0.22 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD12 | 1:A:137:GLY:H | 7 | 0.22 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD13 | 1:A:137:GLY:H | 7 | 0.22 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD11 | 1:A:137:GLY:H | 10 | 0.22 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD12 | 1:A:137:GLY:H | 10 | 0.22 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD13 | 1:A:137:GLY:H | 10 | 0.22 |
| (1,903) | 1:A:126:LYS:HD2 | 1:A:127:VAL:HB | 4 | 0.22 |
| (1,891) | 1:A:124:PHE:HD1 | 1:A:125:ARG:H | 13 | 0.22 |
| (1,891) | 1:A:124:PHE:HD2 | 1:A:125:ARG:H | 13 | 0.22 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HE1 | 13 | 0.22 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HE2 | 13 | 0.22 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB3 | 1:A:238:TYR:HE1 | 13 | 0.22 |
| (1,880) | 1:A:122:LEU:HB3 | 1:A:238:TYR:HE2 | 13 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:202:MET:HE1 | 4 | 0.22 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:202:MET:HE2 | 4 | 0.22 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:202:MET:HE3 | 4 | 0.22 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:202:MET:HE1 | 4 | 0.22 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:202:MET:HE2 | 4 | 0.22 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:202:MET:HE3 | 4 | 0.22 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:202:MET:HE1 | 4 | 0.22 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:202:MET:HE2 | 4 | 0.22 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:202:MET:HE3 | 4 | 0.22 |
| (1,81) | 1:A:20:LYS:HG2 | 1:A:26:ASP:H | 3 | 0.22 |
| (1,81) | 1:A:20:LYS:HG3 | 1:A:26:ASP:H | 3 | 0.22 |
| (1,801) | 1:A:116:TRP:HE1 | 1:A:198:HIS:H | 1 | 0.22 |
| (1,785) | 1:A:116:TRP:H | 1:A:118:LYS:H | 11 | 0.22 |
| (1,757) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:115:MET:HB2 | 12 | 0.22 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB1 | 2 | 0.22 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB2 | 2 | 0.22 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB3 | 2 | 0.22 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB1 | 4 | 0.22 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB2 | 4 | 0.22 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB3 | 4 | 0.22 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB1 | 16 | 0.22 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB2 | 16 | 0.22 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB3 | 16 | 0.22 |
| (1,711) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:110:SER:H | 1 | 0.22 |
| (1,711) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:110:SER:H | 3 | 0.22 |
| (1,711) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:110:SER:H | 16 | 0.22 |
| (1,698) | 1:A:106:ASP:H | 1:A:107:ARG:HG2 | 2 | 0.22 |
| (1,698) | 1:A:106:ASP:H | 1:A:107:ARG:HG3 | 2 | 0.22 |
| (1,693) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:107:ARG:H | 6 | 0.22 |
| (1,62) | 1:A:18:TYR:HB3 | 1:A:62:MET:HE1 | 12 | 0.22 |
| (1,62) | 1:A:18:TYR:HB3 | 1:A:62:MET:HE2 | 12 | 0.22 |
| (1,62) | 1:A:18:TYR:HB3 | 1:A:62:MET:HE3 | 12 | 0.22 |
| (1,61) | 1:A:18:TYR:HB3 | 1:A:20:LYS:H | 14 | 0.22 |
| (1,545) | 1:A:92:ARG:H | 1:A:136:ILE:HD11 | 13 | 0.22 |
| (1,545) | 1:A:92:ARG:H | 1:A:136:ILE:HD12 | 13 | 0.22 |
| (1,545) | 1:A:92:ARG:H | 1:A:136:ILE:HD13 | 13 | 0.22 |
| (1,53) | 1:A:18:TYR:H | 1:A:21:ARG:HG2 | 12 | 0.22 |
| (1,514) | 1:A:91:TYR:H | 1:A:126:LYS:HA | 2 | 0.22 |
| (1,420) | 1:A:73:ALA:H | 1:A:74:GLU:H | 11 | 0.22 |
| (1,400) | 1:A:68:GLY:H | 1:A:158:HIS:HB3 | 8 | 0.22 |
| (1,33) | 1:A:15:ALA:H | 1:A:59:ILE:HD11 | 3 | 0.22 |
| (1,33) | 1:A:15:ALA:H | 1:A:59:ILE:HD12 | 3 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,33) | 1:A:15:ALA:H | 1:A:59:ILE:HD13 | 3 | 0.22 |
| (1,33) | 1:A:15:ALA:H | 1:A:59:ILE:HD11 | 14 | 0.22 |
| (1,33) | 1:A:15:ALA:H | 1:A:59:ILE:HD12 | 14 | 0.22 |
| (1,33) | 1:A:15:ALA:H | 1:A:59:ILE:HD13 | 14 | 0.22 |
| (1,304) | 1:A:57:ARG:H | 1:A:59:ILE:H | 14 | 0.22 |
| (1,296) | 1:A:56:SER:H | 1:A:58:VAL:HB | 5 | 0.22 |
| (1,272) | 1:A:49:PRO:HG2 | 1:A:50:ILE:HA | 2 | 0.22 |
| (1,270) | 1:A:49:PRO:HB2 | 1:A:50:ILE:HG21 | 2 | 0.22 |
| (1,270) | 1:A:49:PRO:HB2 | 1:A:50:ILE:HG22 | 2 | 0.22 |
| (1,270) | 1:A:49:PRO:HB2 | 1:A:50:ILE:HG23 | 2 | 0.22 |
| (1,27) | 1:A:14:GLN:H | 1:A:16:GLN:H | 4 | 0.22 |
| (1,192) | 1:A:42:MET:HE1 | 1:A:61:ILE:HB | 9 | 0.22 |
| (1,192) | 1:A:42:MET:HE2 | 1:A:61:ILE:HB | 9 | 0.22 |
| (1,192) | 1:A:42:MET:HE3 | 1:A:61:ILE:HB | 9 | 0.22 |
| (1,154) | 1:A:38:LYS:HA | 1:A:41:GLU:H | 4 | 0.22 |
| (1,1398) | 1:A:228:GLN:H | 1:A:230:ASP:HB2 | 1 | 0.22 |
| (1,1398) | 1:A:228:GLN:H | 1:A:230:ASP:HB3 | 1 | 0.22 |
| (1,1398) | 1:A:228:GLN:H | 1:A:230:ASP:HB2 | 16 | 0.22 |
| (1,1398) | 1:A:228:GLN:H | 1:A:230:ASP:HB3 | 16 | 0.22 |
| (1,1396) | 1:A:227:SER:H | 1:A:231:ILE:H | 3 | 0.22 |
| (1,1326) | 1:A:204:HIS:HA | 1:A:214:PRO:HD3 | 2 | 0.22 |
| (1,1326) | 1:A:204:HIS:HA | 1:A:214:PRO:HD3 | 14 | 0.22 |
| (1,1295) | 1:A:199:SER:H | 1:A:201:GLY:H | 9 | 0.22 |
| (1,1208) | 1:A:179:THR:HB | 1:A:185:GLY:H | 7 | 0.22 |
| (1,1198) | 1:A:178:TRP:HZ2 | 1:A:186:ILE:HB | 8 | 0.22 |
| (1,1181) | 1:A:177:ARG:H | 1:A:186:ILE:H | 3 | 0.22 |
| (1,1163) | 1:A:173:ASP:H | 1:A:178:TRP:HE1 | 5 | 0.22 |
| (1,1135) | 1:A:171:HIS:H | 1:A:172:PHE:HD1 | 9 | 0.22 |
| (1,1135) | 1:A:171:HIS:H | 1:A:172:PHE:HD2 | 9 | 0.22 |
| (1,1111) | 1:A:161:ALA:H | 1:A:163:GLY:H | 6 | 0.22 |
| (1,1108) | 1:A:160:PHE:HD1 | 1:A:169:ASP:H | 9 | 0.22 |
| (1,1108) | 1:A:160:PHE:HD2 | 1:A:169:ASP:H | 9 | 0.22 |
| (1,1100) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:198:HIS:HB2 | 6 | 0.22 |
| (1,108) | 1:A:25:TYR:HB3 | 1:A:26:ASP:HA | 7 | 0.22 |
| (1,108) | 1:A:25:TYR:HB3 | 1:A:26:ASP:HA | 16 | 0.22 |
| (1,1058) | 1:A:156:LEU:HB2 | 1:A:178:TRP:HH2 | 1 | 0.22 |
| (1,1058) | 1:A:156:LEU:HB3 | 1:A:178:TRP:HH2 | 1 | 0.22 |
| (1,1058) | 1:A:156:LEU:HB2 | 1:A:178:TRP:HH2 | 14 | 0.22 |
| (1,1058) | 1:A:156:LEU:HB3 | 1:A:178:TRP:HH2 | 14 | 0.22 |
| (1,1027) | 1:A:147:TYR:H | 1:A:147:TYR:HD1 | 1 | 0.22 |
| (1,1027) | 1:A:147:TYR:H | 1:A:147:TYR:HD2 | 1 | 0.22 |
| (1,1020) | 1:A:142:ALA:HB1 | 1:A:145:ASP:H | 4 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1020) | 1:A:142:ALA:HB2 | 1:A:145:ASP:H | 4 | 0.22 |
| (1,1020) | 1:A:142:ALA:HB3 | 1:A:145:ASP:H | 4 | 0.22 |
| (7,433) | 1:A:200:LEU:HD11 | 1:A:201:GLY:H | 11 | 0.21 |
| (7,433) | 1:A:200:LEU:HD12 | 1:A:201:GLY:H | 11 | 0.21 |
| (7,433) | 1:A:200:LEU:HD13 | 1:A:201:GLY:H | 11 | 0.21 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG21 | 4 | 0.21 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG22 | 4 | 0.21 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG23 | 4 | 0.21 |
| (7,301) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:196:LEU:HD11 | 6 | 0.21 |
| (7,301) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:196:LEU:HD12 | 6 | 0.21 |
| (7,301) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:196:LEU:HD13 | 6 | 0.21 |
| (7,282) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:113:LEU:HD11 | 11 | 0.21 |
| (7,282) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:113:LEU:HD12 | 11 | 0.21 |
| (7,282) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:113:LEU:HD13 | 11 | 0.21 |
| (7,282) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:113:LEU:HD11 | 11 | 0.21 |
| (7,282) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:113:LEU:HD12 | 11 | 0.21 |
| (7,282) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:113:LEU:HD13 | 11 | 0.21 |
| (7,282) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:113:LEU:HD11 | 11 | 0.21 |
| (7,282) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:113:LEU:HD12 | 11 | 0.21 |
| (7,282) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:113:LEU:HD13 | 11 | 0.21 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:136:ILE:HD11 | 14 | 0.21 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:136:ILE:HD12 | 14 | 0.21 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:136:ILE:HD13 | 14 | 0.21 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:136:ILE:HD11 | 14 | 0.21 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:136:ILE:HD12 | 14 | 0.21 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:136:ILE:HD13 | 14 | 0.21 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:136:ILE:HD11 | 14 | 0.21 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:136:ILE:HD12 | 14 | 0.21 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:136:ILE:HD13 | 14 | 0.21 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD1 | 16 | 0.21 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:188:PHE:HD2 | 16 | 0.21 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD1 | 16 | 0.21 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:188:PHE:HD2 | 16 | 0.21 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD1 | 16 | 0.21 |
| (7,260) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:188:PHE:HD2 | 16 | 0.21 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG11 | 1:A:138:PHE:H | 1 | 0.21 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG12 | 1:A:138:PHE:H | 1 | 0.21 |
| (7,254) | 1:A:105:VAL:HG13 | 1:A:138:PHE:H | 1 | 0.21 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD11 | 1:A:104:THR:HG21 | 3 | 0.21 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD11 | 1:A:104:THR:HG22 | 3 | 0.21 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD11 | 1:A:104:THR:HG23 | 3 | 0.21 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD12 | 1:A:104:THR:HG21 | 3 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD12 | 1:A:104:THR:HG22 | 3 | 0.21 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD12 | 1:A:104:THR:HG23 | 3 | 0.21 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD13 | 1:A:104:THR:HG21 | 3 | 0.21 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD13 | 1:A:104:THR:HG22 | 3 | 0.21 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD13 | 1:A:104:THR:HG23 | 3 | 0.21 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD11 | 1:A:104:THR:HG21 | 5 | 0.21 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD11 | 1:A:104:THR:HG22 | 5 | 0.21 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD11 | 1:A:104:THR:HG23 | 5 | 0.21 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD12 | 1:A:104:THR:HG21 | 5 | 0.21 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD12 | 1:A:104:THR:HG22 | 5 | 0.21 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD12 | 1:A:104:THR:HG23 | 5 | 0.21 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD13 | 1:A:104:THR:HG21 | 5 | 0.21 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD13 | 1:A:104:THR:HG22 | 5 | 0.21 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD13 | 1:A:104:THR:HG23 | 5 | 0.21 |
| (7,229) | 1:A:100:LEU:HD11 | 1:A:105:VAL:HG21 | 16 | 0.21 |
| (7,229) | 1:A:100:LEU:HD11 | 1:A:105:VAL:HG22 | 16 | 0.21 |
| (7,229) | 1:A:100:LEU:HD11 | 1:A:105:VAL:HG23 | 16 | 0.21 |
| (7,229) | 1:A:100:LEU:HD12 | 1:A:105:VAL:HG21 | 16 | 0.21 |
| (7,229) | 1:A:100:LEU:HD12 | 1:A:105:VAL:HG22 | 16 | 0.21 |
| (7,229) | 1:A:100:LEU:HD12 | 1:A:105:VAL:HG23 | 16 | 0.21 |
| (7,229) | 1:A:100:LEU:HD13 | 1:A:105:VAL:HG21 | 16 | 0.21 |
| (7,229) | 1:A:100:LEU:HD13 | 1:A:105:VAL:HG22 | 16 | 0.21 |
| (7,229) | 1:A:100:LEU:HD13 | 1:A:105:VAL:HG23 | 16 | 0.21 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG11 | 15 | 0.21 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG12 | 15 | 0.21 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG13 | 15 | 0.21 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG2 | 13 | 0.21 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG3 | 13 | 0.21 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG2 | 13 | 0.21 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG3 | 13 | 0.21 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG2 | 13 | 0.21 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG3 | 13 | 0.21 |
| (7,159) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:90:THR:H | 10 | 0.21 |
| (7,159) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:90:THR:H | 10 | 0.21 |
| (7,159) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:90:THR:H | 10 | 0.21 |
| (6,1) | 1:A:155:THR:HG1 | 1:A:154:ASN:OD1 | 15 | 0.21 |
| (4,6) | 3:A:302:CA:CA | 1:A:155:THR:O | 6 | 0.21 |
| (4,23) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:194:HIS:NE2 | 1 | 0.21 |
| (4,23) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:194:HIS:NE2 | 5 | 0.21 |
| (4,19) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:204:HIS:NE2 | 1 | 0.21 |
| (4,19) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:204:HIS:NE2 | 5 | 0.21 |
| (4,19) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:204:HIS:NE2 | 7 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (4,19) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:204:HIS:NE2 | 8 | 0.21 |
| (4,12) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:158:HIS:NE2 | 1 | 0.21 |
| (4,12) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:158:HIS:NE2 | 9 | 0.21 |
| (4,1) | 3:A:301:CA:CA | 1:A:167:GLY:O | 9 | 0.21 |
| (1,981) | 1:A:136:ILE:HG21 | 1:A:170:ALA:H | 3 | 0.21 |
| (1,981) | 1:A:136:ILE:HG22 | 1:A:170:ALA:H | 3 | 0.21 |
| (1,981) | 1:A:136:ILE:HG23 | 1:A:170:ALA:H | 3 | 0.21 |
| (1,970) | 1:A:136:ILE:H | 1:A:137:GLY:H | 16 | 0.21 |
| (1,920) | 1:A:129:TRP:HB2 | 1:A:130:GLY:H | 1 | 0.21 |
| (1,920) | 1:A:129:TRP:HB3 | 1:A:130:GLY:H | 1 | 0.21 |
| (1,915) | 1:A:128:VAL:HB | 1:A:129:TRP:HD1 | 13 | 0.21 |
| (1,915) | 1:A:128:VAL:HB | 1:A:129:TRP:HD1 | 15 | 0.21 |
| (1,87) | 1:A:21:ARG:H | 1:A:22:PHE:HB2 | 6 | 0.21 |
| (1,87) | 1:A:21:ARG:H | 1:A:22:PHE:HB3 | 6 | 0.21 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:238:TYR:HB2 | 2 | 0.21 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:238:TYR:HB3 | 2 | 0.21 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:238:TYR:HB2 | 2 | 0.21 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:238:TYR:HB3 | 2 | 0.21 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:238:TYR:HB2 | 2 | 0.21 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:238:TYR:HB3 | 2 | 0.21 |
| (1,801) | 1:A:116:TRP:HE1 | 1:A:198:HIS:H | 9 | 0.21 |
| (1,780) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HA | 14 | 0.21 |
| (1,780) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HA | 14 | 0.21 |
| (1,780) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HA | 14 | 0.21 |
| (1,777) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:224:PHE:HB2 | 2 | 0.21 |
| (1,777) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:224:PHE:HB3 | 2 | 0.21 |
| (1,777) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:224:PHE:HB2 | 2 | 0.21 |
| (1,777) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:224:PHE:HB3 | 2 | 0.21 |
| (1,777) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:224:PHE:HB2 | 2 | 0.21 |
| (1,777) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:224:PHE:HB3 | 2 | 0.21 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB1 | 1 | 0.21 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB2 | 1 | 0.21 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB3 | 1 | 0.21 |
| (1,721) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:188:PHE:HE1 | 7 | 0.21 |
| (1,721) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:188:PHE:HE2 | 7 | 0.21 |
| (1,721) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:188:PHE:HE1 | 14 | 0.21 |
| (1,721) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:188:PHE:HE2 | 14 | 0.21 |
| (1,711) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:110:SER:H | 4 | 0.21 |
| (1,711) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:110:SER:H | 12 | 0.21 |
| (1,711) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:110:SER:H | 15 | 0.21 |
| (1,693) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:107:ARG:H | 8 | 0.21 |
| (1,693) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:107:ARG:H | 15 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,670) | 1:A:103:ILE:HD11 | 1:A:104:THR:H | 7 | 0.21 |
| (1,670) | 1:A:103:ILE:HD12 | 1:A:104:THR:H | 7 | 0.21 |
| (1,670) | 1:A:103:ILE:HD13 | 1:A:104:THR:H | 7 | 0.21 |
| (1,670) | 1:A:103:ILE:HD11 | 1:A:104:THR:H | 13 | 0.21 |
| (1,670) | 1:A:103:ILE:HD12 | 1:A:104:THR:H | 13 | 0.21 |
| (1,670) | 1:A:103:ILE:HD13 | 1:A:104:THR:H | 13 | 0.21 |
| (1,61) | 1:A:18:TYR:HB3 | 1:A:20:LYS:H | 4 | 0.21 |
| (1,568) | 1:A:92:ARG:HE | 1:A:127:VAL:HB | 2 | 0.21 |
| (1,544) | 1:A:92:ARG:H | 1:A:136:ILE:H | 13 | 0.21 |
| (1,451) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:234:ILE:HG13 | 1 | 0.21 |
| (1,451) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:234:ILE:HG13 | 1 | 0.21 |
| (1,451) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:234:ILE:HG13 | 2 | 0.21 |
| (1,451) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:234:ILE:HG13 | 2 | 0.21 |
| (1,443) | 1:A:82:PRO:HD2 | 1:A:83:LYS:HG2 | 8 | 0.21 |
| (1,443) | 1:A:82:PRO:HD2 | 1:A:83:LYS:HG3 | 8 | 0.21 |
| (1,416) | 1:A:72:VAL:H | 1:A:73:ALA:HB1 | 10 | 0.21 |
| (1,416) | 1:A:72:VAL:H | 1:A:73:ALA:HB2 | 10 | 0.21 |
| (1,416) | 1:A:72:VAL:H | 1:A:73:ALA:HB3 | 10 | 0.21 |
| (1,35) | 1:A:15:ALA:HA | 1:A:19:LEU:H | 14 | 0.21 |
| (1,33) | 1:A:15:ALA:H | 1:A:59:ILE:HD11 | 16 | 0.21 |
| (1,33) | 1:A:15:ALA:H | 1:A:59:ILE:HD12 | 16 | 0.21 |
| (1,33) | 1:A:15:ALA:H | 1:A:59:ILE:HD13 | 16 | 0.21 |
| (1,292) | 1:A:55:ASN:H | 1:A:58:VAL:H | 3 | 0.21 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG21 | 1:A:53:MET:HB2 | 9 | 0.21 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG21 | 1:A:53:MET:HB3 | 9 | 0.21 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG22 | 1:A:53:MET:HB2 | 9 | 0.21 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG22 | 1:A:53:MET:HB3 | 9 | 0.21 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG23 | 1:A:53:MET:HB2 | 9 | 0.21 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG23 | 1:A:53:MET:HB3 | 9 | 0.21 |
| (1,277) | 1:A:50:ILE:H | 1:A:51:THR:H | 2 | 0.21 |
| (1,277) | 1:A:50:ILE:H | 1:A:51:THR:H | 5 | 0.21 |
| (1,277) | 1:A:50:ILE:H | 1:A:51:THR:H | 10 | 0.21 |
| (1,272) | 1:A:49:PRO:HG2 | 1:A:50:ILE:HA | 9 | 0.21 |
| (1,22) | 1:A:13:GLU:H | 1:A:15:ALA:H | 12 | 0.21 |
| (1,166) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:41:GLU:HG2 | 12 | 0.21 |
| (1,156) | 1:A:38:LYS:HA | 1:A:41:GLU:HG3 | 11 | 0.21 |
| (1,1477) | 1:A:237:LEU:H | 1:A:238:TYR:HD1 | 6 | 0.21 |
| (1,1477) | 1:A:237:LEU:H | 1:A:238:TYR:HD2 | 6 | 0.21 |
| (1,1440) | 1:A:233:GLY:HA2 | 1:A:235:GLN:H | 9 | 0.21 |
| (1,1413) | 1:A:231:ILE:H | 1:A:232:LYS:HB3 | 14 | 0.21 |
| (1,1360) | 1:A:211:VAL:H | 1:A:213:TYR:H | 1 | 0.21 |
| (1,1360) | 1:A:211:VAL:H | 1:A:213:TYR:H | 12 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1347) | 1:A:209:ASN:HD21 | 1:A:210:ALA:HB1 | 6 | 0.21 |
| (1,1347) | 1:A:209:ASN:HD21 | 1:A:210:ALA:HB2 | 6 | 0.21 |
| (1,1347) | 1:A:209:ASN:HD21 | 1:A:210:ALA:HB3 | 6 | 0.21 |
| (1,1347) | 1:A:209:ASN:HD22 | 1:A:210:ALA:HB1 | 6 | 0.21 |
| (1,1347) | 1:A:209:ASN:HD22 | 1:A:210:ALA:HB2 | 6 | 0.21 |
| (1,1347) | 1:A:209:ASN:HD22 | 1:A:210:ALA:HB3 | 6 | 0.21 |
| (1,1311) | 1:A:202:MET:HA | 1:A:234:ILE:HD11 | 8 | 0.21 |
| (1,1311) | 1:A:202:MET:HA | 1:A:234:ILE:HD12 | 8 | 0.21 |
| (1,1311) | 1:A:202:MET:HA | 1:A:234:ILE:HD13 | 8 | 0.21 |
| (1,1291) | 1:A:198:HIS:HE1 | 1:A:204:HIS:HA | 10 | 0.21 |
| (1,1208) | 1:A:179:THR:HB | 1:A:185:GLY:H | 6 | 0.21 |
| (1,1198) | 1:A:178:TRP:HZ2 | 1:A:186:ILE:HB | 16 | 0.21 |
| (1,1100) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:198:HIS:HB2 | 8 | 0.21 |
| (1,11) | 1:A:10:LEU:H | 1:A:13:GLU:H | 10 | 0.21 |
| (1,1097) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:168:GLY:HA2 | 6 | 0.21 |
| (1,105) | 1:A:25:TYR:H | 1:A:25:TYR:HD1 | 15 | 0.21 |
| (1,105) | 1:A:25:TYR:H | 1:A:25:TYR:HD2 | 15 | 0.21 |
| (1,1027) | 1:A:147:TYR:H | 1:A:147:TYR:HD1 | 13 | 0.21 |
| (1,1027) | 1:A:147:TYR:H | 1:A:147:TYR:HD2 | 13 | 0.21 |
| (1,1024) | 1:A:143:HIS:HE1 | 1:A:160:PHE:HE1 | 14 | 0.21 |
| (1,1024) | 1:A:143:HIS:HE1 | 1:A:160:PHE:HE2 | 14 | 0.21 |
| (1,1020) | 1:A:142:ALA:HB1 | 1:A:145:ASP:H | 12 | 0.21 |
| (1,1020) | 1:A:142:ALA:HB2 | 1:A:145:ASP:H | 12 | 0.21 |
| (1,1020) | 1:A:142:ALA:HB3 | 1:A:145:ASP:H | 12 | 0.21 |
| (1,1015) | 1:A:140:ARG:HG2 | 1:A:149:PHE:HB3 | 14 | 0.21 |
| (1,1015) | 1:A:140:ARG:HG3 | 1:A:149:PHE:HB3 | 14 | 0.21 |
| (1,1015) | 1:A:140:ARG:HG2 | 1:A:149:PHE:HB3 | 14 | 0.21 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HD11 | 8 | 0.2 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HD12 | 8 | 0.2 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HD13 | 8 | 0.2 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HD11 | 8 | 0.2 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HD12 | 8 | 0.2 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HD13 | 8 | 0.2 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HD11 | 8 | 0.2 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HD12 | 8 | 0.2 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HD13 | 8 | 0.2 |
| (7,450) | 1:A:226:LEU:HD11 | 1:A:231:ILE:HG12 | 3 | 0.2 |
| (7,450) | 1:A:226:LEU:HD11 | 1:A:231:ILE:HG13 | 3 | 0.2 |
| (7,450) | 1:A:226:LEU:HD12 | 1:A:231:ILE:HG12 | 3 | 0.2 |
| (7,450) | 1:A:226:LEU:HD12 | 1:A:231:ILE:HG13 | 3 | 0.2 |
| (7,450) | 1:A:226:LEU:HD13 | 1:A:231:ILE:HG12 | 3 | 0.2 |
| (7,450) | 1:A:226:LEU:HD13 | 1:A:231:ILE:HG13 | 3 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,433) | 1:A:200:LEU:HD11 | 1:A:201:GLY:H | 6 | 0.2 |
| (7,433) | 1:A:200:LEU:HD12 | 1:A:201:GLY:H | 6 | 0.2 |
| (7,433) | 1:A:200:LEU:HD13 | 1:A:201:GLY:H | 6 | 0.2 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD11 | 1:A:104:THR:HG21 | 7 | 0.2 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD11 | 1:A:104:THR:HG22 | 7 | 0.2 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD11 | 1:A:104:THR:HG23 | 7 | 0.2 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD12 | 1:A:104:THR:HG21 | 7 | 0.2 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD12 | 1:A:104:THR:HG22 | 7 | 0.2 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD12 | 1:A:104:THR:HG23 | 7 | 0.2 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD13 | 1:A:104:THR:HG21 | 7 | 0.2 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD13 | 1:A:104:THR:HG22 | 7 | 0.2 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD13 | 1:A:104:THR:HG23 | 7 | 0.2 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG21 | 6 | 0.2 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG22 | 6 | 0.2 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG23 | 6 | 0.2 |
| (7,166) | 1:A:89:VAL:HG11 | 1:A:124:PHE:HE1 | 14 | 0.2 |
| (7,166) | 1:A:89:VAL:HG11 | 1:A:124:PHE:HE2 | 14 | 0.2 |
| (7,166) | 1:A:89:VAL:HG12 | 1:A:124:PHE:HE1 | 14 | 0.2 |
| (7,166) | 1:A:89:VAL:HG12 | 1:A:124:PHE:HE2 | 14 | 0.2 |
| (7,166) | 1:A:89:VAL:HG13 | 1:A:124:PHE:HE1 | 14 | 0.2 |
| (7,166) | 1:A:89:VAL:HG13 | 1:A:124:PHE:HE2 | 14 | 0.2 |
| (7,109) | 1:A:84:TRP:HD1 | 1:A:200:LEU:HD21 | 16 | 0.2 |
| (7,109) | 1:A:84:TRP:HD1 | 1:A:200:LEU:HD22 | 16 | 0.2 |
| (7,109) | 1:A:84:TRP:HD1 | 1:A:200:LEU:HD23 | 16 | 0.2 |
| (6,1) | 1:A:155:THR:HG1 | 1:A:154:ASN:OD1 | 14 | 0.2 |
| (4,23) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:194:HIS:NE2 | 3 | 0.2 |
| (4,21) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:198:HIS:NE2 | 3 | 0.2 |
| (4,21) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:198:HIS:NE2 | 4 | 0.2 |
| (4,21) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:198:HIS:NE2 | 16 | 0.2 |
| (4,19) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:204:HIS:NE2 | 2 | 0.2 |
| (4,19) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:204:HIS:NE2 | 4 | 0.2 |
| (4,19) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:204:HIS:NE2 | 9 | 0.2 |
| (4,19) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:204:HIS:NE2 | 10 | 0.2 |
| (4,19) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:204:HIS:NE2 | 11 | 0.2 |
| (4,19) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:204:HIS:NE2 | 12 | 0.2 |
| (4,19) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:204:HIS:NE2 | 14 | 0.2 |
| (4,19) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:204:HIS:NE2 | 16 | 0.2 |
| (4,17) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:143:HIS:NE2 | 4 | 0.2 |
| (4,17) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:143:HIS:NE2 | 11 | 0.2 |
| (4,17) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:143:HIS:NE2 | 12 | 0.2 |
| (4,12) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:158:HIS:NE2 | 2 | 0.2 |
| (4,12) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:158:HIS:NE2 | 3 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (4,12) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:158:HIS:NE2 | 4 | 0.2 |
| (4,12) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:158:HIS:NE2 | 5 | 0.2 |
| (4,12) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:158:HIS:NE2 | 7 | 0.2 |
| (4,12) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:158:HIS:NE2 | 8 | 0.2 |
| (4,12) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:158:HIS:NE2 | 10 | 0.2 |
| (4,12) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:158:HIS:NE2 | 11 | 0.2 |
| (4,12) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:158:HIS:NE2 | 12 | 0.2 |
| (4,12) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:158:HIS:NE2 | 14 | 0.2 |
| (4,1) | 3:A:301:CA:CA | 1:A:167:GLY:O | 4 | 0.2 |
| (4,1) | 3:A:301:CA:CA | 1:A:167:GLY:O | 7 | 0.2 |
| (4,1) | 3:A:301:CA:CA | 1:A:167:GLY:O | 8 | 0.2 |
| (4,1) | 3:A:301:CA:CA | 1:A:167:GLY:O | 10 | 0.2 |
| (4,1) | 3:A:301:CA:CA | 1:A:167:GLY:O | 11 | 0.2 |
| (4,1) | 3:A:301:CA:CA | 1:A:167:GLY:O | 12 | 0.2 |
| (4,1) | 3:A:301:CA:CA | 1:A:167:GLY:O | 13 | 0.2 |
| (4,1) | 3:A:301:CA:CA | 1:A:167:GLY:O | 14 | 0.2 |
| (4,1) | 3:A:301:CA:CA | 1:A:167:GLY:O | 15 | 0.2 |
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:188:PHE:HE1 | 4 | 0.2 |
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:188:PHE:HE2 | 4 | 0.2 |
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:188:PHE:HE1 | 4 | 0.2 |
| (1,997) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:188:PHE:HE2 | 4 | 0.2 |
| (1,996) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:178:TRP:HE1 | 5 | 0.2 |
| (1,996) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:178:TRP:HE1 | 5 | 0.2 |
| (1,994) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:139:ALA:H | 8 | 0.2 |
| (1,994) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:139:ALA:H | 8 | 0.2 |
| (1,981) | 1:A:136:ILE:HG21 | 1:A:170:ALA:H | 2 | 0.2 |
| (1,981) | 1:A:136:ILE:HG22 | 1:A:170:ALA:H | 2 | 0.2 |
| (1,981) | 1:A:136:ILE:HG23 | 1:A:170:ALA:H | 2 | 0.2 |
| (1,920) | 1:A:129:TRP:HB2 | 1:A:130:GLY:H | 9 | 0.2 |
| (1,920) | 1:A:129:TRP:HB3 | 1:A:130:GLY:H | 9 | 0.2 |
| (1,920) | 1:A:129:TRP:HB2 | 1:A:130:GLY:H | 12 | 0.2 |
| (1,920) | 1:A:129:TRP:HB3 | 1:A:130:GLY:H | 12 | 0.2 |
| (1,757) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:115:MET:HB2 | 8 | 0.2 |
| (1,757) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:115:MET:HB2 | 10 | 0.2 |
| (1,755) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:114:ASN:H | 6 | 0.2 |
| (1,755) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:114:ASN:H | 8 | 0.2 |
| (1,755) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:114:ASN:H | 11 | 0.2 |
| (1,75) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:22:PHE:H | 7 | 0.2 |
| (1,75) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:22:PHE:H | 14 | 0.2 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB1 | 6 | 0.2 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB2 | 6 | 0.2 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB3 | 6 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB1 | 7 | 0.2 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB2 | 7 | 0.2 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB3 | 7 | 0.2 |
| (1,730) | 1:A:110:SER:H | 1:A:112:ALA:H | 6 | 0.2 |
| (1,711) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:110:SER:H | 9 | 0.2 |
| (1,711) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:110:SER:H | 13 | 0.2 |
| (1,633) | 1:A:98:ARG:HA | 1:A:100:LEU:H | 15 | 0.2 |
| (1,610) | 1:A:96:TYR:HB2 | 1:A:102:HIS:HD2 | 7 | 0.2 |
| (1,610) | 1:A:96:TYR:HB2 | 1:A:102:HIS:HD2 | 14 | 0.2 |
| (1,485) | 1:A:89:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB2 | 8 | 0.2 |
| (1,485) | 1:A:89:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB3 | 8 | 0.2 |
| (1,470) | 1:A:84:TRP:HZ2 | 1:A:168:GLY:HA2 | 10 | 0.2 |
| (1,443) | 1:A:82:PRO:HD2 | 1:A:83:LYS:HG2 | 13 | 0.2 |
| (1,443) | 1:A:82:PRO:HD2 | 1:A:83:LYS:HG3 | 13 | 0.2 |
| (1,406) | 1:A:69:VAL:H | 1:A:159:ALA:H | 7 | 0.2 |
| (1,406) | 1:A:69:VAL:H | 1:A:159:ALA:H | 7 | 0.2 |
| (1,406) | 1:A:69:VAL:H | 1:A:159:ALA:H | 12 | 0.2 |
| (1,406) | 1:A:69:VAL:H | 1:A:159:ALA:H | 12 | 0.2 |
| (1,402) | 1:A:68:GLY:H | 1:A:198:HIS:HD2 | 12 | 0.2 |
| (1,384) | 1:A:67:CYS:HA | 1:A:69:VAL:H | 12 | 0.2 |
| (1,344) | 1:A:61:ILE:H | 1:A:63:GLN:HG2 | 5 | 0.2 |
| (1,344) | 1:A:61:ILE:H | 1:A:63:GLN:HG3 | 5 | 0.2 |
| (1,344) | 1:A:61:ILE:H | 1:A:63:GLN:HG2 | 15 | 0.2 |
| (1,344) | 1:A:61:ILE:H | 1:A:63:GLN:HG3 | 15 | 0.2 |
| (1,32) | 1:A:15:ALA:H | 1:A:17:ASP:H | 13 | 0.2 |
| (1,309) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:58:VAL:H | 6 | 0.2 |
| (1,309) | 1:A:57:ARG:HG3 | 1:A:58:VAL:H | 6 | 0.2 |
| (1,309) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:58:VAL:H | 13 | 0.2 |
| (1,309) | 1:A:57:ARG:HG3 | 1:A:58:VAL:H | 13 | 0.2 |
| (1,296) | 1:A:56:SER:H | 1:A:58:VAL:HB | 1 | 0.2 |
| (1,292) | 1:A:55:ASN:H | 1:A:58:VAL:H | 13 | 0.2 |
| (1,278) | 1:A:50:ILE:H | 1:A:51:THR:HG21 | 1 | 0.2 |
| (1,278) | 1:A:50:ILE:H | 1:A:51:THR:HG22 | 1 | 0.2 |
| (1,278) | 1:A:50:ILE:H | 1:A:51:THR:HG23 | 1 | 0.2 |
| (1,277) | 1:A:50:ILE:H | 1:A:51:THR:H | 15 | 0.2 |
| (1,27) | 1:A:14:GLN:H | 1:A:16:GLN:H | 13 | 0.2 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE1 | 1:A:43:GLN:HG2 | 8 | 0.2 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE1 | 1:A:43:GLN:HG3 | 8 | 0.2 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE2 | 1:A:43:GLN:HG2 | 8 | 0.2 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE2 | 1:A:43:GLN:HG3 | 8 | 0.2 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE3 | 1:A:43:GLN:HG2 | 8 | 0.2 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE3 | 1:A:43:GLN:HG3 | 8 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,168) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:52:GLY:H | 10 | 0.2 |
| (1,1485) | 1:A:237:LEU:HG | 1:A:238:TYR:H | 5 | 0.2 |
| (1,1482) | 1:A:237:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HD1 | 5 | 0.2 |
| (1,1482) | 1:A:237:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HD2 | 5 | 0.2 |
| (1,145) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:39:LEU:H | 14 | 0.2 |
| (1,1413) | 1:A:231:ILE:H | 1:A:232:LYS:HB3 | 7 | 0.2 |
| (1,1364) | 1:A:212:MET:H | 1:A:213:TYR:H | 13 | 0.2 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:228:GLN:H | 16 | 0.2 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:228:GLN:H | 16 | 0.2 |
| (1,1355) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:228:GLN:H | 16 | 0.2 |
| (1,1330) | 1:A:205:SER:H | 1:A:212:MET:H | 9 | 0.2 |
| (1,1295) | 1:A:199:SER:H | 1:A:201:GLY:H | 12 | 0.2 |
| (1,1208) | 1:A:179:THR:HB | 1:A:185:GLY:H | 3 | 0.2 |
| (1,1198) | 1:A:178:TRP:HZ2 | 1:A:186:ILE:HB | 5 | 0.2 |
| (1,1198) | 1:A:178:TRP:HZ2 | 1:A:186:ILE:HB | 13 | 0.2 |
| (1,1193) | 1:A:178:TRP:HE3 | 1:A:188:PHE:H | 6 | 0.2 |
| (1,1145) | 1:A:172:PHE:HB2 | 1:A:173:ASP:H | 3 | 0.2 |
| (1,1145) | 1:A:172:PHE:HB3 | 1:A:173:ASP:H | 3 | 0.2 |
| (1,1125) | 1:A:165:GLY:H | 1:A:167:GLY:H | 3 | 0.2 |
| (1,1125) | 1:A:165:GLY:H | 1:A:167:GLY:H | 5 | 0.2 |
| (1,1100) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:198:HIS:HB2 | 10 | 0.2 |
| (1,11) | 1:A:10:LEU:H | 1:A:13:GLU:H | 12 | 0.2 |
| (1,108) | 1:A:25:TYR:HB3 | 1:A:26:ASP:HA | 5 | 0.2 |
| (1,1058) | 1:A:156:LEU:HB2 | 1:A:178:TRP:HH2 | 2 | 0.2 |
| (1,1058) | 1:A:156:LEU:HB3 | 1:A:178:TRP:HH2 | 2 | 0.2 |
| (1,1045) | 1:A:155:THR:H | 1:A:22:PHE:HZ | 10 | 0.2 |
| (1,1037) | 1:A:149:PHE:HB3 | 1:A:150:ASP:H | 3 | 0.2 |
| (8,2) | 1:A:35:LEU:H | 1:A:39:LEU:HD21 | 7 | 0.19 |
| (8,2) | 1:A:35:LEU:H | 1:A:39:LEU:HD22 | 7 | 0.19 |
| (8,2) | 1:A:35:LEU:H | 1:A:39:LEU:HD23 | 7 | 0.19 |
| (7,65) | 1:A:56:SER:H | 1:A:58:VAL:HG21 | 2 | 0.19 |
| (7,65) | 1:A:56:SER:H | 1:A:58:VAL:HG22 | 2 | 0.19 |
| (7,65) | 1:A:56:SER:H | 1:A:58:VAL:HG23 | 2 | 0.19 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD11 | 1:A:58:VAL:HB | 11 | 0.19 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD12 | 1:A:58:VAL:HB | 11 | 0.19 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD13 | 1:A:58:VAL:HB | 11 | 0.19 |
| (7,417) | 1:A:194:HIS:H | 1:A:211:VAL:HG11 | 1 | 0.19 |
| (7,417) | 1:A:194:HIS:H | 1:A:211:VAL:HG12 | 1 | 0.19 |
| (7,417) | 1:A:194:HIS:H | 1:A:211:VAL:HG13 | 1 | 0.19 |
| (7,417) | 1:A:194:HIS:H | 1:A:211:VAL:HG11 | 10 | 0.19 |
| (7,417) | 1:A:194:HIS:H | 1:A:211:VAL:HG12 | 10 | 0.19 |
| (7,417) | 1:A:194:HIS:H | 1:A:211:VAL:HG13 | 10 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,373) | 1:A:128:VAL:HA | 1:A:127:VAL:HG21 | 3 | 0.19 |
| (7,373) | 1:A:128:VAL:HA | 1:A:127:VAL:HG22 | 3 | 0.19 |
| (7,373) | 1:A:128:VAL:HA | 1:A:127:VAL:HG23 | 3 | 0.19 |
| (7,373) | 1:A:128:VAL:HA | 1:A:127:VAL:HG21 | 10 | 0.19 |
| (7,373) | 1:A:128:VAL:HA | 1:A:127:VAL:HG22 | 10 | 0.19 |
| (7,373) | 1:A:128:VAL:HA | 1:A:127:VAL:HG23 | 10 | 0.19 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG21 | 12 | 0.19 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG22 | 12 | 0.19 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG23 | 12 | 0.19 |
| (7,3) | 1:A:12:TRP:HH2 | 1:A:39:LEU:HD11 | 16 | 0.19 |
| (7,3) | 1:A:12:TRP:HH2 | 1:A:39:LEU:HD12 | 16 | 0.19 |
| (7,3) | 1:A:12:TRP:HH2 | 1:A:39:LEU:HD13 | 16 | 0.19 |
| (7,241) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG11 | 9 | 0.19 |
| (7,241) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG12 | 9 | 0.19 |
| (7,241) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG13 | 9 | 0.19 |
| (7,241) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG11 | 12 | 0.19 |
| (7,241) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG12 | 12 | 0.19 |
| (7,241) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG13 | 12 | 0.19 |
| (7,241) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG11 | 14 | 0.19 |
| (7,241) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG12 | 14 | 0.19 |
| (7,241) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG13 | 14 | 0.19 |
| (7,238) | 1:A:100:LEU:HD21 | 1:A:188:PHE:H | 16 | 0.19 |
| (7,238) | 1:A:100:LEU:HD22 | 1:A:188:PHE:H | 16 | 0.19 |
| (7,238) | 1:A:100:LEU:HD23 | 1:A:188:PHE:H | 16 | 0.19 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG11 | 1 | 0.19 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG12 | 1 | 0.19 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG13 | 1 | 0.19 |
| (7,2) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:54:LEU:HD21 | 13 | 0.19 |
| (7,2) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:54:LEU:HD22 | 13 | 0.19 |
| (7,2) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:54:LEU:HD23 | 13 | 0.19 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG11 | 1:A:124:PHE:HE1 | 16 | 0.19 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG11 | 1:A:124:PHE:HE2 | 16 | 0.19 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG12 | 1:A:124:PHE:HE1 | 16 | 0.19 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG12 | 1:A:124:PHE:HE2 | 16 | 0.19 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG13 | 1:A:124:PHE:HE1 | 16 | 0.19 |
| (7,163) | 1:A:89:VAL:HG13 | 1:A:124:PHE:HE2 | 16 | 0.19 |
| (7,159) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:90:THR:H | 1 | 0.19 |
| (7,159) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:90:THR:H | 1 | 0.19 |
| (7,159) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:90:THR:H | 1 | 0.19 |
| (6,3) | 1:A:84:TRP:O | 1:A:238:TYR:HH | 10 | 0.19 |
| (4,23) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:194:HIS:NE2 | 11 | 0.19 |
| (4,23) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:194:HIS:NE2 | 13 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (4,23) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:194:HIS:NE2 | 15 | 0.19 |
| (4,21) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:198:HIS:NE2 | 11 | 0.19 |
| (4,21) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:198:HIS:NE2 | 13 | 0.19 |
| (4,21) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:198:HIS:NE2 | 14 | 0.19 |
| (4,19) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:204:HIS:NE2 | 13 | 0.19 |
| (4,17) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:143:HIS:NE2 | 1 | 0.19 |
| (4,17) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:143:HIS:NE2 | 2 | 0.19 |
| (4,17) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:143:HIS:NE2 | 3 | 0.19 |
| (4,17) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:143:HIS:NE2 | 5 | 0.19 |
| (4,17) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:143:HIS:NE2 | 7 | 0.19 |
| (4,17) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:143:HIS:NE2 | 9 | 0.19 |
| (4,17) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:143:HIS:NE2 | 10 | 0.19 |
| (4,17) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:143:HIS:NE2 | 13 | 0.19 |
| (4,17) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:143:HIS:NE2 | 15 | 0.19 |
| (4,12) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:158:HIS:NE2 | 13 | 0.19 |
| (4,12) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:158:HIS:NE2 | 15 | 0.19 |
| (4,12) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:158:HIS:NE2 | 16 | 0.19 |
| (4,1) | 3:A:301:CA:CA | 1:A:167:GLY:O | 1 | 0.19 |
| (4,1) | 3:A:301:CA:CA | 1:A:167:GLY:O | 2 | 0.19 |
| (4,1) | 3:A:301:CA:CA | 1:A:167:GLY:O | 5 | 0.19 |
| (4,1) | 3:A:301:CA:CA | 1:A:167:GLY:O | 16 | 0.19 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD11 | 1:A:137:GLY:H | 9 | 0.19 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD12 | 1:A:137:GLY:H | 9 | 0.19 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD13 | 1:A:137:GLY:H | 9 | 0.19 |
| (1,924) | 1:A:129:TRP:HB3 | 1:A:130:GLY:H | 9 | 0.19 |
| (1,887) | 1:A:124:PHE:H | 1:A:124:PHE:HD1 | 9 | 0.19 |
| (1,887) | 1:A:124:PHE:H | 1:A:124:PHE:HD2 | 9 | 0.19 |
| (1,87) | 1:A:21:ARG:H | 1:A:22:PHE:HB2 | 1 | 0.19 |
| (1,87) | 1:A:21:ARG:H | 1:A:22:PHE:HB3 | 1 | 0.19 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:238:TYR:HB2 | 11 | 0.19 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:238:TYR:HB3 | 11 | 0.19 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:238:TYR:HB2 | 11 | 0.19 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:238:TYR:HB3 | 11 | 0.19 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:238:TYR:HB2 | 11 | 0.19 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:238:TYR:HB3 | 11 | 0.19 |
| (1,818) | 1:A:117:GLY:HA2 | 1:A:120:ILE:HG21 | 16 | 0.19 |
| (1,818) | 1:A:117:GLY:HA2 | 1:A:120:ILE:HG22 | 16 | 0.19 |
| (1,818) | 1:A:117:GLY:HA2 | 1:A:120:ILE:HG23 | 16 | 0.19 |
| (1,818) | 1:A:117:GLY:HA2 | 1:A:120:ILE:HG21 | 16 | 0.19 |
| (1,818) | 1:A:117:GLY:HA2 | 1:A:120:ILE:HG22 | 16 | 0.19 |
| (1,818) | 1:A:117:GLY:HA2 | 1:A:120:ILE:HG23 | 16 | 0.19 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HB2 | 16 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HB3 | 16 | 0.19 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HB2 | 16 | 0.19 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HB3 | 16 | 0.19 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HB2 | 16 | 0.19 |
| (1,781) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HB3 | 16 | 0.19 |
| (1,721) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:188:PHE:HE1 | 8 | 0.19 |
| (1,721) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:188:PHE:HE2 | 8 | 0.19 |
| (1,711) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:110:SER:H | 6 | 0.19 |
| (1,711) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:110:SER:H | 10 | 0.19 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG21 | 1:A:188:PHE:HD1 | 16 | 0.19 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG21 | 1:A:188:PHE:HD2 | 16 | 0.19 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG22 | 1:A:188:PHE:HD1 | 16 | 0.19 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG22 | 1:A:188:PHE:HD2 | 16 | 0.19 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG23 | 1:A:188:PHE:HD1 | 16 | 0.19 |
| (1,689) | 1:A:104:THR:HG23 | 1:A:188:PHE:HD2 | 16 | 0.19 |
| (1,670) | 1:A:103:ILE:HD11 | 1:A:104:THR:H | 5 | 0.19 |
| (1,670) | 1:A:103:ILE:HD12 | 1:A:104:THR:H | 5 | 0.19 |
| (1,670) | 1:A:103:ILE:HD13 | 1:A:104:THR:H | 5 | 0.19 |
| (1,631) | 1:A:98:ARG:H | 1:A:100:LEU:H | 16 | 0.19 |
| (1,545) | 1:A:92:ARG:H | 1:A:136:ILE:HD11 | 11 | 0.19 |
| (1,545) | 1:A:92:ARG:H | 1:A:136:ILE:HD12 | 11 | 0.19 |
| (1,545) | 1:A:92:ARG:H | 1:A:136:ILE:HD13 | 11 | 0.19 |
| (1,519) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:134:ILE:HG21 | 10 | 0.19 |
| (1,519) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:134:ILE:HG22 | 10 | 0.19 |
| (1,519) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:134:ILE:HG23 | 10 | 0.19 |
| (1,514) | 1:A:91:TYR:H | 1:A:126:LYS:HA | 5 | 0.19 |
| (1,499) | 1:A:90:THR:H | 1:A:134:ILE:H | 13 | 0.19 |
| (1,47) | 1:A:16:GLN:HG2 | 1:A:17:ASP:H | 16 | 0.19 |
| (1,47) | 1:A:16:GLN:HG3 | 1:A:17:ASP:H | 16 | 0.19 |
| (1,468) | 1:A:84:TRP:HE1 | 1:A:200:LEU:H | 11 | 0.19 |
| (1,451) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:234:ILE:HG13 | 6 | 0.19 |
| (1,451) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:234:ILE:HG13 | 6 | 0.19 |
| (1,443) | 1:A:82:PRO:HD2 | 1:A:83:LYS:HG2 | 12 | 0.19 |
| (1,443) | 1:A:82:PRO:HD2 | 1:A:83:LYS:HG3 | 12 | 0.19 |
| (1,384) | 1:A:67:CYS:HA | 1:A:69:VAL:H | 13 | 0.19 |
| (1,344) | 1:A:61:ILE:H | 1:A:63:GLN:HG2 | 4 | 0.19 |
| (1,344) | 1:A:61:ILE:H | 1:A:63:GLN:HG3 | 4 | 0.19 |
| (1,305) | 1:A:57:ARG:HA | 1:A:57:ARG:HD2 | 10 | 0.19 |
| (1,305) | 1:A:57:ARG:HA | 1:A:57:ARG:HD3 | 10 | 0.19 |
| (1,292) | 1:A:55:ASN:H | 1:A:58:VAL:H | 15 | 0.19 |
| (1,277) | 1:A:50:ILE:H | 1:A:51:THR:H | 16 | 0.19 |
| (1,27) | 1:A:14:GLN:H | 1:A:16:GLN:H | 1 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,169) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:52:GLY:HA2 | 1 | 0.19 |
| (1,168) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:52:GLY:H | 4 | 0.19 |
| (1,1485) | 1:A:237:LEU:HG | 1:A:238:TYR:H | 11 | 0.19 |
| (1,1477) | 1:A:237:LEU:H | 1:A:238:TYR:HD1 | 1 | 0.19 |
| (1,1477) | 1:A:237:LEU:H | 1:A:238:TYR:HD2 | 1 | 0.19 |
| (1,145) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:39:LEU:H | 3 | 0.19 |
| (1,1440) | 1:A:233:GLY:HA2 | 1:A:235:GLN:H | 15 | 0.19 |
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:230:ASP:HA | 1 | 0.19 |
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:230:ASP:HA | 1 | 0.19 |
| (1,1356) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:230:ASP:HA | 1 | 0.19 |
| (1,1222) | 1:A:184:LEU:HA | 1:A:185:GLY:H | 1 | 0.19 |
| (1,1222) | 1:A:184:LEU:HA | 1:A:185:GLY:H | 10 | 0.19 |
| (1,1222) | 1:A:184:LEU:HA | 1:A:185:GLY:H | 11 | 0.19 |
| (1,1222) | 1:A:184:LEU:HA | 1:A:185:GLY:H | 14 | 0.19 |
| (1,1125) | 1:A:165:GLY:H | 1:A:167:GLY:H | 1 | 0.19 |
| (1,110) | 1:A:25:TYR:HD1 | 1:A:26:ASP:HA | 13 | 0.19 |
| (1,110) | 1:A:25:TYR:HD2 | 1:A:26:ASP:HA | 13 | 0.19 |
| (1,11) | 1:A:10:LEU:H | 1:A:13:GLU:H | 9 | 0.19 |
| (1,108) | 1:A:25:TYR:HB3 | 1:A:26:ASP:HA | 4 | 0.19 |
| (1,1050) | 1:A:155:THR:HA | 1:A:157:ALA:H | 13 | 0.19 |
| (1,1037) | 1:A:149:PHE:HB3 | 1:A:150:ASP:H | 8 | 0.19 |
| (1,1021) | 1:A:143:HIS:H | 1:A:143:HIS:HD1 | 11 | 0.19 |
| (1,1020) | 1:A:142:ALA:HB1 | 1:A:145:ASP:H | 10 | 0.19 |
| (1,1020) | 1:A:142:ALA:HB2 | 1:A:145:ASP:H | 10 | 0.19 |
| (1,1020) | 1:A:142:ALA:HB3 | 1:A:145:ASP:H | 10 | 0.19 |
| (1,1020) | 1:A:142:ALA:HB1 | 1:A:145:ASP:H | 15 | 0.19 |
| (1,1020) | 1:A:142:ALA:HB2 | 1:A:145:ASP:H | 15 | 0.19 |
| (1,1020) | 1:A:142:ALA:HB3 | 1:A:145:ASP:H | 15 | 0.19 |
| (1,1018) | 1:A:141:GLY:H | 1:A:150:ASP:H | 16 | 0.19 |
| (7,89) | 1:A:69:VAL:HG21 | 1:A:158:HIS:H | 13 | 0.18 |
| (7,89) | 1:A:69:VAL:HG22 | 1:A:158:HIS:H | 13 | 0.18 |
| (7,89) | 1:A:69:VAL:HG23 | 1:A:158:HIS:H | 13 | 0.18 |
| (7,65) | 1:A:56:SER:H | 1:A:58:VAL:HG21 | 5 | 0.18 |
| (7,65) | 1:A:56:SER:H | 1:A:58:VAL:HG22 | 5 | 0.18 |
| (7,65) | 1:A:56:SER:H | 1:A:58:VAL:HG23 | 5 | 0.18 |
| (7,49) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:58:VAL:HG21 | 14 | 0.18 |
| (7,49) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:58:VAL:HG22 | 14 | 0.18 |
| (7,49) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:58:VAL:HG23 | 14 | 0.18 |
| (7,428) | 1:A:198:HIS:H | 1:A:200:LEU:HG | 12 | 0.18 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD11 | 1:A:186:ILE:H | 9 | 0.18 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD12 | 1:A:186:ILE:H | 9 | 0.18 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD13 | 1:A:186:ILE:H | 9 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,353) | 1:A:122:LEU:HD21 | 1:A:238:TYR:HD1 | 15 | 0.18 |
| (7,353) | 1:A:122:LEU:HD21 | 1:A:238:TYR:HD2 | 15 | 0.18 |
| (7,353) | 1:A:122:LEU:HD22 | 1:A:238:TYR:HD1 | 15 | 0.18 |
| (7,353) | 1:A:122:LEU:HD22 | 1:A:238:TYR:HD2 | 15 | 0.18 |
| (7,353) | 1:A:122:LEU:HD23 | 1:A:238:TYR:HD1 | 15 | 0.18 |
| (7,353) | 1:A:122:LEU:HD23 | 1:A:238:TYR:HD2 | 15 | 0.18 |
| (7,341) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:226:LEU:HD21 | 8 | 0.18 |
| (7,341) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:226:LEU:HD22 | 8 | 0.18 |
| (7,341) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:226:LEU:HD23 | 8 | 0.18 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:134:ILE:HD11 | 11 | 0.18 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:134:ILE:HD12 | 11 | 0.18 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:134:ILE:HD13 | 11 | 0.18 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:134:ILE:HD11 | 11 | 0.18 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:134:ILE:HD12 | 11 | 0.18 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:134:ILE:HD13 | 11 | 0.18 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:134:ILE:HD11 | 11 | 0.18 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:134:ILE:HD12 | 11 | 0.18 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:134:ILE:HD13 | 11 | 0.18 |
| (7,301) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:196:LEU:HD11 | 3 | 0.18 |
| (7,301) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:196:LEU:HD12 | 3 | 0.18 |
| (7,301) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:196:LEU:HD13 | 3 | 0.18 |
| (7,301) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:196:LEU:HD11 | 13 | 0.18 |
| (7,301) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:196:LEU:HD12 | 13 | 0.18 |
| (7,301) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:196:LEU:HD13 | 13 | 0.18 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG11 | 5 | 0.18 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG12 | 5 | 0.18 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG13 | 5 | 0.18 |
| (7,207) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:95:SER:H | 6 | 0.18 |
| (7,207) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:95:SER:H | 6 | 0.18 |
| (7,207) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:95:SER:H | 6 | 0.18 |
| (7,190) | 1:A:91:TYR:HE1 | 1:A:113:LEU:HD11 | 13 | 0.18 |
| (7,190) | 1:A:91:TYR:HE1 | 1:A:113:LEU:HD12 | 13 | 0.18 |
| (7,190) | 1:A:91:TYR:HE1 | 1:A:113:LEU:HD13 | 13 | 0.18 |
| (7,190) | 1:A:91:TYR:HE2 | 1:A:113:LEU:HD11 | 13 | 0.18 |
| (7,190) | 1:A:91:TYR:HE2 | 1:A:113:LEU:HD12 | 13 | 0.18 |
| (7,190) | 1:A:91:TYR:HE2 | 1:A:113:LEU:HD13 | 13 | 0.18 |
| (7,18) | 1:A:24:LEU:HD21 | 1:A:72:VAL:HB | 12 | 0.18 |
| (7,18) | 1:A:24:LEU:HD22 | 1:A:72:VAL:HB | 12 | 0.18 |
| (7,18) | 1:A:24:LEU:HD23 | 1:A:72:VAL:HB | 12 | 0.18 |
| (7,117) | 1:A:88:VAL:H | 1:A:89:VAL:HG21 | 7 | 0.18 |
| (7,117) | 1:A:88:VAL:H | 1:A:89:VAL:HG22 | 7 | 0.18 |
| (7,117) | 1:A:88:VAL:H | 1:A:89:VAL:HG23 | 7 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,109) | 1:A:84:TRP:HD1 | 1:A:200:LEU:HD21 | 13 | 0.18 |
| (7,109) | 1:A:84:TRP:HD1 | 1:A:200:LEU:HD22 | 13 | 0.18 |
| (7,109) | 1:A:84:TRP:HD1 | 1:A:200:LEU:HD23 | 13 | 0.18 |
| (5,2) | 1:A:66:ARG:NH2 | 1:A:71:ASP:OD1 | 12 | 0.18 |
| (4,21) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:198:HIS:NE2 | 1 | 0.18 |
| (4,21) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:198:HIS:NE2 | 2 | 0.18 |
| (4,21) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:198:HIS:NE2 | 5 | 0.18 |
| (4,21) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:198:HIS:NE2 | 7 | 0.18 |
| (4,21) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:198:HIS:NE2 | 8 | 0.18 |
| (4,21) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:198:HIS:NE2 | 12 | 0.18 |
| (4,17) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:143:HIS:NE2 | 8 | 0.18 |
| (4,17) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:143:HIS:NE2 | 14 | 0.18 |
| (4,17) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:143:HIS:NE2 | 16 | 0.18 |
| (4,1) | 3:A:301:CA:CA | 1:A:167:GLY:O | 3 | 0.18 |
| (3,4) | 3:A:301:CA:CA | 1:A:169:ASP:OD2 | 16 | 0.18 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD11 | 1:A:137:GLY:H | 1 | 0.18 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD12 | 1:A:137:GLY:H | 1 | 0.18 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD13 | 1:A:137:GLY:H | 1 | 0.18 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD11 | 1:A:137:GLY:H | 11 | 0.18 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD12 | 1:A:137:GLY:H | 11 | 0.18 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD13 | 1:A:137:GLY:H | 11 | 0.18 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD11 | 1:A:137:GLY:H | 13 | 0.18 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD12 | 1:A:137:GLY:H | 13 | 0.18 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD13 | 1:A:137:GLY:H | 13 | 0.18 |
| (1,951) | 1:A:134:ILE:HD11 | 1:A:135:MET:H | 7 | 0.18 |
| (1,951) | 1:A:134:ILE:HD12 | 1:A:135:MET:H | 7 | 0.18 |
| (1,951) | 1:A:134:ILE:HD13 | 1:A:135:MET:H | 7 | 0.18 |
| (1,924) | 1:A:129:TRP:HB3 | 1:A:130:GLY:H | 6 | 0.18 |
| (1,91) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:19:LEU:HD21 | 2 | 0.18 |
| (1,91) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:19:LEU:HD22 | 2 | 0.18 |
| (1,91) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:19:LEU:HD23 | 2 | 0.18 |
| (1,887) | 1:A:124:PHE:H | 1:A:124:PHE:HD1 | 13 | 0.18 |
| (1,887) | 1:A:124:PHE:H | 1:A:124:PHE:HD2 | 13 | 0.18 |
| (1,769) | 1:A:114:ASN:HA | 1:A:118:LYS:H | 5 | 0.18 |
| (1,755) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:114:ASN:H | 13 | 0.18 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB1 | 9 | 0.18 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB2 | 9 | 0.18 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB3 | 9 | 0.18 |
| (1,721) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:188:PHE:HE1 | 3 | 0.18 |
| (1,721) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:188:PHE:HE2 | 3 | 0.18 |
| (1,670) | 1:A:103:ILE:HD11 | 1:A:104:THR:H | 8 | 0.18 |
| (1,670) | 1:A:103:ILE:HD12 | 1:A:104:THR:H | 8 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,670) | 1:A:103:ILE:HD13 | 1:A:104:THR:H | 8 | 0.18 |
| (1,631) | 1:A:98:ARG:H | 1:A:100:LEU:H | 3 | 0.18 |
| (1,631) | 1:A:98:ARG:H | 1:A:100:LEU:H | 7 | 0.18 |
| (1,568) | 1:A:92:ARG:HE | 1:A:127:VAL:HB | 7 | 0.18 |
| (1,486) | 1:A:89:VAL:H | 1:A:123:HIS:HD2 | 7 | 0.18 |
| (1,44) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:18:TYR:H | 16 | 0.18 |
| (1,420) | 1:A:73:ALA:H | 1:A:74:GLU:H | 1 | 0.18 |
| (1,420) | 1:A:73:ALA:H | 1:A:74:GLU:H | 2 | 0.18 |
| (1,420) | 1:A:73:ALA:H | 1:A:74:GLU:H | 8 | 0.18 |
| (1,420) | 1:A:73:ALA:H | 1:A:74:GLU:H | 13 | 0.18 |
| (1,42) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:16:GLN:HE21 | 5 | 0.18 |
| (1,42) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:16:GLN:HE22 | 5 | 0.18 |
| (1,406) | 1:A:69:VAL:H | 1:A:159:ALA:H | 2 | 0.18 |
| (1,406) | 1:A:69:VAL:H | 1:A:159:ALA:H | 2 | 0.18 |
| (1,371) | 1:A:63:GLN:HB2 | 1:A:64:LYS:H | 7 | 0.18 |
| (1,371) | 1:A:63:GLN:HB3 | 1:A:64:LYS:H | 7 | 0.18 |
| (1,248) | 1:A:46:PHE:HA | 1:A:48:LEU:H | 16 | 0.18 |
| (1,230) | 1:A:45:PHE:H | 1:A:45:PHE:HD1 | 16 | 0.18 |
| (1,230) | 1:A:45:PHE:H | 1:A:45:PHE:HD2 | 16 | 0.18 |
| (1,212) | 1:A:43:GLN:H | 1:A:45:PHE:H | 3 | 0.18 |
| (1,169) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:52:GLY:HA2 | 16 | 0.18 |
| (1,166) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:41:GLU:HG2 | 7 | 0.18 |
| (1,161) | 1:A:39:LEU:H | 1:A:41:GLU:H | 12 | 0.18 |
| (1,1440) | 1:A:233:GLY:HA2 | 1:A:235:GLN:H | 16 | 0.18 |
| (1,1427) | 1:A:231:ILE:HG21 | 1:A:234:ILE:H | 13 | 0.18 |
| (1,1427) | 1:A:231:ILE:HG22 | 1:A:234:ILE:H | 13 | 0.18 |
| (1,1427) | 1:A:231:ILE:HG23 | 1:A:234:ILE:H | 13 | 0.18 |
| (1,1402) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HB | 10 | 0.18 |
| (1,1360) | 1:A:211:VAL:H | 1:A:213:TYR:H | 3 | 0.18 |
| (1,1347) | 1:A:209:ASN:HD21 | 1:A:210:ALA:HB1 | 13 | 0.18 |
| (1,1347) | 1:A:209:ASN:HD21 | 1:A:210:ALA:HB2 | 13 | 0.18 |
| (1,1347) | 1:A:209:ASN:HD21 | 1:A:210:ALA:HB3 | 13 | 0.18 |
| (1,1347) | 1:A:209:ASN:HD22 | 1:A:210:ALA:HB1 | 13 | 0.18 |
| (1,1347) | 1:A:209:ASN:HD22 | 1:A:210:ALA:HB2 | 13 | 0.18 |
| (1,1347) | 1:A:209:ASN:HD22 | 1:A:210:ALA:HB3 | 13 | 0.18 |
| (1,1305) | 1:A:201:GLY:H | 1:A:202:MET:HB2 | 7 | 0.18 |
| (1,1305) | 1:A:201:GLY:H | 1:A:202:MET:HB3 | 7 | 0.18 |
| (1,1305) | 1:A:201:GLY:H | 1:A:202:MET:HB2 | 10 | 0.18 |
| (1,1305) | 1:A:201:GLY:H | 1:A:202:MET:HB3 | 10 | 0.18 |
| (1,1295) | 1:A:199:SER:H | 1:A:201:GLY:H | 10 | 0.18 |
| (1,1206) | 1:A:179:THR:H | 1:A:188:PHE:HA | 13 | 0.18 |
| (1,1160) | 1:A:173:ASP:H | 1:A:174:GLU:H | 9 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1147) | 1:A:172:PHE:HB2 | 1:A:173:ASP:H | 16 | 0.18 |
| (1,1100) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:198:HIS:HB2 | 9 | 0.18 |
| (1,11) | 1:A:10:LEU:H | 1:A:13:GLU:H | 3 | 0.18 |
| (1,1098) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:169:ASP:H | 4 | 0.18 |
| (1,1097) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:168:GLY:HA2 | 2 | 0.18 |
| (1,1097) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:168:GLY:HA2 | 7 | 0.18 |
| (1,1060) | 1:A:156:LEU:HB3 | 1:A:178:TRP:HH2 | 5 | 0.18 |
| (1,1050) | 1:A:155:THR:HA | 1:A:157:ALA:H | 7 | 0.18 |
| (1,1037) | 1:A:149:PHE:HB3 | 1:A:150:ASP:H | 1 | 0.18 |
| (1,1030) | 1:A:147:TYR:HA | 1:A:147:TYR:HE1 | 7 | 0.18 |
| (1,1030) | 1:A:147:TYR:HA | 1:A:147:TYR:HE2 | 7 | 0.18 |
| (1,1) | 1:A:2:GLN:HG2 | 1:A:3:GLU:H | 6 | 0.18 |
| (1,1) | 1:A:2:GLN:HG3 | 1:A:3:GLU:H | 6 | 0.18 |
| (7,65) | 1:A:56:SER:H | 1:A:58:VAL:HG21 | 10 | 0.17 |
| (7,65) | 1:A:56:SER:H | 1:A:58:VAL:HG22 | 10 | 0.17 |
| (7,65) | 1:A:56:SER:H | 1:A:58:VAL:HG23 | 10 | 0.17 |
| (7,428) | 1:A:198:HIS:H | 1:A:200:LEU:HG | 4 | 0.17 |
| (7,373) | 1:A:128:VAL:HA | 1:A:127:VAL:HG21 | 9 | 0.17 |
| (7,373) | 1:A:128:VAL:HA | 1:A:127:VAL:HG22 | 9 | 0.17 |
| (7,373) | 1:A:128:VAL:HA | 1:A:127:VAL:HG23 | 9 | 0.17 |
| (7,341) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:226:LEU:HD21 | 12 | 0.17 |
| (7,341) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:226:LEU:HD22 | 12 | 0.17 |
| (7,341) | 1:A:119:GLU:H | 1:A:226:LEU:HD23 | 12 | 0.17 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD11 | 2 | 0.17 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD12 | 2 | 0.17 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD13 | 2 | 0.17 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD11 | 2 | 0.17 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD12 | 2 | 0.17 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD13 | 2 | 0.17 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD11 | 2 | 0.17 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD12 | 2 | 0.17 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD13 | 2 | 0.17 |
| (7,241) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG11 | 6 | 0.17 |
| (7,241) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG12 | 6 | 0.17 |
| (7,241) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG13 | 6 | 0.17 |
| (7,239) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG11 | 13 | 0.17 |
| (7,239) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG12 | 13 | 0.17 |
| (7,239) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG13 | 13 | 0.17 |
| (7,238) | 1:A:100:LEU:HD21 | 1:A:188:PHE:H | 12 | 0.17 |
| (7,238) | 1:A:100:LEU:HD22 | 1:A:188:PHE:H | 12 | 0.17 |
| (7,238) | 1:A:100:LEU:HD23 | 1:A:188:PHE:H | 12 | 0.17 |
| (7,238) | 1:A:100:LEU:HD21 | 1:A:188:PHE:H | 13 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,238) | 1:A:100:LEU:HD22 | 1:A:188:PHE:H | 13 | 0.17 |
| (7,238) | 1:A:100:LEU:HD23 | 1:A:188:PHE:H | 13 | 0.17 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG11 | 8 | 0.17 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG12 | 8 | 0.17 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG13 | 8 | 0.17 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG11 | 9 | 0.17 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG12 | 9 | 0.17 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG13 | 9 | 0.17 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG11 | 11 | 0.17 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG12 | 11 | 0.17 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG13 | 11 | 0.17 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG2 | 16 | 0.17 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG3 | 16 | 0.17 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG2 | 16 | 0.17 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG3 | 16 | 0.17 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG2 | 16 | 0.17 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG3 | 16 | 0.17 |
| (7,207) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:95:SER:H | 9 | 0.17 |
| (7,207) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:95:SER:H | 9 | 0.17 |
| (7,207) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:95:SER:H | 9 | 0.17 |
| (7,207) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:95:SER:H | 16 | 0.17 |
| (7,207) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:95:SER:H | 16 | 0.17 |
| (7,207) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:95:SER:H | 16 | 0.17 |
| (7,190) | 1:A:91:TYR:HE1 | 1:A:113:LEU:HD11 | 15 | 0.17 |
| (7,190) | 1:A:91:TYR:HE1 | 1:A:113:LEU:HD12 | 15 | 0.17 |
| (7,190) | 1:A:91:TYR:HE1 | 1:A:113:LEU:HD13 | 15 | 0.17 |
| (7,190) | 1:A:91:TYR:HE2 | 1:A:113:LEU:HD11 | 15 | 0.17 |
| (7,190) | 1:A:91:TYR:HE2 | 1:A:113:LEU:HD12 | 15 | 0.17 |
| (7,190) | 1:A:91:TYR:HE2 | 1:A:113:LEU:HD13 | 15 | 0.17 |
| (7,166) | 1:A:89:VAL:HG11 | 1:A:124:PHE:HE1 | 9 | 0.17 |
| (7,166) | 1:A:89:VAL:HG11 | 1:A:124:PHE:HE2 | 9 | 0.17 |
| (7,166) | 1:A:89:VAL:HG12 | 1:A:124:PHE:HE1 | 9 | 0.17 |
| (7,166) | 1:A:89:VAL:HG12 | 1:A:124:PHE:HE2 | 9 | 0.17 |
| (7,166) | 1:A:89:VAL:HG13 | 1:A:124:PHE:HE1 | 9 | 0.17 |
| (7,166) | 1:A:89:VAL:HG13 | 1:A:124:PHE:HE2 | 9 | 0.17 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:H | 12 | 0.17 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:H | 12 | 0.17 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:H | 12 | 0.17 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG11 | 1:A:125:ARG:H | 13 | 0.17 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG12 | 1:A:125:ARG:H | 13 | 0.17 |
| (7,139) | 1:A:88:VAL:HG13 | 1:A:125:ARG:H | 13 | 0.17 |
| (7,12) | 1:A:23:TYR:H | 1:A:72:VAL:HG21 | 8 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (7,12) | 1:A:23:TYR:H | 1:A:72:VAL:HG22 | 8 | 0.17 |
| (7,12) | 1:A:23:TYR:H | 1:A:72:VAL:HG23 | 8 | 0.17 |
| (7,117) | 1:A:88:VAL:H | 1:A:89:VAL:HG21 | 1 | 0.17 |
| (7,117) | 1:A:88:VAL:H | 1:A:89:VAL:HG22 | 1 | 0.17 |
| (7,117) | 1:A:88:VAL:H | 1:A:89:VAL:HG23 | 1 | 0.17 |
| (4,21) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:198:HIS:NE2 | 15 | 0.17 |
| (1,994) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:139:ALA:H | 4 | 0.17 |
| (1,994) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:139:ALA:H | 4 | 0.17 |
| (1,985) | 1:A:137:GLY:H | 1:A:170:ALA:H | 3 | 0.17 |
| (1,98) | 1:A:23:TYR:HB2 | 1:A:24:LEU:HG | 10 | 0.17 |
| (1,98) | 1:A:23:TYR:HB3 | 1:A:24:LEU:HG | 10 | 0.17 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD11 | 1:A:137:GLY:H | 3 | 0.17 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD12 | 1:A:137:GLY:H | 3 | 0.17 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD13 | 1:A:137:GLY:H | 3 | 0.17 |
| (1,97) | 1:A:23:TYR:HB2 | 1:A:24:LEU:H | 12 | 0.17 |
| (1,97) | 1:A:23:TYR:HB3 | 1:A:24:LEU:H | 12 | 0.17 |
| (1,920) | 1:A:129:TRP:HB2 | 1:A:130:GLY:H | 5 | 0.17 |
| (1,920) | 1:A:129:TRP:HB3 | 1:A:130:GLY:H | 5 | 0.17 |
| (1,915) | 1:A:128:VAL:HB | 1:A:129:TRP:HD1 | 12 | 0.17 |
| (1,87) | 1:A:21:ARG:H | 1:A:22:PHE:HB2 | 15 | 0.17 |
| (1,87) | 1:A:21:ARG:H | 1:A:22:PHE:HB3 | 15 | 0.17 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:238:TYR:HB2 | 7 | 0.17 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:238:TYR:HB3 | 7 | 0.17 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:238:TYR:HB2 | 7 | 0.17 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:238:TYR:HB3 | 7 | 0.17 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:238:TYR:HB2 | 7 | 0.17 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:238:TYR:HB3 | 7 | 0.17 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:238:TYR:HB2 | 8 | 0.17 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:238:TYR:HB3 | 8 | 0.17 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:238:TYR:HB2 | 8 | 0.17 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:238:TYR:HB3 | 8 | 0.17 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:238:TYR:HB2 | 8 | 0.17 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:238:TYR:HB3 | 8 | 0.17 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:202:MET:HE1 | 6 | 0.17 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:202:MET:HE2 | 6 | 0.17 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:202:MET:HE3 | 6 | 0.17 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:202:MET:HE1 | 6 | 0.17 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:202:MET:HE2 | 6 | 0.17 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:202:MET:HE3 | 6 | 0.17 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:202:MET:HE1 | 6 | 0.17 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:202:MET:HE2 | 6 | 0.17 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:202:MET:HE3 | 6 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:202:MET:HE1 | 13 | 0.17 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:202:MET:HE2 | 13 | 0.17 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:202:MET:HE3 | 13 | 0.17 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:202:MET:HE1 | 13 | 0.17 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:202:MET:HE2 | 13 | 0.17 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:202:MET:HE3 | 13 | 0.17 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:202:MET:HE1 | 13 | 0.17 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:202:MET:HE2 | 13 | 0.17 |
| (1,853) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:202:MET:HE3 | 13 | 0.17 |
| (1,801) | 1:A:116:TRP:HE1 | 1:A:198:HIS:H | 7 | 0.17 |
| (1,801) | 1:A:116:TRP:HE1 | 1:A:198:HIS:H | 12 | 0.17 |
| (1,801) | 1:A:116:TRP:HE1 | 1:A:198:HIS:H | 16 | 0.17 |
| (1,755) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:114:ASN:H | 10 | 0.17 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB1 | 10 | 0.17 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB2 | 10 | 0.17 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB3 | 10 | 0.17 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB1 | 12 | 0.17 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB2 | 12 | 0.17 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB3 | 12 | 0.17 |
| (1,711) | 1:A:108:LEU:H | 1:A:110:SER:H | 14 | 0.17 |
| (1,692) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:106:ASP:HB2 | 14 | 0.17 |
| (1,692) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:106:ASP:HB3 | 14 | 0.17 |
| (1,687) | 1:A:104:THR:HG21 | 1:A:108:LEU:HG | 7 | 0.17 |
| (1,687) | 1:A:104:THR:HG22 | 1:A:108:LEU:HG | 7 | 0.17 |
| (1,687) | 1:A:104:THR:HG23 | 1:A:108:LEU:HG | 7 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:96:TYR:HB2 | 1:A:102:HIS:HD2 | 9 | 0.17 |
| (1,568) | 1:A:92:ARG:HE | 1:A:127:VAL:HB | 8 | 0.17 |
| (1,53) | 1:A:18:TYR:H | 1:A:21:ARG:HG2 | 4 | 0.17 |
| (1,514) | 1:A:91:TYR:H | 1:A:126:LYS:HA | 6 | 0.17 |
| (1,507) | 1:A:90:THR:HG21 | 1:A:91:TYR:H | 13 | 0.17 |
| (1,507) | 1:A:90:THR:HG22 | 1:A:91:TYR:H | 13 | 0.17 |
| (1,507) | 1:A:90:THR:HG23 | 1:A:91:TYR:H | 13 | 0.17 |
| (1,46) | 1:A:16:GLN:HE21 | 1:A:35:LEU:H | 13 | 0.17 |
| (1,46) | 1:A:16:GLN:HE22 | 1:A:35:LEU:H | 13 | 0.17 |
| (1,451) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:234:ILE:HG13 | 10 | 0.17 |
| (1,451) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:234:ILE:HG13 | 10 | 0.17 |
| (1,443) | 1:A:82:PRO:HD2 | 1:A:83:LYS:HG2 | 10 | 0.17 |
| (1,443) | 1:A:82:PRO:HD2 | 1:A:83:LYS:HG3 | 10 | 0.17 |
| (1,315) | 1:A:58:VAL:HA | 1:A:61:ILE:HB | 3 | 0.17 |
| (1,305) | 1:A:57:ARG:HA | 1:A:57:ARG:HD2 | 15 | 0.17 |
| (1,305) | 1:A:57:ARG:HA | 1:A:57:ARG:HD3 | 15 | 0.17 |
| (1,305) | 1:A:57:ARG:HA | 1:A:57:ARG:HD2 | 16 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,305) | 1:A:57:ARG:HA | 1:A:57:ARG:HD3 | 16 | 0.17 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG21 | 1:A:53:MET:HB2 | 7 | 0.17 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG21 | 1:A:53:MET:HB3 | 7 | 0.17 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG22 | 1:A:53:MET:HB2 | 7 | 0.17 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG22 | 1:A:53:MET:HB3 | 7 | 0.17 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG23 | 1:A:53:MET:HB2 | 7 | 0.17 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG23 | 1:A:53:MET:HB3 | 7 | 0.17 |
| (1,232) | 1:A:45:PHE:H | 1:A:46:PHE:HD1 | 4 | 0.17 |
| (1,232) | 1:A:45:PHE:H | 1:A:46:PHE:HD2 | 4 | 0.17 |
| (1,232) | 1:A:45:PHE:H | 1:A:46:PHE:HD1 | 9 | 0.17 |
| (1,232) | 1:A:45:PHE:H | 1:A:46:PHE:HD2 | 9 | 0.17 |
| (1,205) | 1:A:42:MET:HG3 | 1:A:46:PHE:HD1 | 9 | 0.17 |
| (1,205) | 1:A:42:MET:HG3 | 1:A:46:PHE:HD2 | 9 | 0.17 |
| (1,196) | 1:A:42:MET:HE1 | 1:A:62:MET:HB2 | 4 | 0.17 |
| (1,196) | 1:A:42:MET:HE1 | 1:A:62:MET:HB3 | 4 | 0.17 |
| (1,196) | 1:A:42:MET:HE2 | 1:A:62:MET:HB2 | 4 | 0.17 |
| (1,196) | 1:A:42:MET:HE2 | 1:A:62:MET:HB3 | 4 | 0.17 |
| (1,196) | 1:A:42:MET:HE3 | 1:A:62:MET:HB2 | 4 | 0.17 |
| (1,196) | 1:A:42:MET:HE3 | 1:A:62:MET:HB3 | 4 | 0.17 |
| (1,168) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:52:GLY:H | 12 | 0.17 |
| (1,166) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:41:GLU:HG2 | 15 | 0.17 |
| (1,1440) | 1:A:233:GLY:HA2 | 1:A:235:GLN:H | 6 | 0.17 |
| (1,1405) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:H | 4 | 0.17 |
| (1,1405) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:H | 4 | 0.17 |
| (1,1404) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HG12 | 3 | 0.17 |
| (1,1404) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HG13 | 3 | 0.17 |
| (1,1360) | 1:A:211:VAL:H | 1:A:213:TYR:H | 8 | 0.17 |
| (1,1311) | 1:A:202:MET:HA | 1:A:234:ILE:HD11 | 5 | 0.17 |
| (1,1311) | 1:A:202:MET:HA | 1:A:234:ILE:HD12 | 5 | 0.17 |
| (1,1311) | 1:A:202:MET:HA | 1:A:234:ILE:HD13 | 5 | 0.17 |
| (1,1222) | 1:A:184:LEU:HA | 1:A:185:GLY:H | 2 | 0.17 |
| (1,1222) | 1:A:184:LEU:HA | 1:A:185:GLY:H | 3 | 0.17 |
| (1,1222) | 1:A:184:LEU:HA | 1:A:185:GLY:H | 4 | 0.17 |
| (1,1222) | 1:A:184:LEU:HA | 1:A:185:GLY:H | 5 | 0.17 |
| (1,1222) | 1:A:184:LEU:HA | 1:A:185:GLY:H | 8 | 0.17 |
| (1,1222) | 1:A:184:LEU:HA | 1:A:185:GLY:H | 12 | 0.17 |
| (1,1222) | 1:A:184:LEU:HA | 1:A:185:GLY:H | 13 | 0.17 |
| (1,1163) | 1:A:173:ASP:H | 1:A:178:TRP:HE1 | 10 | 0.17 |
| (1,1160) | 1:A:173:ASP:H | 1:A:174:GLU:H | 12 | 0.17 |
| (1,1160) | 1:A:173:ASP:H | 1:A:174:GLU:H | 14 | 0.17 |
| (1,106) | 1:A:25:TYR:H | 1:A:26:ASP:H | 9 | 0.17 |
| (1,1058) | 1:A:156:LEU:HB2 | 1:A:178:TRP:HH2 | 7 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1058) | 1:A:156:LEU:HB3 | 1:A:178:TRP:HH2 | 7 | 0.17 |
| (1,1058) | 1:A:156:LEU:HB2 | 1:A:178:TRP:HH2 | 11 | 0.17 |
| (1,1058) | 1:A:156:LEU:HB3 | 1:A:178:TRP:HH2 | 11 | 0.17 |
| (1,1030) | 1:A:147:TYR:HA | 1:A:147:TYR:HE1 | 2 | 0.17 |
| (1,1030) | 1:A:147:TYR:HA | 1:A:147:TYR:HE2 | 2 | 0.17 |
| (1,1020) | 1:A:142:ALA:HB1 | 1:A:145:ASP:H | 6 | 0.17 |
| (1,1020) | 1:A:142:ALA:HB2 | 1:A:145:ASP:H | 6 | 0.17 |
| (1,1020) | 1:A:142:ALA:HB3 | 1:A:145:ASP:H | 6 | 0.17 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:59:ILE:HG21 | 11 | 0.16 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:59:ILE:HG22 | 11 | 0.16 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:59:ILE:HG23 | 11 | 0.16 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:59:ILE:HG21 | 11 | 0.16 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:59:ILE:HG22 | 11 | 0.16 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:59:ILE:HG23 | 11 | 0.16 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:59:ILE:HG21 | 11 | 0.16 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:59:ILE:HG22 | 11 | 0.16 |
| (7,63) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:59:ILE:HG23 | 11 | 0.16 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:211:VAL:HG11 | 13 | 0.16 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:211:VAL:HG12 | 13 | 0.16 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:211:VAL:HG13 | 13 | 0.16 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:211:VAL:HG11 | 13 | 0.16 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:211:VAL:HG12 | 13 | 0.16 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:211:VAL:HG13 | 13 | 0.16 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:211:VAL:HG11 | 13 | 0.16 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:211:VAL:HG12 | 13 | 0.16 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:211:VAL:HG13 | 13 | 0.16 |
| (7,433) | 1:A:200:LEU:HD11 | 1:A:201:GLY:H | 12 | 0.16 |
| (7,433) | 1:A:200:LEU:HD12 | 1:A:201:GLY:H | 12 | 0.16 |
| (7,433) | 1:A:200:LEU:HD13 | 1:A:201:GLY:H | 12 | 0.16 |
| (7,428) | 1:A:198:HIS:H | 1:A:200:LEU:HG | 9 | 0.16 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG11 | 11 | 0.16 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG12 | 11 | 0.16 |
| (7,418) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:211:VAL:HG13 | 11 | 0.16 |
| (7,404) | 1:A:166:LEU:HD21 | 1:A:169:ASP:H | 11 | 0.16 |
| (7,404) | 1:A:166:LEU:HD22 | 1:A:169:ASP:H | 11 | 0.16 |
| (7,404) | 1:A:166:LEU:HD23 | 1:A:169:ASP:H | 11 | 0.16 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:173:ASP:HB2 | 2 | 0.16 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:173:ASP:HB3 | 2 | 0.16 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:173:ASP:HB2 | 2 | 0.16 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:173:ASP:HB3 | 2 | 0.16 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:173:ASP:HB2 | 2 | 0.16 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:173:ASP:HB3 | 2 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:173:ASP:HB2 | 10 | 0.16 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:173:ASP:HB3 | 10 | 0.16 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:173:ASP:HB2 | 10 | 0.16 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:173:ASP:HB3 | 10 | 0.16 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:173:ASP:HB2 | 10 | 0.16 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:173:ASP:HB3 | 10 | 0.16 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD11 | 1:A:186:ILE:H | 4 | 0.16 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD12 | 1:A:186:ILE:H | 4 | 0.16 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD13 | 1:A:186:ILE:H | 4 | 0.16 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG21 | 15 | 0.16 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG22 | 15 | 0.16 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG23 | 15 | 0.16 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD11 | 13 | 0.16 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD12 | 13 | 0.16 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD13 | 13 | 0.16 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD11 | 13 | 0.16 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD12 | 13 | 0.16 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD13 | 13 | 0.16 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD11 | 13 | 0.16 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD12 | 13 | 0.16 |
| (7,319) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD13 | 13 | 0.16 |
| (7,301) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:196:LEU:HD11 | 16 | 0.16 |
| (7,301) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:196:LEU:HD12 | 16 | 0.16 |
| (7,301) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:196:LEU:HD13 | 16 | 0.16 |
| (7,242) | 1:A:102:HIS:HD2 | 1:A:105:VAL:HG11 | 8 | 0.16 |
| (7,242) | 1:A:102:HIS:HD2 | 1:A:105:VAL:HG12 | 8 | 0.16 |
| (7,242) | 1:A:102:HIS:HD2 | 1:A:105:VAL:HG13 | 8 | 0.16 |
| (7,241) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG11 | 4 | 0.16 |
| (7,241) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG12 | 4 | 0.16 |
| (7,241) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG13 | 4 | 0.16 |
| (7,238) | 1:A:100:LEU:HD21 | 1:A:188:PHE:H | 6 | 0.16 |
| (7,238) | 1:A:100:LEU:HD22 | 1:A:188:PHE:H | 6 | 0.16 |
| (7,238) | 1:A:100:LEU:HD23 | 1:A:188:PHE:H | 6 | 0.16 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG11 | 4 | 0.16 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG12 | 4 | 0.16 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG13 | 4 | 0.16 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG11 | 6 | 0.16 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG12 | 6 | 0.16 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG13 | 6 | 0.16 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG11 | 12 | 0.16 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG12 | 12 | 0.16 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG13 | 12 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (7,205) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HE1 | 13 | 0.16 |
| (7,205) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HE2 | 13 | 0.16 |
| (7,205) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HE3 | 13 | 0.16 |
| (7,205) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HE1 | 13 | 0.16 |
| (7,205) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HE2 | 13 | 0.16 |
| (7,205) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HE3 | 13 | 0.16 |
| (7,205) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HE1 | 13 | 0.16 |
| (7,205) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HE2 | 13 | 0.16 |
| (7,205) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HE3 | 13 | 0.16 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG21 | 2 | 0.16 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG22 | 2 | 0.16 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG23 | 2 | 0.16 |
| (7,166) | 1:A:89:VAL:HG11 | 1:A:124:PHE:HE1 | 12 | 0.16 |
| (7,166) | 1:A:89:VAL:HG11 | 1:A:124:PHE:HE2 | 12 | 0.16 |
| (7,166) | 1:A:89:VAL:HG12 | 1:A:124:PHE:HE1 | 12 | 0.16 |
| (7,166) | 1:A:89:VAL:HG12 | 1:A:124:PHE:HE2 | 12 | 0.16 |
| (7,166) | 1:A:89:VAL:HG13 | 1:A:124:PHE:HE1 | 12 | 0.16 |
| (7,166) | 1:A:89:VAL:HG13 | 1:A:124:PHE:HE2 | 12 | 0.16 |
| (7,15) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:72:VAL:HG21 | 12 | 0.16 |
| (7,15) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:72:VAL:HG22 | 12 | 0.16 |
| (7,15) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:72:VAL:HG23 | 12 | 0.16 |
| (7,12) | 1:A:23:TYR:H | 1:A:72:VAL:HG21 | 16 | 0.16 |
| (7,12) | 1:A:23:TYR:H | 1:A:72:VAL:HG22 | 16 | 0.16 |
| (7,12) | 1:A:23:TYR:H | 1:A:72:VAL:HG23 | 16 | 0.16 |
| (7,1) | 1:A:10:LEU:H | 1:A:10:LEU:HD11 | 2 | 0.16 |
| (7,1) | 1:A:10:LEU:H | 1:A:10:LEU:HD12 | 2 | 0.16 |
| (7,1) | 1:A:10:LEU:H | 1:A:10:LEU:HD13 | 2 | 0.16 |
| (7,1) | 1:A:10:LEU:H | 1:A:10:LEU:HD21 | 2 | 0.16 |
| (7,1) | 1:A:10:LEU:H | 1:A:10:LEU:HD22 | 2 | 0.16 |
| (7,1) | 1:A:10:LEU:H | 1:A:10:LEU:HD23 | 2 | 0.16 |
| (4,9) | 3:A:302:CA:CA | 1:A:151:GLY:O | 6 | 0.16 |
| (4,21) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:198:HIS:NE2 | 9 | 0.16 |
| (4,21) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:198:HIS:NE2 | 10 | 0.16 |
| (4,16) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:145:ASP:OD2 | 1 | 0.16 |
| (4,16) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:145:ASP:OD2 | 2 | 0.16 |
| (4,16) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:145:ASP:OD2 | 3 | 0.16 |
| (4,16) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:145:ASP:OD2 | 4 | 0.16 |
| (4,16) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:145:ASP:OD2 | 7 | 0.16 |
| (4,16) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:145:ASP:OD2 | 8 | 0.16 |
| (4,16) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:145:ASP:OD2 | 9 | 0.16 |
| (4,16) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:145:ASP:OD2 | 10 | 0.16 |
| (4,16) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:145:ASP:OD2 | 11 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (4,16) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:145:ASP:OD2 | 12 | 0.16 |
| (4,16) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:145:ASP:OD2 | 13 | 0.16 |
| (4,16) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:145:ASP:OD2 | 14 | 0.16 |
| (4,16) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:145:ASP:OD2 | 15 | 0.16 |
| (4,16) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:145:ASP:OD2 | 16 | 0.16 |
| (1,994) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:139:ALA:H | 7 | 0.16 |
| (1,994) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:139:ALA:H | 7 | 0.16 |
| (1,985) | 1:A:137:GLY:H | 1:A:170:ALA:H | 2 | 0.16 |
| (1,970) | 1:A:136:ILE:H | 1:A:137:GLY:H | 10 | 0.16 |
| (1,959) | 1:A:135:MET:H | 1:A:136:ILE:H | 8 | 0.16 |
| (1,959) | 1:A:135:MET:H | 1:A:136:ILE:H | 14 | 0.16 |
| (1,945) | 1:A:134:ILE:H | 1:A:136:ILE:HD11 | 2 | 0.16 |
| (1,945) | 1:A:134:ILE:H | 1:A:136:ILE:HD12 | 2 | 0.16 |
| (1,945) | 1:A:134:ILE:H | 1:A:136:ILE:HD13 | 2 | 0.16 |
| (1,945) | 1:A:134:ILE:H | 1:A:136:ILE:HD11 | 11 | 0.16 |
| (1,945) | 1:A:134:ILE:H | 1:A:136:ILE:HD12 | 11 | 0.16 |
| (1,945) | 1:A:134:ILE:H | 1:A:136:ILE:HD13 | 11 | 0.16 |
| (1,924) | 1:A:129:TRP:HB3 | 1:A:130:GLY:H | 12 | 0.16 |
| (1,920) | 1:A:129:TRP:HB2 | 1:A:130:GLY:H | 3 | 0.16 |
| (1,920) | 1:A:129:TRP:HB3 | 1:A:130:GLY:H | 3 | 0.16 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:238:TYR:HB2 | 10 | 0.16 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:238:TYR:HB3 | 10 | 0.16 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:238:TYR:HB2 | 10 | 0.16 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:238:TYR:HB3 | 10 | 0.16 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:238:TYR:HB2 | 10 | 0.16 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:238:TYR:HB3 | 10 | 0.16 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:238:TYR:HB2 | 14 | 0.16 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD11 | 1:A:238:TYR:HB3 | 14 | 0.16 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:238:TYR:HB2 | 14 | 0.16 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD12 | 1:A:238:TYR:HB3 | 14 | 0.16 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:238:TYR:HB2 | 14 | 0.16 |
| (1,857) | 1:A:120:ILE:HD13 | 1:A:238:TYR:HB3 | 14 | 0.16 |
| (1,819) | 1:A:117:GLY:HA2 | 1:A:122:LEU:H | 9 | 0.16 |
| (1,818) | 1:A:117:GLY:HA2 | 1:A:120:ILE:HG21 | 12 | 0.16 |
| (1,818) | 1:A:117:GLY:HA2 | 1:A:120:ILE:HG22 | 12 | 0.16 |
| (1,818) | 1:A:117:GLY:HA2 | 1:A:120:ILE:HG23 | 12 | 0.16 |
| (1,818) | 1:A:117:GLY:HA2 | 1:A:120:ILE:HG21 | 12 | 0.16 |
| (1,818) | 1:A:117:GLY:HA2 | 1:A:120:ILE:HG22 | 12 | 0.16 |
| (1,818) | 1:A:117:GLY:HA2 | 1:A:120:ILE:HG23 | 12 | 0.16 |
| (1,802) | 1:A:116:TRP:HE1 | 1:A:202:MET:HB2 | 14 | 0.16 |
| (1,802) | 1:A:116:TRP:HE1 | 1:A:202:MET:HB3 | 14 | 0.16 |
| (1,755) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:114:ASN:H | 9 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,755) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:114:ASN:H | 15 | 0.16 |
| (1,730) | 1:A:110:SER:H | 1:A:112:ALA:H | 2 | 0.16 |
| (1,730) | 1:A:110:SER:H | 1:A:112:ALA:H | 13 | 0.16 |
| (1,670) | 1:A:103:ILE:HD11 | 1:A:104:THR:H | 3 | 0.16 |
| (1,670) | 1:A:103:ILE:HD12 | 1:A:104:THR:H | 3 | 0.16 |
| (1,670) | 1:A:103:ILE:HD13 | 1:A:104:THR:H | 3 | 0.16 |
| (1,58) | 1:A:18:TYR:HB2 | 1:A:20:LYS:H | 7 | 0.16 |
| (1,58) | 1:A:18:TYR:HB2 | 1:A:20:LYS:H | 14 | 0.16 |
| (1,577) | 1:A:93:ILE:HB | 1:A:94:VAL:H | 12 | 0.16 |
| (1,561) | 1:A:92:ARG:HD2 | 1:A:132:ALA:H | 10 | 0.16 |
| (1,561) | 1:A:92:ARG:HD3 | 1:A:132:ALA:H | 10 | 0.16 |
| (1,56) | 1:A:18:TYR:HB2 | 1:A:20:LYS:H | 1 | 0.16 |
| (1,56) | 1:A:18:TYR:HB3 | 1:A:20:LYS:H | 1 | 0.16 |
| (1,519) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:134:ILE:HG21 | 4 | 0.16 |
| (1,519) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:134:ILE:HG22 | 4 | 0.16 |
| (1,519) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:134:ILE:HG23 | 4 | 0.16 |
| (1,486) | 1:A:89:VAL:H | 1:A:123:HIS:HD2 | 8 | 0.16 |
| (1,473) | 1:A:85:THR:HA | 1:A:86:SER:H | 9 | 0.16 |
| (1,448) | 1:A:83:LYS:HD2 | 1:A:202:MET:HA | 9 | 0.16 |
| (1,448) | 1:A:83:LYS:HD3 | 1:A:202:MET:HA | 9 | 0.16 |
| (1,402) | 1:A:68:GLY:H | 1:A:198:HIS:HD2 | 11 | 0.16 |
| (1,4) | 1:A:4:ALA:HB1 | 1:A:59:ILE:HB | 2 | 0.16 |
| (1,4) | 1:A:4:ALA:HB2 | 1:A:59:ILE:HB | 2 | 0.16 |
| (1,4) | 1:A:4:ALA:HB3 | 1:A:59:ILE:HB | 2 | 0.16 |
| (1,4) | 1:A:4:ALA:HB1 | 1:A:59:ILE:HB | 8 | 0.16 |
| (1,4) | 1:A:4:ALA:HB2 | 1:A:59:ILE:HB | 8 | 0.16 |
| (1,4) | 1:A:4:ALA:HB3 | 1:A:59:ILE:HB | 8 | 0.16 |
| (1,384) | 1:A:67:CYS:HA | 1:A:69:VAL:H | 10 | 0.16 |
| (1,344) | 1:A:61:ILE:H | 1:A:63:GLN:HG2 | 13 | 0.16 |
| (1,344) | 1:A:61:ILE:H | 1:A:63:GLN:HG3 | 13 | 0.16 |
| (1,32) | 1:A:15:ALA:H | 1:A:17:ASP:H | 7 | 0.16 |
| (1,315) | 1:A:58:VAL:HA | 1:A:61:ILE:HB | 13 | 0.16 |
| (1,304) | 1:A:57:ARG:H | 1:A:59:ILE:H | 3 | 0.16 |
| (1,292) | 1:A:55:ASN:H | 1:A:58:VAL:H | 7 | 0.16 |
| (1,292) | 1:A:55:ASN:H | 1:A:58:VAL:H | 11 | 0.16 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG21 | 1:A:53:MET:HB2 | 13 | 0.16 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG21 | 1:A:53:MET:HB3 | 13 | 0.16 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG22 | 1:A:53:MET:HB2 | 13 | 0.16 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG22 | 1:A:53:MET:HB3 | 13 | 0.16 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG23 | 1:A:53:MET:HB2 | 13 | 0.16 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG23 | 1:A:53:MET:HB3 | 13 | 0.16 |
| (1,272) | 1:A:49:PRO:HG2 | 1:A:50:ILE:HA | 5 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,269) | 1:A:48:LEU:HG | 1:A:215:THR:HG21 | 8 | 0.16 |
| (1,269) | 1:A:48:LEU:HG | 1:A:215:THR:HG22 | 8 | 0.16 |
| (1,269) | 1:A:48:LEU:HG | 1:A:215:THR:HG23 | 8 | 0.16 |
| (1,267) | 1:A:48:LEU:HB2 | 1:A:58:VAL:HA | 3 | 0.16 |
| (1,267) | 1:A:48:LEU:HB3 | 1:A:58:VAL:HA | 3 | 0.16 |
| (1,248) | 1:A:46:PHE:HA | 1:A:48:LEU:H | 2 | 0.16 |
| (1,246) | 1:A:46:PHE:H | 1:A:214:PRO:HG2 | 15 | 0.16 |
| (1,246) | 1:A:46:PHE:H | 1:A:214:PRO:HG3 | 15 | 0.16 |
| (1,230) | 1:A:45:PHE:H | 1:A:45:PHE:HD1 | 7 | 0.16 |
| (1,230) | 1:A:45:PHE:H | 1:A:45:PHE:HD2 | 7 | 0.16 |
| (1,230) | 1:A:45:PHE:H | 1:A:45:PHE:HD1 | 8 | 0.16 |
| (1,230) | 1:A:45:PHE:H | 1:A:45:PHE:HD2 | 8 | 0.16 |
| (1,230) | 1:A:45:PHE:H | 1:A:45:PHE:HD1 | 9 | 0.16 |
| (1,230) | 1:A:45:PHE:H | 1:A:45:PHE:HD2 | 9 | 0.16 |
| (1,230) | 1:A:45:PHE:H | 1:A:45:PHE:HD1 | 15 | 0.16 |
| (1,230) | 1:A:45:PHE:H | 1:A:45:PHE:HD2 | 15 | 0.16 |
| (1,145) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:39:LEU:H | 15 | 0.16 |
| (1,1360) | 1:A:211:VAL:H | 1:A:213:TYR:H | 4 | 0.16 |
| (1,1307) | 1:A:202:MET:H | 1:A:202:MET:HE1 | 1 | 0.16 |
| (1,1307) | 1:A:202:MET:H | 1:A:202:MET:HE2 | 1 | 0.16 |
| (1,1307) | 1:A:202:MET:H | 1:A:202:MET:HE3 | 1 | 0.16 |
| (1,1305) | 1:A:201:GLY:H | 1:A:202:MET:HB2 | 6 | 0.16 |
| (1,1305) | 1:A:201:GLY:H | 1:A:202:MET:HB3 | 6 | 0.16 |
| (1,129) | 1:A:34:SER:HA | 1:A:36:GLU:H | 11 | 0.16 |
| (1,1222) | 1:A:184:LEU:HA | 1:A:185:GLY:H | 15 | 0.16 |
| (1,1198) | 1:A:178:TRP:HZ2 | 1:A:186:ILE:HB | 10 | 0.16 |
| (1,1198) | 1:A:178:TRP:HZ2 | 1:A:186:ILE:HB | 15 | 0.16 |
| (1,1163) | 1:A:173:ASP:H | 1:A:178:TRP:HE1 | 6 | 0.16 |
| (1,1160) | 1:A:173:ASP:H | 1:A:174:GLU:H | 15 | 0.16 |
| (1,11) | 1:A:10:LEU:H | 1:A:13:GLU:H | 1 | 0.16 |
| (1,1080) | 1:A:158:HIS:H | 1:A:158:HIS:HE1 | 16 | 0.16 |
| (1,108) | 1:A:25:TYR:HB3 | 1:A:26:ASP:HA | 2 | 0.16 |
| (1,108) | 1:A:25:TYR:HB3 | 1:A:26:ASP:HA | 13 | 0.16 |
| (1,107) | 1:A:25:TYR:HA | 1:A:25:TYR:HE1 | 11 | 0.16 |
| (1,107) | 1:A:25:TYR:HA | 1:A:25:TYR:HE2 | 11 | 0.16 |
| (1,1058) | 1:A:156:LEU:HB2 | 1:A:178:TRP:HH2 | 8 | 0.16 |
| (1,1058) | 1:A:156:LEU:HB3 | 1:A:178:TRP:HH2 | 8 | 0.16 |
| (1,1054) | 1:A:155:THR:HG21 | 1:A:158:HIS:HA | 14 | 0.16 |
| (1,1054) | 1:A:155:THR:HG22 | 1:A:158:HIS:HA | 14 | 0.16 |
| (1,1054) | 1:A:155:THR:HG23 | 1:A:158:HIS:HA | 14 | 0.16 |
| (1,1030) | 1:A:147:TYR:HA | 1:A:147:TYR:HE1 | 6 | 0.16 |
| (1,1030) | 1:A:147:TYR:HA | 1:A:147:TYR:HE2 | 6 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,103) | 1:A:24:LEU:HA | 1:A:70:PRO:HB2 | 16 | 0.16 |
| (1,103) | 1:A:24:LEU:HA | 1:A:70:PRO:HB3 | 16 | 0.16 |
| (1,1024) | 1:A:143:HIS:HE1 | 1:A:160:PHE:HE1 | 10 | 0.16 |
| (1,1024) | 1:A:143:HIS:HE1 | 1:A:160:PHE:HE2 | 10 | 0.16 |
| (1,1022) | 1:A:143:HIS:H | 1:A:145:ASP:H | 14 | 0.16 |
| (1,1022) | 1:A:143:HIS:H | 1:A:145:ASP:H | 14 | 0.16 |
| (8,2) | 1:A:35:LEU:H | 1:A:39:LEU:HD21 | 16 | 0.15 |
| (8,2) | 1:A:35:LEU:H | 1:A:39:LEU:HD22 | 16 | 0.15 |
| (8,2) | 1:A:35:LEU:H | 1:A:39:LEU:HD23 | 16 | 0.15 |
| (7,440) | 1:A:211:VAL:HG21 | 1:A:226:LEU:HD21 | 14 | 0.15 |
| (7,440) | 1:A:211:VAL:HG21 | 1:A:226:LEU:HD22 | 14 | 0.15 |
| (7,440) | 1:A:211:VAL:HG21 | 1:A:226:LEU:HD23 | 14 | 0.15 |
| (7,440) | 1:A:211:VAL:HG22 | 1:A:226:LEU:HD21 | 14 | 0.15 |
| (7,440) | 1:A:211:VAL:HG22 | 1:A:226:LEU:HD22 | 14 | 0.15 |
| (7,440) | 1:A:211:VAL:HG22 | 1:A:226:LEU:HD23 | 14 | 0.15 |
| (7,440) | 1:A:211:VAL:HG23 | 1:A:226:LEU:HD21 | 14 | 0.15 |
| (7,440) | 1:A:211:VAL:HG23 | 1:A:226:LEU:HD22 | 14 | 0.15 |
| (7,440) | 1:A:211:VAL:HG23 | 1:A:226:LEU:HD23 | 14 | 0.15 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:211:VAL:HG11 | 15 | 0.15 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:211:VAL:HG12 | 15 | 0.15 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:211:VAL:HG13 | 15 | 0.15 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:211:VAL:HG11 | 15 | 0.15 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:211:VAL:HG12 | 15 | 0.15 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:211:VAL:HG13 | 15 | 0.15 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:211:VAL:HG11 | 15 | 0.15 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:211:VAL:HG12 | 15 | 0.15 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:211:VAL:HG13 | 15 | 0.15 |
| (7,428) | 1:A:198:HIS:H | 1:A:200:LEU:HG | 7 | 0.15 |
| (7,424) | 1:A:196:LEU:HD11 | 1:A:197:GLY:H | 6 | 0.15 |
| (7,424) | 1:A:196:LEU:HD12 | 1:A:197:GLY:H | 6 | 0.15 |
| (7,424) | 1:A:196:LEU:HD13 | 1:A:197:GLY:H | 6 | 0.15 |
| (7,424) | 1:A:196:LEU:HD11 | 1:A:197:GLY:H | 10 | 0.15 |
| (7,424) | 1:A:196:LEU:HD12 | 1:A:197:GLY:H | 10 | 0.15 |
| (7,424) | 1:A:196:LEU:HD13 | 1:A:197:GLY:H | 10 | 0.15 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD11 | 1:A:58:VAL:HB | 5 | 0.15 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD12 | 1:A:58:VAL:HB | 5 | 0.15 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD13 | 1:A:58:VAL:HB | 5 | 0.15 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD11 | 1:A:58:VAL:HB | 12 | 0.15 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD12 | 1:A:58:VAL:HB | 12 | 0.15 |
| (7,42) | 1:A:48:LEU:HD13 | 1:A:58:VAL:HB | 12 | 0.15 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD11 | 3 | 0.15 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD12 | 3 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD13 | 3 | 0.15 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD11 | 3 | 0.15 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD12 | 3 | 0.15 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD13 | 3 | 0.15 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD11 | 3 | 0.15 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD12 | 3 | 0.15 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD13 | 3 | 0.15 |
| (7,301) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:196:LEU:HD11 | 9 | 0.15 |
| (7,301) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:196:LEU:HD12 | 9 | 0.15 |
| (7,301) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:196:LEU:HD13 | 9 | 0.15 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:136:ILE:HD11 | 7 | 0.15 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:136:ILE:HD12 | 7 | 0.15 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:136:ILE:HD13 | 7 | 0.15 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:136:ILE:HD11 | 7 | 0.15 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:136:ILE:HD12 | 7 | 0.15 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:136:ILE:HD13 | 7 | 0.15 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:136:ILE:HD11 | 7 | 0.15 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:136:ILE:HD12 | 7 | 0.15 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:136:ILE:HD13 | 7 | 0.15 |
| (7,242) | 1:A:102:HIS:HD2 | 1:A:105:VAL:HG11 | 9 | 0.15 |
| (7,242) | 1:A:102:HIS:HD2 | 1:A:105:VAL:HG12 | 9 | 0.15 |
| (7,242) | 1:A:102:HIS:HD2 | 1:A:105:VAL:HG13 | 9 | 0.15 |
| (7,241) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG11 | 8 | 0.15 |
| (7,241) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG12 | 8 | 0.15 |
| (7,241) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG13 | 8 | 0.15 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG11 | 10 | 0.15 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG12 | 10 | 0.15 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG13 | 10 | 0.15 |
| (7,216) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:138:PHE:H | 4 | 0.15 |
| (7,216) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:138:PHE:H | 4 | 0.15 |
| (7,216) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:138:PHE:H | 4 | 0.15 |
| (7,207) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:95:SER:H | 1 | 0.15 |
| (7,207) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:95:SER:H | 1 | 0.15 |
| (7,207) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:95:SER:H | 1 | 0.15 |
| (7,207) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:95:SER:H | 15 | 0.15 |
| (7,207) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:95:SER:H | 15 | 0.15 |
| (7,207) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:95:SER:H | 15 | 0.15 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG21 | 5 | 0.15 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG22 | 5 | 0.15 |
| (7,181) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:127:VAL:HG23 | 5 | 0.15 |
| (6,1) | 1:A:155:THR:HG1 | 1:A:154:ASN:OD1 | 5 | 0.15 |
| (4,19) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:204:HIS:NE2 | 15 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (4,16) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:145:ASP:OD2 | 5 | 0.15 |
| (1,994) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:139:ALA:H | 3 | 0.15 |
| (1,994) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:139:ALA:H | 3 | 0.15 |
| (1,994) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:139:ALA:H | 5 | 0.15 |
| (1,994) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:139:ALA:H | 5 | 0.15 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD11 | 1:A:137:GLY:H | 12 | 0.15 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD12 | 1:A:137:GLY:H | 12 | 0.15 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD13 | 1:A:137:GLY:H | 12 | 0.15 |
| (1,97) | 1:A:23:TYR:HB2 | 1:A:24:LEU:H | 8 | 0.15 |
| (1,97) | 1:A:23:TYR:HB3 | 1:A:24:LEU:H | 8 | 0.15 |
| (1,945) | 1:A:134:ILE:H | 1:A:136:ILE:HD11 | 4 | 0.15 |
| (1,945) | 1:A:134:ILE:H | 1:A:136:ILE:HD12 | 4 | 0.15 |
| (1,945) | 1:A:134:ILE:H | 1:A:136:ILE:HD13 | 4 | 0.15 |
| (1,802) | 1:A:116:TRP:HE1 | 1:A:202:MET:HB2 | 1 | 0.15 |
| (1,802) | 1:A:116:TRP:HE1 | 1:A:202:MET:HB3 | 1 | 0.15 |
| (1,801) | 1:A:116:TRP:HE1 | 1:A:198:HIS:H | 14 | 0.15 |
| (1,79) | 1:A:20:LYS:HG2 | 1:A:21:ARG:H | 1 | 0.15 |
| (1,79) | 1:A:20:LYS:HG3 | 1:A:21:ARG:H | 1 | 0.15 |
| (1,785) | 1:A:116:TRP:H | 1:A:118:LYS:H | 4 | 0.15 |
| (1,777) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:224:PHE:HB2 | 12 | 0.15 |
| (1,777) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:224:PHE:HB3 | 12 | 0.15 |
| (1,777) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:224:PHE:HB2 | 12 | 0.15 |
| (1,777) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:224:PHE:HB3 | 12 | 0.15 |
| (1,777) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:224:PHE:HB2 | 12 | 0.15 |
| (1,777) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:224:PHE:HB3 | 12 | 0.15 |
| (1,75) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:22:PHE:H | 4 | 0.15 |
| (1,75) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:22:PHE:H | 10 | 0.15 |
| (1,730) | 1:A:110:SER:H | 1:A:112:ALA:H | 9 | 0.15 |
| (1,721) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:188:PHE:HE1 | 1 | 0.15 |
| (1,721) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:188:PHE:HE2 | 1 | 0.15 |
| (1,694) | 1:A:105:VAL:HA | 1:A:188:PHE:HE1 | 2 | 0.15 |
| (1,694) | 1:A:105:VAL:HA | 1:A:188:PHE:HE2 | 2 | 0.15 |
| (1,693) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:107:ARG:H | 2 | 0.15 |
| (1,633) | 1:A:98:ARG:HA | 1:A:100:LEU:H | 16 | 0.15 |
| (1,610) | 1:A:96:TYR:HB2 | 1:A:102:HIS:HD2 | 12 | 0.15 |
| (1,610) | 1:A:96:TYR:HB2 | 1:A:102:HIS:HD2 | 16 | 0.15 |
| (1,568) | 1:A:92:ARG:HE | 1:A:127:VAL:HB | 13 | 0.15 |
| (1,561) | 1:A:92:ARG:HD2 | 1:A:132:ALA:H | 2 | 0.15 |
| (1,561) | 1:A:92:ARG:HD3 | 1:A:132:ALA:H | 2 | 0.15 |
| (1,56) | 1:A:18:TYR:HB2 | 1:A:20:LYS:H | 16 | 0.15 |
| (1,56) | 1:A:18:TYR:HB3 | 1:A:20:LYS:H | 16 | 0.15 |
| (1,556) | 1:A:92:ARG:HB3 | 1:A:131:THR:HA | 12 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,519) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:134:ILE:HG21 | 16 | 0.15 |
| (1,519) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:134:ILE:HG22 | 16 | 0.15 |
| (1,519) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:134:ILE:HG23 | 16 | 0.15 |
| (1,486) | 1:A:89:VAL:H | 1:A:123:HIS:HD2 | 4 | 0.15 |
| (1,473) | 1:A:85:THR:HA | 1:A:86:SER:H | 4 | 0.15 |
| (1,468) | 1:A:84:TRP:HE1 | 1:A:200:LEU:H | 9 | 0.15 |
| (1,461) | 1:A:84:TRP:H | 1:A:234:ILE:HD11 | 9 | 0.15 |
| (1,461) | 1:A:84:TRP:H | 1:A:234:ILE:HD12 | 9 | 0.15 |
| (1,461) | 1:A:84:TRP:H | 1:A:234:ILE:HD13 | 9 | 0.15 |
| (1,443) | 1:A:82:PRO:HD2 | 1:A:83:LYS:HG2 | 3 | 0.15 |
| (1,443) | 1:A:82:PRO:HD2 | 1:A:83:LYS:HG3 | 3 | 0.15 |
| (1,44) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:18:TYR:H | 10 | 0.15 |
| (1,434) | 1:A:78:PHE:H | 1:A:78:PHE:HD1 | 11 | 0.15 |
| (1,434) | 1:A:78:PHE:H | 1:A:78:PHE:HD2 | 11 | 0.15 |
| (1,420) | 1:A:73:ALA:H | 1:A:74:GLU:H | 6 | 0.15 |
| (1,420) | 1:A:73:ALA:H | 1:A:74:GLU:H | 16 | 0.15 |
| (1,412) | 1:A:70:PRO:HD2 | 1:A:147:TYR:HD1 | 4 | 0.15 |
| (1,412) | 1:A:70:PRO:HD2 | 1:A:147:TYR:HD2 | 4 | 0.15 |
| (1,412) | 1:A:70:PRO:HD3 | 1:A:147:TYR:HD1 | 4 | 0.15 |
| (1,412) | 1:A:70:PRO:HD3 | 1:A:147:TYR:HD2 | 4 | 0.15 |
| (1,412) | 1:A:70:PRO:HD2 | 1:A:147:TYR:HD1 | 15 | 0.15 |
| (1,412) | 1:A:70:PRO:HD2 | 1:A:147:TYR:HD2 | 15 | 0.15 |
| (1,412) | 1:A:70:PRO:HD3 | 1:A:147:TYR:HD1 | 15 | 0.15 |
| (1,412) | 1:A:70:PRO:HD3 | 1:A:147:TYR:HD2 | 15 | 0.15 |
| (1,402) | 1:A:68:GLY:H | 1:A:198:HIS:HD2 | 9 | 0.15 |
| (1,371) | 1:A:63:GLN:HB2 | 1:A:64:LYS:H | 14 | 0.15 |
| (1,371) | 1:A:63:GLN:HB3 | 1:A:64:LYS:H | 14 | 0.15 |
| (1,314) | 1:A:58:VAL:H | 1:A:60:GLU:H | 16 | 0.15 |
| (1,267) | 1:A:48:LEU:HB2 | 1:A:58:VAL:HA | 9 | 0.15 |
| (1,267) | 1:A:48:LEU:HB3 | 1:A:58:VAL:HA | 9 | 0.15 |
| (1,248) | 1:A:46:PHE:HA | 1:A:48:LEU:H | 14 | 0.15 |
| (1,230) | 1:A:45:PHE:H | 1:A:45:PHE:HD1 | 5 | 0.15 |
| (1,230) | 1:A:45:PHE:H | 1:A:45:PHE:HD2 | 5 | 0.15 |
| (1,213) | 1:A:43:GLN:HA | 1:A:48:LEU:H | 11 | 0.15 |
| (1,212) | 1:A:43:GLN:H | 1:A:45:PHE:H | 11 | 0.15 |
| (1,196) | 1:A:42:MET:HE1 | 1:A:62:MET:HB2 | 12 | 0.15 |
| (1,196) | 1:A:42:MET:HE1 | 1:A:62:MET:HB3 | 12 | 0.15 |
| (1,196) | 1:A:42:MET:HE2 | 1:A:62:MET:HB2 | 12 | 0.15 |
| (1,196) | 1:A:42:MET:HE2 | 1:A:62:MET:HB3 | 12 | 0.15 |
| (1,196) | 1:A:42:MET:HE3 | 1:A:62:MET:HB2 | 12 | 0.15 |
| (1,196) | 1:A:42:MET:HE3 | 1:A:62:MET:HB3 | 12 | 0.15 |
| (1,183) | 1:A:42:MET:H | 1:A:44:LYS:H | 16 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,169) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:52:GLY:HA2 | 3 | 0.15 |
| (1,156) | 1:A:38:LYS:HA | 1:A:41:GLU:HG3 | 14 | 0.15 |
| (1,1485) | 1:A:237:LEU:HG | 1:A:238:TYR:H | 13 | 0.15 |
| (1,1440) | 1:A:233:GLY:HA2 | 1:A:235:GLN:H | 4 | 0.15 |
| (1,1405) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:H | 8 | 0.15 |
| (1,1405) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:232:LYS:H | 8 | 0.15 |
| (1,13) | 1:A:11:GLN:H | 1:A:11:GLN:HE21 | 10 | 0.15 |
| (1,13) | 1:A:11:GLN:H | 1:A:11:GLN:HE22 | 10 | 0.15 |
| (1,1295) | 1:A:199:SER:H | 1:A:201:GLY:H | 1 | 0.15 |
| (1,1290) | 1:A:198:HIS:HE1 | 1:A:204:HIS:H | 10 | 0.15 |
| (1,1222) | 1:A:184:LEU:HA | 1:A:185:GLY:H | 16 | 0.15 |
| (1,1176) | 1:A:176:GLU:H | 1:A:177:ARG:H | 11 | 0.15 |
| (1,1160) | 1:A:173:ASP:H | 1:A:174:GLU:H | 11 | 0.15 |
| (1,1148) | 1:A:172:PHE:HB2 | 1:A:178:TRP:HZ2 | 12 | 0.15 |
| (1,1135) | 1:A:171:HIS:H | 1:A:172:PHE:HD1 | 11 | 0.15 |
| (1,1135) | 1:A:171:HIS:H | 1:A:172:PHE:HD2 | 11 | 0.15 |
| (1,108) | 1:A:25:TYR:HB3 | 1:A:26:ASP:HA | 10 | 0.15 |
| (1,108) | 1:A:25:TYR:HB3 | 1:A:26:ASP:HA | 11 | 0.15 |
| (1,1037) | 1:A:149:PHE:HB3 | 1:A:150:ASP:H | 5 | 0.15 |
| (1,1030) | 1:A:147:TYR:HA | 1:A:147:TYR:HE1 | 11 | 0.15 |
| (1,1030) | 1:A:147:TYR:HA | 1:A:147:TYR:HE2 | 11 | 0.15 |
| (1,1024) | 1:A:143:HIS:HE1 | 1:A:160:PHE:HE1 | 15 | 0.15 |
| (1,1024) | 1:A:143:HIS:HE1 | 1:A:160:PHE:HE2 | 15 | 0.15 |
| (7,87) | 1:A:69:VAL:HG21 | 1:A:158:HIS:HB3 | 13 | 0.14 |
| (7,87) | 1:A:69:VAL:HG22 | 1:A:158:HIS:HB3 | 13 | 0.14 |
| (7,87) | 1:A:69:VAL:HG23 | 1:A:158:HIS:HB3 | 13 | 0.14 |
| (7,441) | 1:A:211:VAL:HG21 | 1:A:227:SER:H | 10 | 0.14 |
| (7,441) | 1:A:211:VAL:HG22 | 1:A:227:SER:H | 10 | 0.14 |
| (7,441) | 1:A:211:VAL:HG23 | 1:A:227:SER:H | 10 | 0.14 |
| (7,440) | 1:A:211:VAL:HG21 | 1:A:226:LEU:HD21 | 13 | 0.14 |
| (7,440) | 1:A:211:VAL:HG21 | 1:A:226:LEU:HD22 | 13 | 0.14 |
| (7,440) | 1:A:211:VAL:HG21 | 1:A:226:LEU:HD23 | 13 | 0.14 |
| (7,440) | 1:A:211:VAL:HG22 | 1:A:226:LEU:HD21 | 13 | 0.14 |
| (7,440) | 1:A:211:VAL:HG22 | 1:A:226:LEU:HD22 | 13 | 0.14 |
| (7,440) | 1:A:211:VAL:HG22 | 1:A:226:LEU:HD23 | 13 | 0.14 |
| (7,440) | 1:A:211:VAL:HG23 | 1:A:226:LEU:HD21 | 13 | 0.14 |
| (7,440) | 1:A:211:VAL:HG23 | 1:A:226:LEU:HD22 | 13 | 0.14 |
| (7,440) | 1:A:211:VAL:HG23 | 1:A:226:LEU:HD23 | 13 | 0.14 |
| (7,432) | 1:A:200:LEU:HD11 | 1:A:202:MET:HE1 | 2 | 0.14 |
| (7,432) | 1:A:200:LEU:HD11 | 1:A:202:MET:HE2 | 2 | 0.14 |
| (7,432) | 1:A:200:LEU:HD11 | 1:A:202:MET:HE3 | 2 | 0.14 |
| (7,432) | 1:A:200:LEU:HD12 | 1:A:202:MET:HE1 | 2 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,432) | 1:A:200:LEU:HD12 | 1:A:202:MET:HE2 | 2 | 0.14 |
| (7,432) | 1:A:200:LEU:HD12 | 1:A:202:MET:HE3 | 2 | 0.14 |
| (7,432) | 1:A:200:LEU:HD13 | 1:A:202:MET:HE1 | 2 | 0.14 |
| (7,432) | 1:A:200:LEU:HD13 | 1:A:202:MET:HE2 | 2 | 0.14 |
| (7,432) | 1:A:200:LEU:HD13 | 1:A:202:MET:HE3 | 2 | 0.14 |
| (7,428) | 1:A:198:HIS:H | 1:A:200:LEU:HG | 11 | 0.14 |
| (7,424) | 1:A:196:LEU:HD11 | 1:A:197:GLY:H | 5 | 0.14 |
| (7,424) | 1:A:196:LEU:HD12 | 1:A:197:GLY:H | 5 | 0.14 |
| (7,424) | 1:A:196:LEU:HD13 | 1:A:197:GLY:H | 5 | 0.14 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD11 | 1:A:186:ILE:H | 13 | 0.14 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD12 | 1:A:186:ILE:H | 13 | 0.14 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD13 | 1:A:186:ILE:H | 13 | 0.14 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG21 | 7 | 0.14 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG22 | 7 | 0.14 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG23 | 7 | 0.14 |
| (7,332) | 1:A:116:TRP:HB2 | 1:A:226:LEU:HD11 | 6 | 0.14 |
| (7,332) | 1:A:116:TRP:HB2 | 1:A:226:LEU:HD12 | 6 | 0.14 |
| (7,332) | 1:A:116:TRP:HB2 | 1:A:226:LEU:HD13 | 6 | 0.14 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD11 | 1 | 0.14 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD12 | 1 | 0.14 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:196:LEU:HD13 | 1 | 0.14 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD11 | 1 | 0.14 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD12 | 1 | 0.14 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:196:LEU:HD13 | 1 | 0.14 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD11 | 1 | 0.14 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD12 | 1 | 0.14 |
| (7,326) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:196:LEU:HD13 | 1 | 0.14 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:134:ILE:HD11 | 8 | 0.14 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:134:ILE:HD12 | 8 | 0.14 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:134:ILE:HD13 | 8 | 0.14 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:134:ILE:HD11 | 8 | 0.14 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:134:ILE:HD12 | 8 | 0.14 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:134:ILE:HD13 | 8 | 0.14 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:134:ILE:HD11 | 8 | 0.14 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:134:ILE:HD12 | 8 | 0.14 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:134:ILE:HD13 | 8 | 0.14 |
| (7,301) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:196:LEU:HD11 | 12 | 0.14 |
| (7,301) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:196:LEU:HD12 | 12 | 0.14 |
| (7,301) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:196:LEU:HD13 | 12 | 0.14 |
| (7,256) | 1:A:107:ARG:HG2 | 1:A:108:LEU:HD21 | 3 | 0.14 |
| (7,256) | 1:A:107:ARG:HG2 | 1:A:108:LEU:HD22 | 3 | 0.14 |
| (7,256) | 1:A:107:ARG:HG2 | 1:A:108:LEU:HD23 | 3 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG11 | 7 | 0.14 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG12 | 7 | 0.14 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG13 | 7 | 0.14 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG2 | 8 | 0.14 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG3 | 8 | 0.14 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG2 | 8 | 0.14 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG3 | 8 | 0.14 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG2 | 8 | 0.14 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG3 | 8 | 0.14 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG2 | 14 | 0.14 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:135:MET:HG3 | 14 | 0.14 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG2 | 14 | 0.14 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:135:MET:HG3 | 14 | 0.14 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG2 | 14 | 0.14 |
| (7,213) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:135:MET:HG3 | 14 | 0.14 |
| (7,207) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:95:SER:H | 2 | 0.14 |
| (7,207) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:95:SER:H | 2 | 0.14 |
| (7,207) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:95:SER:H | 2 | 0.14 |
| (7,207) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:95:SER:H | 12 | 0.14 |
| (7,207) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:95:SER:H | 12 | 0.14 |
| (7,207) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:95:SER:H | 12 | 0.14 |
| (7,159) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:90:THR:H | 9 | 0.14 |
| (7,159) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:90:THR:H | 9 | 0.14 |
| (7,159) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:90:THR:H | 9 | 0.14 |
| (7,15) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:72:VAL:HG21 | 8 | 0.14 |
| (7,15) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:72:VAL:HG22 | 8 | 0.14 |
| (7,15) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:72:VAL:HG23 | 8 | 0.14 |
| (7,109) | 1:A:84:TRP:HD1 | 1:A:200:LEU:HD21 | 8 | 0.14 |
| (7,109) | 1:A:84:TRP:HD1 | 1:A:200:LEU:HD22 | 8 | 0.14 |
| (7,109) | 1:A:84:TRP:HD1 | 1:A:200:LEU:HD23 | 8 | 0.14 |
| (6,1) | 1:A:155:THR:HG1 | 1:A:154:ASN:OD1 | 3 | 0.14 |
| (4,10) | 3:A:302:CA:CA | 1:A:150:ASP:OD1 | 6 | 0.14 |
| (1,994) | 1:A:138:PHE:HD1 | 1:A:139:ALA:H | 13 | 0.14 |
| (1,994) | 1:A:138:PHE:HD2 | 1:A:139:ALA:H | 13 | 0.14 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD11 | 1:A:137:GLY:H | 16 | 0.14 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD12 | 1:A:137:GLY:H | 16 | 0.14 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD13 | 1:A:137:GLY:H | 16 | 0.14 |
| (1,959) | 1:A:135:MET:H | 1:A:136:ILE:H | 16 | 0.14 |
| (1,920) | 1:A:129:TRP:HB2 | 1:A:130:GLY:H | 11 | 0.14 |
| (1,920) | 1:A:129:TRP:HB3 | 1:A:130:GLY:H | 11 | 0.14 |
| (1,901) | 1:A:126:LYS:HD2 | 1:A:127:VAL:HB | 1 | 0.14 |
| (1,901) | 1:A:126:LYS:HD3 | 1:A:127:VAL:HB | 1 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,877) | 1:A:122:LEU:H | 1:A:123:HIS:H | 2 | 0.14 |
| (1,802) | 1:A:116:TRP:HE1 | 1:A:202:MET:HB2 | 5 | 0.14 |
| (1,802) | 1:A:116:TRP:HE1 | 1:A:202:MET:HB3 | 5 | 0.14 |
| (1,801) | 1:A:116:TRP:HE1 | 1:A:198:HIS:H | 15 | 0.14 |
| (1,757) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:115:MET:HB2 | 5 | 0.14 |
| (1,75) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:22:PHE:H | 1 | 0.14 |
| (1,75) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:22:PHE:H | 3 | 0.14 |
| (1,75) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:22:PHE:H | 5 | 0.14 |
| (1,670) | 1:A:103:ILE:HD11 | 1:A:104:THR:H | 15 | 0.14 |
| (1,670) | 1:A:103:ILE:HD12 | 1:A:104:THR:H | 15 | 0.14 |
| (1,670) | 1:A:103:ILE:HD13 | 1:A:104:THR:H | 15 | 0.14 |
| (1,610) | 1:A:96:TYR:HB2 | 1:A:102:HIS:HD2 | 8 | 0.14 |
| (1,610) | 1:A:96:TYR:HB2 | 1:A:102:HIS:HD2 | 15 | 0.14 |
| (1,603) | 1:A:95:SER:HB2 | 1:A:138:PHE:HD1 | 10 | 0.14 |
| (1,603) | 1:A:95:SER:HB2 | 1:A:138:PHE:HD2 | 10 | 0.14 |
| (1,603) | 1:A:95:SER:HB3 | 1:A:138:PHE:HD1 | 10 | 0.14 |
| (1,603) | 1:A:95:SER:HB3 | 1:A:138:PHE:HD2 | 10 | 0.14 |
| (1,561) | 1:A:92:ARG:HD2 | 1:A:132:ALA:H | 1 | 0.14 |
| (1,561) | 1:A:92:ARG:HD3 | 1:A:132:ALA:H | 1 | 0.14 |
| (1,547) | 1:A:92:ARG:HA | 1:A:92:ARG:HE | 3 | 0.14 |
| (1,464) | 1:A:84:TRP:HB2 | 1:A:122:LEU:HG | 10 | 0.14 |
| (1,464) | 1:A:84:TRP:HB3 | 1:A:122:LEU:HG | 10 | 0.14 |
| (1,44) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:18:TYR:H | 15 | 0.14 |
| (1,395) | 1:A:68:GLY:H | 1:A:155:THR:HA | 7 | 0.14 |
| (1,35) | 1:A:15:ALA:HA | 1:A:19:LEU:H | 5 | 0.14 |
| (1,333) | 1:A:59:ILE:HG21 | 1:A:63:GLN:HE21 | 13 | 0.14 |
| (1,333) | 1:A:59:ILE:HG21 | 1:A:63:GLN:HE22 | 13 | 0.14 |
| (1,333) | 1:A:59:ILE:HG22 | 1:A:63:GLN:HE21 | 13 | 0.14 |
| (1,333) | 1:A:59:ILE:HG22 | 1:A:63:GLN:HE22 | 13 | 0.14 |
| (1,333) | 1:A:59:ILE:HG23 | 1:A:63:GLN:HE21 | 13 | 0.14 |
| (1,333) | 1:A:59:ILE:HG23 | 1:A:63:GLN:HE22 | 13 | 0.14 |
| (1,31) | 1:A:15:ALA:H | 1:A:16:GLN:H | 14 | 0.14 |
| (1,308) | 1:A:57:ARG:HD2 | 1:A:58:VAL:H | 1 | 0.14 |
| (1,308) | 1:A:57:ARG:HD3 | 1:A:58:VAL:H | 1 | 0.14 |
| (1,288) | 1:A:52:GLY:H | 1:A:53:MET:HG2 | 3 | 0.14 |
| (1,288) | 1:A:52:GLY:H | 1:A:53:MET:HG3 | 3 | 0.14 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG21 | 1:A:53:MET:HB2 | 5 | 0.14 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG21 | 1:A:53:MET:HB3 | 5 | 0.14 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG22 | 1:A:53:MET:HB2 | 5 | 0.14 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG22 | 1:A:53:MET:HB3 | 5 | 0.14 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG23 | 1:A:53:MET:HB2 | 5 | 0.14 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG23 | 1:A:53:MET:HB3 | 5 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG21 | 1:A:53:MET:HB2 | 16 | 0.14 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG21 | 1:A:53:MET:HB3 | 16 | 0.14 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG22 | 1:A:53:MET:HB2 | 16 | 0.14 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG22 | 1:A:53:MET:HB3 | 16 | 0.14 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG23 | 1:A:53:MET:HB2 | 16 | 0.14 |
| (1,282) | 1:A:50:ILE:HG23 | 1:A:53:MET:HB3 | 16 | 0.14 |
| (1,277) | 1:A:50:ILE:H | 1:A:51:THR:H | 3 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:49:PRO:HB2 | 1:A:50:ILE:HG21 | 5 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:49:PRO:HB2 | 1:A:50:ILE:HG22 | 5 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:49:PRO:HB2 | 1:A:50:ILE:HG23 | 5 | 0.14 |
| (1,269) | 1:A:48:LEU:HG | 1:A:215:THR:HG21 | 9 | 0.14 |
| (1,269) | 1:A:48:LEU:HG | 1:A:215:THR:HG22 | 9 | 0.14 |
| (1,269) | 1:A:48:LEU:HG | 1:A:215:THR:HG23 | 9 | 0.14 |
| (1,246) | 1:A:46:PHE:H | 1:A:214:PRO:HG2 | 13 | 0.14 |
| (1,246) | 1:A:46:PHE:H | 1:A:214:PRO:HG3 | 13 | 0.14 |
| (1,239) | 1:A:45:PHE:HE1 | 1:A:214:PRO:HD3 | 6 | 0.14 |
| (1,239) | 1:A:45:PHE:HE2 | 1:A:214:PRO:HD3 | 6 | 0.14 |
| (1,22) | 1:A:13:GLU:H | 1:A:15:ALA:H | 2 | 0.14 |
| (1,217) | 1:A:43:GLN:HE22 | 1:A:52:GLY:H | 8 | 0.14 |
| (1,217) | 1:A:43:GLN:HE22 | 1:A:52:GLY:H | 8 | 0.14 |
| (1,177) | 1:A:41:GLU:HA | 1:A:43:GLN:H | 15 | 0.14 |
| (1,169) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:52:GLY:HA2 | 12 | 0.14 |
| (1,1485) | 1:A:237:LEU:HG | 1:A:238:TYR:H | 1 | 0.14 |
| (1,1485) | 1:A:237:LEU:HG | 1:A:238:TYR:H | 12 | 0.14 |
| (1,1482) | 1:A:237:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HD1 | 2 | 0.14 |
| (1,1482) | 1:A:237:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HD2 | 2 | 0.14 |
| (1,145) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:39:LEU:H | 2 | 0.14 |
| (1,1402) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HB | 5 | 0.14 |
| (1,1402) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HB | 9 | 0.14 |
| (1,1326) | 1:A:204:HIS:HA | 1:A:214:PRO:HD3 | 7 | 0.14 |
| (1,1311) | 1:A:202:MET:HA | 1:A:234:ILE:HD11 | 9 | 0.14 |
| (1,1311) | 1:A:202:MET:HA | 1:A:234:ILE:HD12 | 9 | 0.14 |
| (1,1311) | 1:A:202:MET:HA | 1:A:234:ILE:HD13 | 9 | 0.14 |
| (1,1308) | 1:A:202:MET:H | 1:A:234:ILE:HD11 | 4 | 0.14 |
| (1,1308) | 1:A:202:MET:H | 1:A:234:ILE:HD12 | 4 | 0.14 |
| (1,1308) | 1:A:202:MET:H | 1:A:234:ILE:HD13 | 4 | 0.14 |
| (1,1198) | 1:A:178:TRP:HZ2 | 1:A:186:ILE:HB | 7 | 0.14 |
| (1,1193) | 1:A:178:TRP:HE3 | 1:A:188:PHE:H | 9 | 0.14 |
| (1,1100) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:198:HIS:HB2 | 7 | 0.14 |
| (1,11) | 1:A:10:LEU:H | 1:A:13:GLU:H | 13 | 0.14 |
| (1,11) | 1:A:10:LEU:H | 1:A:13:GLU:H | 16 | 0.14 |
| (1,1035) | 1:A:149:PHE:HB2 | 1:A:150:ASP:H | 12 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1030) | 1:A:147:TYR:HA | 1:A:147:TYR:HE1 | 14 | 0.14 |
| (1,1030) | 1:A:147:TYR:HA | 1:A:147:TYR:HE2 | 14 | 0.14 |
| (1,1030) | 1:A:147:TYR:HA | 1:A:147:TYR:HE1 | 16 | 0.14 |
| (1,1030) | 1:A:147:TYR:HA | 1:A:147:TYR:HE2 | 16 | 0.14 |
| (1,1) | 1:A:2:GLN:HG2 | 1:A:3:GLU:H | 9 | 0.14 |
| (1,1) | 1:A:2:GLN:HG3 | 1:A:3:GLU:H | 9 | 0.14 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HD11 | 11 | 0.13 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HD12 | 11 | 0.13 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HD13 | 11 | 0.13 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HD11 | 11 | 0.13 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HD12 | 11 | 0.13 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HD13 | 11 | 0.13 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HD11 | 11 | 0.13 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HD12 | 11 | 0.13 |
| (8,5) | 1:A:202:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HD13 | 11 | 0.13 |
| (7,70) | 1:A:58:VAL:HA | 1:A:48:LEU:HD11 | 7 | 0.13 |
| (7,70) | 1:A:58:VAL:HA | 1:A:48:LEU:HD12 | 7 | 0.13 |
| (7,70) | 1:A:58:VAL:HA | 1:A:48:LEU:HD13 | 7 | 0.13 |
| (7,433) | 1:A:200:LEU:HD11 | 1:A:201:GLY:H | 3 | 0.13 |
| (7,433) | 1:A:200:LEU:HD12 | 1:A:201:GLY:H | 3 | 0.13 |
| (7,433) | 1:A:200:LEU:HD13 | 1:A:201:GLY:H | 3 | 0.13 |
| (7,428) | 1:A:198:HIS:H | 1:A:200:LEU:HG | 6 | 0.13 |
| (7,424) | 1:A:196:LEU:HD11 | 1:A:197:GLY:H | 3 | 0.13 |
| (7,424) | 1:A:196:LEU:HD12 | 1:A:197:GLY:H | 3 | 0.13 |
| (7,424) | 1:A:196:LEU:HD13 | 1:A:197:GLY:H | 3 | 0.13 |
| (7,424) | 1:A:196:LEU:HD11 | 1:A:197:GLY:H | 13 | 0.13 |
| (7,424) | 1:A:196:LEU:HD12 | 1:A:197:GLY:H | 13 | 0.13 |
| (7,424) | 1:A:196:LEU:HD13 | 1:A:197:GLY:H | 13 | 0.13 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:173:ASP:HB2 | 7 | 0.13 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:173:ASP:HB3 | 7 | 0.13 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:173:ASP:HB2 | 7 | 0.13 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:173:ASP:HB3 | 7 | 0.13 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:173:ASP:HB2 | 7 | 0.13 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:173:ASP:HB3 | 7 | 0.13 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD11 | 1:A:186:ILE:H | 3 | 0.13 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD12 | 1:A:186:ILE:H | 3 | 0.13 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD13 | 1:A:186:ILE:H | 3 | 0.13 |
| (7,373) | 1:A:128:VAL:HA | 1:A:127:VAL:HG21 | 16 | 0.13 |
| (7,373) | 1:A:128:VAL:HA | 1:A:127:VAL:HG22 | 16 | 0.13 |
| (7,373) | 1:A:128:VAL:HA | 1:A:127:VAL:HG23 | 16 | 0.13 |
| (7,329) | 1:A:116:TRP:H | 1:A:200:LEU:HD11 | 13 | 0.13 |
| (7,329) | 1:A:116:TRP:H | 1:A:200:LEU:HD12 | 13 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,329) | 1:A:116:TRP:H | 1:A:200:LEU:HD13 | 13 | 0.13 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:136:ILE:HD11 | 1 | 0.13 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:136:ILE:HD12 | 1 | 0.13 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:136:ILE:HD13 | 1 | 0.13 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:136:ILE:HD11 | 1 | 0.13 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:136:ILE:HD12 | 1 | 0.13 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:136:ILE:HD13 | 1 | 0.13 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:136:ILE:HD11 | 1 | 0.13 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:136:ILE:HD12 | 1 | 0.13 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:136:ILE:HD13 | 1 | 0.13 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:136:ILE:HD11 | 5 | 0.13 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:136:ILE:HD12 | 5 | 0.13 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:136:ILE:HD13 | 5 | 0.13 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:136:ILE:HD11 | 5 | 0.13 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:136:ILE:HD12 | 5 | 0.13 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:136:ILE:HD13 | 5 | 0.13 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:136:ILE:HD11 | 5 | 0.13 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:136:ILE:HD12 | 5 | 0.13 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:136:ILE:HD13 | 5 | 0.13 |
| (7,239) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG11 | 3 | 0.13 |
| (7,239) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG12 | 3 | 0.13 |
| (7,239) | 1:A:102:HIS:HA | 1:A:105:VAL:HG13 | 3 | 0.13 |
| (7,207) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:95:SER:H | 8 | 0.13 |
| (7,207) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:95:SER:H | 8 | 0.13 |
| (7,207) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:95:SER:H | 8 | 0.13 |
| (7,19) | 1:A:24:LEU:HD21 | 1:A:70:PRO:HG2 | 3 | 0.13 |
| (7,19) | 1:A:24:LEU:HD21 | 1:A:70:PRO:HG3 | 3 | 0.13 |
| (7,19) | 1:A:24:LEU:HD22 | 1:A:70:PRO:HG2 | 3 | 0.13 |
| (7,19) | 1:A:24:LEU:HD22 | 1:A:70:PRO:HG3 | 3 | 0.13 |
| (7,19) | 1:A:24:LEU:HD23 | 1:A:70:PRO:HG2 | 3 | 0.13 |
| (7,19) | 1:A:24:LEU:HD23 | 1:A:70:PRO:HG3 | 3 | 0.13 |
| (7,166) | 1:A:89:VAL:HG11 | 1:A:124:PHE:HE1 | 10 | 0.13 |
| (7,166) | 1:A:89:VAL:HG11 | 1:A:124:PHE:HE2 | 10 | 0.13 |
| (7,166) | 1:A:89:VAL:HG12 | 1:A:124:PHE:HE1 | 10 | 0.13 |
| (7,166) | 1:A:89:VAL:HG12 | 1:A:124:PHE:HE2 | 10 | 0.13 |
| (7,166) | 1:A:89:VAL:HG13 | 1:A:124:PHE:HE1 | 10 | 0.13 |
| (7,166) | 1:A:89:VAL:HG13 | 1:A:124:PHE:HE2 | 10 | 0.13 |
| (7,166) | 1:A:89:VAL:HG11 | 1:A:124:PHE:HE1 | 11 | 0.13 |
| (7,166) | 1:A:89:VAL:HG11 | 1:A:124:PHE:HE2 | 11 | 0.13 |
| (7,166) | 1:A:89:VAL:HG12 | 1:A:124:PHE:HE1 | 11 | 0.13 |
| (7,166) | 1:A:89:VAL:HG12 | 1:A:124:PHE:HE2 | 11 | 0.13 |
| (7,166) | 1:A:89:VAL:HG13 | 1:A:124:PHE:HE1 | 11 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,166) | 1:A:89:VAL:HG13 | 1:A:124:PHE:HE2 | 11 | 0.13 |
| (7,159) | 1:A:88:VAL:HG21 | 1:A:90:THR:H | 4 | 0.13 |
| (7,159) | 1:A:88:VAL:HG22 | 1:A:90:THR:H | 4 | 0.13 |
| (7,159) | 1:A:88:VAL:HG23 | 1:A:90:THR:H | 4 | 0.13 |
| (4,22) | 4:A:304:ZN:ZN | 1:A:198:HIS:CG | 6 | 0.13 |
| (3,15) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:171:HIS:CG | 13 | 0.13 |
| (2,1) | 1:A:134:ILE:HD11 | 1:A:170:ALA:H | 8 | 0.13 |
| (2,1) | 1:A:134:ILE:HD12 | 1:A:170:ALA:H | 8 | 0.13 |
| (2,1) | 1:A:134:ILE:HD13 | 1:A:170:ALA:H | 8 | 0.13 |
| (1,985) | 1:A:137:GLY:H | 1:A:170:ALA:H | 1 | 0.13 |
| (1,985) | 1:A:137:GLY:H | 1:A:170:ALA:H | 7 | 0.13 |
| (1,981) | 1:A:136:ILE:HG21 | 1:A:170:ALA:H | 13 | 0.13 |
| (1,981) | 1:A:136:ILE:HG22 | 1:A:170:ALA:H | 13 | 0.13 |
| (1,981) | 1:A:136:ILE:HG23 | 1:A:170:ALA:H | 13 | 0.13 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD11 | 1:A:137:GLY:H | 6 | 0.13 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD12 | 1:A:137:GLY:H | 6 | 0.13 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD13 | 1:A:137:GLY:H | 6 | 0.13 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD11 | 1:A:137:GLY:H | 15 | 0.13 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD12 | 1:A:137:GLY:H | 15 | 0.13 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD13 | 1:A:137:GLY:H | 15 | 0.13 |
| (1,959) | 1:A:135:MET:H | 1:A:136:ILE:H | 9 | 0.13 |
| (1,945) | 1:A:134:ILE:H | 1:A:136:ILE:HD11 | 8 | 0.13 |
| (1,945) | 1:A:134:ILE:H | 1:A:136:ILE:HD12 | 8 | 0.13 |
| (1,945) | 1:A:134:ILE:H | 1:A:136:ILE:HD13 | 8 | 0.13 |
| (1,945) | 1:A:134:ILE:H | 1:A:136:ILE:HD11 | 13 | 0.13 |
| (1,945) | 1:A:134:ILE:H | 1:A:136:ILE:HD12 | 13 | 0.13 |
| (1,945) | 1:A:134:ILE:H | 1:A:136:ILE:HD13 | 13 | 0.13 |
| (1,901) | 1:A:126:LYS:HD2 | 1:A:127:VAL:HB | 3 | 0.13 |
| (1,901) | 1:A:126:LYS:HD3 | 1:A:127:VAL:HB | 3 | 0.13 |
| (1,877) | 1:A:122:LEU:H | 1:A:123:HIS:H | 4 | 0.13 |
| (1,877) | 1:A:122:LEU:H | 1:A:123:HIS:H | 5 | 0.13 |
| (1,877) | 1:A:122:LEU:H | 1:A:123:HIS:H | 7 | 0.13 |
| (1,877) | 1:A:122:LEU:H | 1:A:123:HIS:H | 15 | 0.13 |
| (1,819) | 1:A:117:GLY:HA2 | 1:A:122:LEU:H | 12 | 0.13 |
| (1,780) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:226:LEU:HA | 2 | 0.13 |
| (1,780) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:226:LEU:HA | 2 | 0.13 |
| (1,780) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:226:LEU:HA | 2 | 0.13 |
| (1,75) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:22:PHE:H | 9 | 0.13 |
| (1,730) | 1:A:110:SER:H | 1:A:112:ALA:H | 7 | 0.13 |
| (1,698) | 1:A:106:ASP:H | 1:A:107:ARG:HG2 | 12 | 0.13 |
| (1,698) | 1:A:106:ASP:H | 1:A:107:ARG:HG3 | 12 | 0.13 |
| (1,693) | 1:A:105:VAL:H | 1:A:107:ARG:H | 16 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,687) | 1:A:104:THR:HG21 | 1:A:108:LEU:HG | 8 | 0.13 |
| (1,687) | 1:A:104:THR:HG22 | 1:A:108:LEU:HG | 8 | 0.13 |
| (1,687) | 1:A:104:THR:HG23 | 1:A:108:LEU:HG | 8 | 0.13 |
| (1,687) | 1:A:104:THR:HG21 | 1:A:108:LEU:HG | 16 | 0.13 |
| (1,687) | 1:A:104:THR:HG22 | 1:A:108:LEU:HG | 16 | 0.13 |
| (1,687) | 1:A:104:THR:HG23 | 1:A:108:LEU:HG | 16 | 0.13 |
| (1,670) | 1:A:103:ILE:HD11 | 1:A:104:THR:H | 11 | 0.13 |
| (1,670) | 1:A:103:ILE:HD12 | 1:A:104:THR:H | 11 | 0.13 |
| (1,670) | 1:A:103:ILE:HD13 | 1:A:104:THR:H | 11 | 0.13 |
| (1,670) | 1:A:103:ILE:HD11 | 1:A:104:THR:H | 14 | 0.13 |
| (1,670) | 1:A:103:ILE:HD12 | 1:A:104:THR:H | 14 | 0.13 |
| (1,670) | 1:A:103:ILE:HD13 | 1:A:104:THR:H | 14 | 0.13 |
| (1,62) | 1:A:18:TYR:HB3 | 1:A:62:MET:HE1 | 4 | 0.13 |
| (1,62) | 1:A:18:TYR:HB3 | 1:A:62:MET:HE2 | 4 | 0.13 |
| (1,62) | 1:A:18:TYR:HB3 | 1:A:62:MET:HE3 | 4 | 0.13 |
| (1,611) | 1:A:96:TYR:HB3 | 1:A:97:THR:H | 7 | 0.13 |
| (1,610) | 1:A:96:TYR:HB2 | 1:A:102:HIS:HD2 | 1 | 0.13 |
| (1,610) | 1:A:96:TYR:HB2 | 1:A:102:HIS:HD2 | 6 | 0.13 |
| (1,56) | 1:A:18:TYR:HB2 | 1:A:20:LYS:H | 4 | 0.13 |
| (1,56) | 1:A:18:TYR:HB3 | 1:A:20:LYS:H | 4 | 0.13 |
| (1,547) | 1:A:92:ARG:HA | 1:A:92:ARG:HE | 14 | 0.13 |
| (1,544) | 1:A:92:ARG:H | 1:A:136:ILE:H | 14 | 0.13 |
| (1,532) | 1:A:91:TYR:HD1 | 1:A:126:LYS:HA | 9 | 0.13 |
| (1,532) | 1:A:91:TYR:HD2 | 1:A:126:LYS:HA | 9 | 0.13 |
| (1,519) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:134:ILE:HG21 | 2 | 0.13 |
| (1,519) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:134:ILE:HG22 | 2 | 0.13 |
| (1,519) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:134:ILE:HG23 | 2 | 0.13 |
| (1,506) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:133:ASP:H | 15 | 0.13 |
| (1,437) | 1:A:79:PRO:HD2 | 1:A:163:GLY:HA2 | 14 | 0.13 |
| (1,437) | 1:A:79:PRO:HD2 | 1:A:163:GLY:HA3 | 14 | 0.13 |
| (1,437) | 1:A:79:PRO:HD3 | 1:A:163:GLY:HA2 | 14 | 0.13 |
| (1,437) | 1:A:79:PRO:HD3 | 1:A:163:GLY:HA3 | 14 | 0.13 |
| (1,420) | 1:A:73:ALA:H | 1:A:74:GLU:H | 4 | 0.13 |
| (1,420) | 1:A:73:ALA:H | 1:A:74:GLU:H | 14 | 0.13 |
| (1,420) | 1:A:73:ALA:H | 1:A:74:GLU:H | 15 | 0.13 |
| (1,406) | 1:A:69:VAL:H | 1:A:159:ALA:H | 1 | 0.13 |
| (1,406) | 1:A:69:VAL:H | 1:A:159:ALA:H | 1 | 0.13 |
| (1,4) | 1:A:4:ALA:HB1 | 1:A:59:ILE:HB | 6 | 0.13 |
| (1,4) | 1:A:4:ALA:HB2 | 1:A:59:ILE:HB | 6 | 0.13 |
| (1,4) | 1:A:4:ALA:HB3 | 1:A:59:ILE:HB | 6 | 0.13 |
| (1,38) | 1:A:15:ALA:HB1 | 1:A:18:TYR:H | 13 | 0.13 |
| (1,38) | 1:A:15:ALA:HB2 | 1:A:18:TYR:H | 13 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,38) | 1:A:15:ALA:HB3 | 1:A:18:TYR:H | 13 | 0.13 |
| (1,344) | 1:A:61:ILE:H | 1:A:63:GLN:HG2 | 14 | 0.13 |
| (1,344) | 1:A:61:ILE:H | 1:A:63:GLN:HG3 | 14 | 0.13 |
| (1,33) | 1:A:15:ALA:H | 1:A:59:ILE:HD11 | 5 | 0.13 |
| (1,33) | 1:A:15:ALA:H | 1:A:59:ILE:HD12 | 5 | 0.13 |
| (1,33) | 1:A:15:ALA:H | 1:A:59:ILE:HD13 | 5 | 0.13 |
| (1,305) | 1:A:57:ARG:HA | 1:A:57:ARG:HD2 | 9 | 0.13 |
| (1,305) | 1:A:57:ARG:HA | 1:A:57:ARG:HD3 | 9 | 0.13 |
| (1,299) | 1:A:56:SER:HB2 | 1:A:58:VAL:H | 3 | 0.13 |
| (1,277) | 1:A:50:ILE:H | 1:A:51:THR:H | 11 | 0.13 |
| (1,272) | 1:A:49:PRO:HG2 | 1:A:50:ILE:HA | 6 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:49:PRO:HB2 | 1:A:50:ILE:HG21 | 14 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:49:PRO:HB2 | 1:A:50:ILE:HG22 | 14 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:49:PRO:HB2 | 1:A:50:ILE:HG23 | 14 | 0.13 |
| (1,248) | 1:A:46:PHE:HA | 1:A:48:LEU:H | 15 | 0.13 |
| (1,230) | 1:A:45:PHE:H | 1:A:45:PHE:HD1 | 10 | 0.13 |
| (1,230) | 1:A:45:PHE:H | 1:A:45:PHE:HD2 | 10 | 0.13 |
| (1,230) | 1:A:45:PHE:H | 1:A:45:PHE:HD1 | 12 | 0.13 |
| (1,230) | 1:A:45:PHE:H | 1:A:45:PHE:HD2 | 12 | 0.13 |
| (1,212) | 1:A:43:GLN:H | 1:A:45:PHE:H | 13 | 0.13 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE1 | 1:A:43:GLN:HG2 | 12 | 0.13 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE1 | 1:A:43:GLN:HG3 | 12 | 0.13 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE2 | 1:A:43:GLN:HG2 | 12 | 0.13 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE2 | 1:A:43:GLN:HG3 | 12 | 0.13 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE3 | 1:A:43:GLN:HG2 | 12 | 0.13 |
| (1,188) | 1:A:42:MET:HE3 | 1:A:43:GLN:HG3 | 12 | 0.13 |
| (1,183) | 1:A:42:MET:H | 1:A:44:LYS:H | 4 | 0.13 |
| (1,169) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:52:GLY:HA2 | 2 | 0.13 |
| (1,168) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:52:GLY:H | 16 | 0.13 |
| (1,166) | 1:A:40:LYS:H | 1:A:41:GLU:HG2 | 3 | 0.13 |
| (1,161) | 1:A:39:LEU:H | 1:A:41:GLU:H | 14 | 0.13 |
| (1,156) | 1:A:38:LYS:HA | 1:A:41:GLU:HG3 | 1 | 0.13 |
| (1,156) | 1:A:38:LYS:HA | 1:A:41:GLU:HG3 | 2 | 0.13 |
| (1,156) | 1:A:38:LYS:HA | 1:A:41:GLU:HG3 | 12 | 0.13 |
| (1,1482) | 1:A:237:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HD1 | 6 | 0.13 |
| (1,1482) | 1:A:237:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HD2 | 6 | 0.13 |
| (1,1442) | 1:A:233:GLY:HA3 | 1:A:235:GLN:H | 11 | 0.13 |
| (1,1440) | 1:A:233:GLY:HA2 | 1:A:235:GLN:H | 12 | 0.13 |
| (1,1402) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HB | 1 | 0.13 |
| (1,1402) | 1:A:230:ASP:H | 1:A:231:ILE:HB | 7 | 0.13 |
| (1,1396) | 1:A:227:SER:H | 1:A:231:ILE:H | 16 | 0.13 |
| (1,1392) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:226:LEU:HA | 3 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1392) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:226:LEU:HA | 3 | 0.13 |
| (1,1314) | 1:A:202:MET:HB2 | 1:A:234:ILE:HD11 | 9 | 0.13 |
| (1,1314) | 1:A:202:MET:HB2 | 1:A:234:ILE:HD12 | 9 | 0.13 |
| (1,1314) | 1:A:202:MET:HB2 | 1:A:234:ILE:HD13 | 9 | 0.13 |
| (1,1314) | 1:A:202:MET:HB3 | 1:A:234:ILE:HD11 | 9 | 0.13 |
| (1,1314) | 1:A:202:MET:HB3 | 1:A:234:ILE:HD12 | 9 | 0.13 |
| (1,1314) | 1:A:202:MET:HB3 | 1:A:234:ILE:HD13 | 9 | 0.13 |
| (1,13) | 1:A:11:GLN:H | 1:A:11:GLN:HE21 | 12 | 0.13 |
| (1,13) | 1:A:11:GLN:H | 1:A:11:GLN:HE22 | 12 | 0.13 |
| (1,1236) | 1:A:187:ASN:H | 1:A:188:PHE:H | 14 | 0.13 |
| (1,1198) | 1:A:178:TRP:HZ2 | 1:A:186:ILE:HB | 11 | 0.13 |
| (1,1193) | 1:A:178:TRP:HE3 | 1:A:188:PHE:H | 12 | 0.13 |
| (1,1187) | 1:A:178:TRP:H | 1:A:178:TRP:HE1 | 12 | 0.13 |
| (1,1176) | 1:A:176:GLU:H | 1:A:177:ARG:H | 2 | 0.13 |
| (1,1176) | 1:A:176:GLU:H | 1:A:177:ARG:H | 3 | 0.13 |
| (1,1176) | 1:A:176:GLU:H | 1:A:177:ARG:H | 10 | 0.13 |
| (1,1176) | 1:A:176:GLU:H | 1:A:177:ARG:H | 12 | 0.13 |
| (1,1176) | 1:A:176:GLU:H | 1:A:177:ARG:H | 15 | 0.13 |
| (1,1160) | 1:A:173:ASP:H | 1:A:174:GLU:H | 7 | 0.13 |
| (1,11) | 1:A:10:LEU:H | 1:A:13:GLU:H | 15 | 0.13 |
| (1,1095) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:160:PHE:HD1 | 15 | 0.13 |
| (1,1095) | 1:A:160:PHE:H | 1:A:160:PHE:HD2 | 15 | 0.13 |
| (1,1064) | 1:A:156:LEU:HG | 1:A:178:TRP:HZ3 | 6 | 0.13 |
| (1,1054) | 1:A:155:THR:HG21 | 1:A:158:HIS:HA | 13 | 0.13 |
| (1,1054) | 1:A:155:THR:HG22 | 1:A:158:HIS:HA | 13 | 0.13 |
| (1,1054) | 1:A:155:THR:HG23 | 1:A:158:HIS:HA | 13 | 0.13 |
| (1,105) | 1:A:25:TYR:H | 1:A:25:TYR:HD1 | 8 | 0.13 |
| (1,105) | 1:A:25:TYR:H | 1:A:25:TYR:HD2 | 8 | 0.13 |
| (1,1030) | 1:A:147:TYR:HA | 1:A:147:TYR:HE1 | 10 | 0.13 |
| (1,1030) | 1:A:147:TYR:HA | 1:A:147:TYR:HE2 | 10 | 0.13 |
| (1,1020) | 1:A:142:ALA:HB1 | 1:A:145:ASP:H | 3 | 0.13 |
| (1,1020) | 1:A:142:ALA:HB2 | 1:A:145:ASP:H | 3 | 0.13 |
| (1,1020) | 1:A:142:ALA:HB3 | 1:A:145:ASP:H | 3 | 0.13 |
| (1,102) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:70:PRO:HB2 | 11 | 0.13 |
| (1,102) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:70:PRO:HB3 | 11 | 0.13 |
| (1,1018) | 1:A:141:GLY:H | 1:A:150:ASP:H | 10 | 0.13 |
| (7,62) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:59:ILE:HD11 | 7 | 0.12 |
| (7,62) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:59:ILE:HD12 | 7 | 0.12 |
| (7,62) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:59:ILE:HD13 | 7 | 0.12 |
| (7,62) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:59:ILE:HD11 | 7 | 0.12 |
| (7,62) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:59:ILE:HD12 | 7 | 0.12 |
| (7,62) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:59:ILE:HD13 | 7 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,62) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:59:ILE:HD11 | 7 | 0.12 |
| (7,62) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:59:ILE:HD12 | 7 | 0.12 |
| (7,62) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:59:ILE:HD13 | 7 | 0.12 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:211:VAL:HG11 | 1 | 0.12 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:211:VAL:HG12 | 1 | 0.12 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:211:VAL:HG13 | 1 | 0.12 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:211:VAL:HG11 | 1 | 0.12 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:211:VAL:HG12 | 1 | 0.12 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:211:VAL:HG13 | 1 | 0.12 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:211:VAL:HG11 | 1 | 0.12 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:211:VAL:HG12 | 1 | 0.12 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:211:VAL:HG13 | 1 | 0.12 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:211:VAL:HG11 | 5 | 0.12 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:211:VAL:HG12 | 5 | 0.12 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB1 | 1:A:211:VAL:HG13 | 5 | 0.12 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:211:VAL:HG11 | 5 | 0.12 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:211:VAL:HG12 | 5 | 0.12 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB2 | 1:A:211:VAL:HG13 | 5 | 0.12 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:211:VAL:HG11 | 5 | 0.12 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:211:VAL:HG12 | 5 | 0.12 |
| (7,436) | 1:A:210:ALA:HB3 | 1:A:211:VAL:HG13 | 5 | 0.12 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:173:ASP:HB2 | 4 | 0.12 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:173:ASP:HB3 | 4 | 0.12 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:173:ASP:HB2 | 4 | 0.12 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:173:ASP:HB3 | 4 | 0.12 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:173:ASP:HB2 | 4 | 0.12 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:173:ASP:HB3 | 4 | 0.12 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD11 | 1:A:186:ILE:H | 6 | 0.12 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD12 | 1:A:186:ILE:H | 6 | 0.12 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD13 | 1:A:186:ILE:H | 6 | 0.12 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD11 | 1:A:186:ILE:H | 16 | 0.12 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD12 | 1:A:186:ILE:H | 16 | 0.12 |
| (7,393) | 1:A:156:LEU:HD13 | 1:A:186:ILE:H | 16 | 0.12 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG21 | 13 | 0.12 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG22 | 13 | 0.12 |
| (7,357) | 1:A:126:LYS:HA | 1:A:128:VAL:HG23 | 13 | 0.12 |
| (7,332) | 1:A:116:TRP:HB2 | 1:A:226:LEU:HD11 | 3 | 0.12 |
| (7,332) | 1:A:116:TRP:HB2 | 1:A:226:LEU:HD12 | 3 | 0.12 |
| (7,332) | 1:A:116:TRP:HB2 | 1:A:226:LEU:HD13 | 3 | 0.12 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD11 | 1:A:104:THR:HG21 | 2 | 0.12 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD11 | 1:A:104:THR:HG22 | 2 | 0.12 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD11 | 1:A:104:THR:HG23 | 2 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD12 | 1:A:104:THR:HG21 | 2 | 0.12 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD12 | 1:A:104:THR:HG22 | 2 | 0.12 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD12 | 1:A:104:THR:HG23 | 2 | 0.12 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD13 | 1:A:104:THR:HG21 | 2 | 0.12 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD13 | 1:A:104:THR:HG22 | 2 | 0.12 |
| (7,230) | 1:A:100:LEU:HD13 | 1:A:104:THR:HG23 | 2 | 0.12 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG11 | 3 | 0.12 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG12 | 3 | 0.12 |
| (7,223) | 1:A:100:LEU:HB2 | 1:A:105:VAL:HG13 | 3 | 0.12 |
| (7,15) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:72:VAL:HG21 | 1 | 0.12 |
| (7,15) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:72:VAL:HG22 | 1 | 0.12 |
| (7,15) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:72:VAL:HG23 | 1 | 0.12 |
| (7,15) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:72:VAL:HG21 | 9 | 0.12 |
| (7,15) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:72:VAL:HG22 | 9 | 0.12 |
| (7,15) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:72:VAL:HG23 | 9 | 0.12 |
| (6,1) | 1:A:155:THR:HG1 | 1:A:154:ASN:OD1 | 4 | 0.12 |
| (4,4) | 3:A:301:CA:CA | 1:A:169:ASP:OD2 | 11 | 0.12 |
| (3,15) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:171:HIS:CG | 1 | 0.12 |
| (3,15) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:171:HIS:CG | 3 | 0.12 |
| (3,15) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:171:HIS:CG | 4 | 0.12 |
| (3,15) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:171:HIS:CG | 5 | 0.12 |
| (3,15) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:171:HIS:CG | 7 | 0.12 |
| (3,15) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:171:HIS:CG | 8 | 0.12 |
| (3,15) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:171:HIS:CG | 10 | 0.12 |
| (3,15) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:171:HIS:CG | 11 | 0.12 |
| (3,15) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:171:HIS:CG | 12 | 0.12 |
| (3,15) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:171:HIS:CG | 15 | 0.12 |
| (3,15) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:171:HIS:CG | 16 | 0.12 |
| (1,985) | 1:A:137:GLY:H | 1:A:170:ALA:H | 14 | 0.12 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD11 | 1:A:137:GLY:H | 2 | 0.12 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD12 | 1:A:137:GLY:H | 2 | 0.12 |
| (1,977) | 1:A:136:ILE:HD13 | 1:A:137:GLY:H | 2 | 0.12 |
| (1,970) | 1:A:136:ILE:H | 1:A:137:GLY:H | 9 | 0.12 |
| (1,959) | 1:A:135:MET:H | 1:A:136:ILE:H | 10 | 0.12 |
| (1,945) | 1:A:134:ILE:H | 1:A:136:ILE:HD11 | 12 | 0.12 |
| (1,945) | 1:A:134:ILE:H | 1:A:136:ILE:HD12 | 12 | 0.12 |
| (1,945) | 1:A:134:ILE:H | 1:A:136:ILE:HD13 | 12 | 0.12 |
| (1,920) | 1:A:129:TRP:HB2 | 1:A:130:GLY:H | 15 | 0.12 |
| (1,920) | 1:A:129:TRP:HB3 | 1:A:130:GLY:H | 15 | 0.12 |
| (1,91) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:19:LEU:HD21 | 1 | 0.12 |
| (1,91) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:19:LEU:HD22 | 1 | 0.12 |
| (1,91) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:19:LEU:HD23 | 1 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,877) | 1:A:122:LEU:H | 1:A:123:HIS:H | 3 | 0.12 |
| (1,877) | 1:A:122:LEU:H | 1:A:123:HIS:H | 6 | 0.12 |
| (1,877) | 1:A:122:LEU:H | 1:A:123:HIS:H | 13 | 0.12 |
| (1,87) | 1:A:21:ARG:H | 1:A:22:PHE:HB2 | 13 | 0.12 |
| (1,87) | 1:A:21:ARG:H | 1:A:22:PHE:HB3 | 13 | 0.12 |
| (1,820) | 1:A:117:GLY:HA3 | 1:A:119:GLU:H | 9 | 0.12 |
| (1,777) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:224:PHE:HB2 | 4 | 0.12 |
| (1,777) | 1:A:115:MET:HE1 | 1:A:224:PHE:HB3 | 4 | 0.12 |
| (1,777) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:224:PHE:HB2 | 4 | 0.12 |
| (1,777) | 1:A:115:MET:HE2 | 1:A:224:PHE:HB3 | 4 | 0.12 |
| (1,777) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:224:PHE:HB2 | 4 | 0.12 |
| (1,777) | 1:A:115:MET:HE3 | 1:A:224:PHE:HB3 | 4 | 0.12 |
| (1,769) | 1:A:114:ASN:HA | 1:A:118:LYS:H | 11 | 0.12 |
| (1,757) | 1:A:113:LEU:H | 1:A:115:MET:HB2 | 14 | 0.12 |
| (1,730) | 1:A:110:SER:H | 1:A:112:ALA:H | 4 | 0.12 |
| (1,71) | 1:A:19:LEU:HG | 1:A:62:MET:HE1 | 15 | 0.12 |
| (1,71) | 1:A:19:LEU:HG | 1:A:62:MET:HE2 | 15 | 0.12 |
| (1,71) | 1:A:19:LEU:HG | 1:A:62:MET:HE3 | 15 | 0.12 |
| (1,670) | 1:A:103:ILE:HD11 | 1:A:104:THR:H | 9 | 0.12 |
| (1,670) | 1:A:103:ILE:HD12 | 1:A:104:THR:H | 9 | 0.12 |
| (1,670) | 1:A:103:ILE:HD13 | 1:A:104:THR:H | 9 | 0.12 |
| (1,631) | 1:A:98:ARG:H | 1:A:100:LEU:H | 14 | 0.12 |
| (1,610) | 1:A:96:TYR:HB2 | 1:A:102:HIS:HD2 | 2 | 0.12 |
| (1,610) | 1:A:96:TYR:HB2 | 1:A:102:HIS:HD2 | 3 | 0.12 |
| (1,577) | 1:A:93:ILE:HB | 1:A:94:VAL:H | 7 | 0.12 |
| (1,564) | 1:A:92:ARG:HD2 | 1:A:132:ALA:HB1 | 5 | 0.12 |
| (1,564) | 1:A:92:ARG:HD2 | 1:A:132:ALA:HB2 | 5 | 0.12 |
| (1,564) | 1:A:92:ARG:HD2 | 1:A:132:ALA:HB3 | 5 | 0.12 |
| (1,549) | 1:A:92:ARG:HB2 | 1:A:131:THR:HA | 8 | 0.12 |
| (1,549) | 1:A:92:ARG:HB3 | 1:A:131:THR:HA | 8 | 0.12 |
| (1,549) | 1:A:92:ARG:HB2 | 1:A:131:THR:HA | 9 | 0.12 |
| (1,549) | 1:A:92:ARG:HB3 | 1:A:131:THR:HA | 9 | 0.12 |
| (1,547) | 1:A:92:ARG:HA | 1:A:92:ARG:HE | 10 | 0.12 |
| (1,545) | 1:A:92:ARG:H | 1:A:136:ILE:HD11 | 8 | 0.12 |
| (1,545) | 1:A:92:ARG:H | 1:A:136:ILE:HD12 | 8 | 0.12 |
| (1,545) | 1:A:92:ARG:H | 1:A:136:ILE:HD13 | 8 | 0.12 |
| (1,519) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:134:ILE:HG21 | 9 | 0.12 |
| (1,519) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:134:ILE:HG22 | 9 | 0.12 |
| (1,519) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:134:ILE:HG23 | 9 | 0.12 |
| (1,519) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:134:ILE:HG21 | 11 | 0.12 |
| (1,519) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:134:ILE:HG22 | 11 | 0.12 |
| (1,519) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:134:ILE:HG23 | 11 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,499) | 1:A:90:THR:H | 1:A:134:ILE:H | 10 | 0.12 |
| (1,485) | 1:A:89:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB2 | 4 | 0.12 |
| (1,485) | 1:A:89:VAL:H | 1:A:123:HIS:HB3 | 4 | 0.12 |
| (1,461) | 1:A:84:TRP:H | 1:A:234:ILE:HD11 | 10 | 0.12 |
| (1,461) | 1:A:84:TRP:H | 1:A:234:ILE:HD12 | 10 | 0.12 |
| (1,461) | 1:A:84:TRP:H | 1:A:234:ILE:HD13 | 10 | 0.12 |
| (1,434) | 1:A:78:PHE:H | 1:A:78:PHE:HD1 | 6 | 0.12 |
| (1,434) | 1:A:78:PHE:H | 1:A:78:PHE:HD2 | 6 | 0.12 |
| (1,42) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:16:GLN:HE21 | 2 | 0.12 |
| (1,42) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:16:GLN:HE22 | 2 | 0.12 |
| (1,412) | 1:A:70:PRO:HD2 | 1:A:147:TYR:HD1 | 12 | 0.12 |
| (1,412) | 1:A:70:PRO:HD2 | 1:A:147:TYR:HD2 | 12 | 0.12 |
| (1,412) | 1:A:70:PRO:HD3 | 1:A:147:TYR:HD1 | 12 | 0.12 |
| (1,412) | 1:A:70:PRO:HD3 | 1:A:147:TYR:HD2 | 12 | 0.12 |
| (1,376) | 1:A:66:ARG:H | 1:A:66:ARG:HE | 6 | 0.12 |
| (1,371) | 1:A:63:GLN:HB2 | 1:A:64:LYS:H | 1 | 0.12 |
| (1,371) | 1:A:63:GLN:HB3 | 1:A:64:LYS:H | 1 | 0.12 |
| (1,344) | 1:A:61:ILE:H | 1:A:63:GLN:HG2 | 16 | 0.12 |
| (1,344) | 1:A:61:ILE:H | 1:A:63:GLN:HG3 | 16 | 0.12 |
| (1,33) | 1:A:15:ALA:H | 1:A:59:ILE:HD11 | 12 | 0.12 |
| (1,33) | 1:A:15:ALA:H | 1:A:59:ILE:HD12 | 12 | 0.12 |
| (1,33) | 1:A:15:ALA:H | 1:A:59:ILE:HD13 | 12 | 0.12 |
| (1,326) | 1:A:59:ILE:HA | 1:A:62:MET:HE1 | 3 | 0.12 |
| (1,326) | 1:A:59:ILE:HA | 1:A:62:MET:HE2 | 3 | 0.12 |
| (1,326) | 1:A:59:ILE:HA | 1:A:62:MET:HE3 | 3 | 0.12 |
| (1,270) | 1:A:49:PRO:HB2 | 1:A:50:ILE:HG21 | 10 | 0.12 |
| (1,270) | 1:A:49:PRO:HB2 | 1:A:50:ILE:HG22 | 10 | 0.12 |
| (1,270) | 1:A:49:PRO:HB2 | 1:A:50:ILE:HG23 | 10 | 0.12 |
| (1,270) | 1:A:49:PRO:HB2 | 1:A:50:ILE:HG21 | 16 | 0.12 |
| (1,270) | 1:A:49:PRO:HB2 | 1:A:50:ILE:HG22 | 16 | 0.12 |
| (1,270) | 1:A:49:PRO:HB2 | 1:A:50:ILE:HG23 | 16 | 0.12 |
| (1,27) | 1:A:14:GLN:H | 1:A:16:GLN:H | 10 | 0.12 |
| (1,257) | 1:A:46:PHE:HE1 | 1:A:61:ILE:HA | 3 | 0.12 |
| (1,257) | 1:A:46:PHE:HE2 | 1:A:61:ILE:HA | 3 | 0.12 |
| (1,230) | 1:A:45:PHE:H | 1:A:45:PHE:HD1 | 6 | 0.12 |
| (1,230) | 1:A:45:PHE:H | 1:A:45:PHE:HD2 | 6 | 0.12 |
| (1,22) | 1:A:13:GLU:H | 1:A:15:ALA:H | 1 | 0.12 |
| (1,161) | 1:A:39:LEU:H | 1:A:41:GLU:H | 15 | 0.12 |
| (1,145) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:39:LEU:H | 5 | 0.12 |
| (1,145) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:39:LEU:H | 8 | 0.12 |
| (1,1440) | 1:A:233:GLY:HA2 | 1:A:235:GLN:H | 3 | 0.12 |
| (1,1392) | 1:A:225:LYS:HB2 | 1:A:226:LEU:HA | 12 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1392) | 1:A:225:LYS:HB3 | 1:A:226:LEU:HA | 12 | 0.12 |
| (1,1307) | 1:A:202:MET:H | 1:A:202:MET:HE1 | 12 | 0.12 |
| (1,1307) | 1:A:202:MET:H | 1:A:202:MET:HE2 | 12 | 0.12 |
| (1,1307) | 1:A:202:MET:H | 1:A:202:MET:HE3 | 12 | 0.12 |
| (1,1176) | 1:A:176:GLU:H | 1:A:177:ARG:H | 1 | 0.12 |
| (1,1176) | 1:A:176:GLU:H | 1:A:177:ARG:H | 4 | 0.12 |
| (1,1176) | 1:A:176:GLU:H | 1:A:177:ARG:H | 6 | 0.12 |
| (1,1176) | 1:A:176:GLU:H | 1:A:177:ARG:H | 9 | 0.12 |
| (1,1176) | 1:A:176:GLU:H | 1:A:177:ARG:H | 14 | 0.12 |
| (1,1176) | 1:A:176:GLU:H | 1:A:177:ARG:H | 16 | 0.12 |
| (1,1163) | 1:A:173:ASP:H | 1:A:178:TRP:HE1 | 15 | 0.12 |
| (1,1160) | 1:A:173:ASP:H | 1:A:174:GLU:H | 4 | 0.12 |
| (1,1160) | 1:A:173:ASP:H | 1:A:174:GLU:H | 6 | 0.12 |
| (1,1160) | 1:A:173:ASP:H | 1:A:174:GLU:H | 8 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:171:HIS:H | 1:A:172:PHE:HD1 | 3 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:171:HIS:H | 1:A:172:PHE:HD2 | 3 | 0.12 |
| (1,1126) | 1:A:165:GLY:HA2 | 1:A:167:GLY:H | 13 | 0.12 |
| (1,1126) | 1:A:165:GLY:HA3 | 1:A:167:GLY:H | 13 | 0.12 |
| (1,1126) | 1:A:165:GLY:HA2 | 1:A:167:GLY:H | 15 | 0.12 |
| (1,1126) | 1:A:165:GLY:HA3 | 1:A:167:GLY:H | 15 | 0.12 |
| (1,1116) | 1:A:161:ALA:HB1 | 1:A:163:GLY:H | 9 | 0.12 |
| (1,1116) | 1:A:161:ALA:HB2 | 1:A:163:GLY:H | 9 | 0.12 |
| (1,1116) | 1:A:161:ALA:HB3 | 1:A:163:GLY:H | 9 | 0.12 |
| (1,1060) | 1:A:156:LEU:HB3 | 1:A:178:TRP:HH2 | 16 | 0.12 |
| (1,1035) | 1:A:149:PHE:HB2 | 1:A:150:ASP:H | 10 | 0.12 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD11 | 1:A:56:SER:H | 12 | 0.11 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD12 | 1:A:56:SER:H | 12 | 0.11 |
| (7,61) | 1:A:54:LEU:HD13 | 1:A:56:SER:H | 12 | 0.11 |
| (7,5) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:54:LEU:HD11 | 2 | 0.11 |
| (7,5) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:54:LEU:HD12 | 2 | 0.11 |
| (7,5) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:54:LEU:HD13 | 2 | 0.11 |
| (7,5) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:54:LEU:HD11 | 5 | 0.11 |
| (7,5) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:54:LEU:HD12 | 5 | 0.11 |
| (7,5) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:54:LEU:HD13 | 5 | 0.11 |
| (7,5) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:54:LEU:HD11 | 8 | 0.11 |
| (7,5) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:54:LEU:HD12 | 8 | 0.11 |
| (7,5) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:54:LEU:HD13 | 8 | 0.11 |
| (7,424) | 1:A:196:LEU:HD11 | 1:A:197:GLY:H | 12 | 0.11 |
| (7,424) | 1:A:196:LEU:HD12 | 1:A:197:GLY:H | 12 | 0.11 |
| (7,424) | 1:A:196:LEU:HD13 | 1:A:197:GLY:H | 12 | 0.11 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:173:ASP:HB2 | 12 | 0.11 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD21 | 1:A:173:ASP:HB3 | 12 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:173:ASP:HB2 | 12 | 0.11 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD22 | 1:A:173:ASP:HB3 | 12 | 0.11 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:173:ASP:HB2 | 12 | 0.11 |
| (7,400) | 1:A:156:LEU:HD23 | 1:A:173:ASP:HB3 | 12 | 0.11 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:238:TYR:HD1 | 16 | 0.11 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:238:TYR:HD2 | 16 | 0.11 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:238:TYR:HD1 | 16 | 0.11 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:238:TYR:HD2 | 16 | 0.11 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:238:TYR:HD1 | 16 | 0.11 |
| (7,350) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:238:TYR:HD2 | 16 | 0.11 |
| (7,334) | 1:A:116:TRP:HB3 | 1:A:226:LEU:HD11 | 6 | 0.11 |
| (7,334) | 1:A:116:TRP:HB3 | 1:A:226:LEU:HD12 | 6 | 0.11 |
| (7,334) | 1:A:116:TRP:HB3 | 1:A:226:LEU:HD13 | 6 | 0.11 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:134:ILE:HD11 | 14 | 0.11 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:134:ILE:HD12 | 14 | 0.11 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD21 | 1:A:134:ILE:HD13 | 14 | 0.11 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:134:ILE:HD11 | 14 | 0.11 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:134:ILE:HD12 | 14 | 0.11 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD22 | 1:A:134:ILE:HD13 | 14 | 0.11 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:134:ILE:HD11 | 14 | 0.11 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:134:ILE:HD12 | 14 | 0.11 |
| (7,323) | 1:A:113:LEU:HD23 | 1:A:134:ILE:HD13 | 14 | 0.11 |
| (7,31) | 1:A:43:GLN:H | 1:A:48:LEU:HD11 | 6 | 0.11 |
| (7,31) | 1:A:43:GLN:H | 1:A:48:LEU:HD12 | 6 | 0.11 |
| (7,31) | 1:A:43:GLN:H | 1:A:48:LEU:HD13 | 6 | 0.11 |
| (7,31) | 1:A:43:GLN:H | 1:A:48:LEU:HD11 | 11 | 0.11 |
| (7,31) | 1:A:43:GLN:H | 1:A:48:LEU:HD12 | 11 | 0.11 |
| (7,31) | 1:A:43:GLN:H | 1:A:48:LEU:HD13 | 11 | 0.11 |
| (7,291) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:113:LEU:H | 7 | 0.11 |
| (7,291) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:113:LEU:H | 7 | 0.11 |
| (7,291) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:113:LEU:H | 7 | 0.11 |
| (7,291) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:113:LEU:H | 8 | 0.11 |
| (7,291) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:113:LEU:H | 8 | 0.11 |
| (7,291) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:113:LEU:H | 8 | 0.11 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:136:ILE:HD11 | 3 | 0.11 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:136:ILE:HD12 | 3 | 0.11 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:136:ILE:HD13 | 3 | 0.11 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:136:ILE:HD11 | 3 | 0.11 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:136:ILE:HD12 | 3 | 0.11 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:136:ILE:HD13 | 3 | 0.11 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:136:ILE:HD11 | 3 | 0.11 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:136:ILE:HD12 | 3 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:136:ILE:HD13 | 3 | 0.11 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:136:ILE:HD11 | 8 | 0.11 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:136:ILE:HD12 | 8 | 0.11 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:136:ILE:HD13 | 8 | 0.11 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:136:ILE:HD11 | 8 | 0.11 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:136:ILE:HD12 | 8 | 0.11 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:136:ILE:HD13 | 8 | 0.11 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:136:ILE:HD11 | 8 | 0.11 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:136:ILE:HD12 | 8 | 0.11 |
| (7,270) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:136:ILE:HD13 | 8 | 0.11 |
| (7,238) | 1:A:100:LEU:HD21 | 1:A:188:PHE:H | 4 | 0.11 |
| (7,238) | 1:A:100:LEU:HD22 | 1:A:188:PHE:H | 4 | 0.11 |
| (7,238) | 1:A:100:LEU:HD23 | 1:A:188:PHE:H | 4 | 0.11 |
| (7,207) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:95:SER:H | 7 | 0.11 |
| (7,207) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:95:SER:H | 7 | 0.11 |
| (7,207) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:95:SER:H | 7 | 0.11 |
| (7,207) | 1:A:94:VAL:HG21 | 1:A:95:SER:H | 11 | 0.11 |
| (7,207) | 1:A:94:VAL:HG22 | 1:A:95:SER:H | 11 | 0.11 |
| (7,207) | 1:A:94:VAL:HG23 | 1:A:95:SER:H | 11 | 0.11 |
| (7,15) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:72:VAL:HG21 | 5 | 0.11 |
| (7,15) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:72:VAL:HG22 | 5 | 0.11 |
| (7,15) | 1:A:24:LEU:H | 1:A:72:VAL:HG23 | 5 | 0.11 |
| (7,12) | 1:A:23:TYR:H | 1:A:72:VAL:HG21 | 1 | 0.11 |
| (7,12) | 1:A:23:TYR:H | 1:A:72:VAL:HG22 | 1 | 0.11 |
| (7,12) | 1:A:23:TYR:H | 1:A:72:VAL:HG23 | 1 | 0.11 |
| (7,12) | 1:A:23:TYR:H | 1:A:72:VAL:HG21 | 12 | 0.11 |
| (7,12) | 1:A:23:TYR:H | 1:A:72:VAL:HG22 | 12 | 0.11 |
| (7,12) | 1:A:23:TYR:H | 1:A:72:VAL:HG23 | 12 | 0.11 |
| (7,109) | 1:A:84:TRP:HD1 | 1:A:200:LEU:HD21 | 12 | 0.11 |
| (7,109) | 1:A:84:TRP:HD1 | 1:A:200:LEU:HD22 | 12 | 0.11 |
| (7,109) | 1:A:84:TRP:HD1 | 1:A:200:LEU:HD23 | 12 | 0.11 |
| (7,1) | 1:A:10:LEU:H | 1:A:10:LEU:HD11 | 6 | 0.11 |
| (7,1) | 1:A:10:LEU:H | 1:A:10:LEU:HD12 | 6 | 0.11 |
| (7,1) | 1:A:10:LEU:H | 1:A:10:LEU:HD13 | 6 | 0.11 |
| (7,1) | 1:A:10:LEU:H | 1:A:10:LEU:HD21 | 6 | 0.11 |
| (7,1) | 1:A:10:LEU:H | 1:A:10:LEU:HD22 | 6 | 0.11 |
| (7,1) | 1:A:10:LEU:H | 1:A:10:LEU:HD23 | 6 | 0.11 |
| (6,2) | 1:A:90:THR:HG1 | 1:A:133:ASP:OD2 | 12 | 0.11 |
| (6,1) | 1:A:155:THR:HG1 | 1:A:154:ASN:OD1 | 1 | 0.11 |
| (3,15) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:171:HIS:CG | 2 | 0.11 |
| (3,15) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:171:HIS:CG | 9 | 0.11 |
| (3,15) | 4:A:303:ZN:ZN | 1:A:171:HIS:CG | 14 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,1) | 1:A:134:ILE:HD11 | 1:A:170:ALA:H | 14 | 0.11 |
| (2,1) | 1:A:134:ILE:HD12 | 1:A:170:ALA:H | 14 | 0.11 |
| (2,1) | 1:A:134:ILE:HD13 | 1:A:170:ALA:H | 14 | 0.11 |
| (1,924) | 1:A:129:TRP:HB3 | 1:A:130:GLY:H | 1 | 0.11 |
| (1,924) | 1:A:129:TRP:HB3 | 1:A:130:GLY:H | 3 | 0.11 |
| (1,920) | 1:A:129:TRP:HB2 | 1:A:130:GLY:H | 4 | 0.11 |
| (1,920) | 1:A:129:TRP:HB3 | 1:A:130:GLY:H | 4 | 0.11 |
| (1,920) | 1:A:129:TRP:HB2 | 1:A:130:GLY:H | 8 | 0.11 |
| (1,920) | 1:A:129:TRP:HB3 | 1:A:130:GLY:H | 8 | 0.11 |
| (1,901) | 1:A:126:LYS:HD2 | 1:A:127:VAL:HB | 9 | 0.11 |
| (1,901) | 1:A:126:LYS:HD3 | 1:A:127:VAL:HB | 9 | 0.11 |
| (1,88) | 1:A:21:ARG:H | 1:A:23:TYR:H | 16 | 0.11 |
| (1,877) | 1:A:122:LEU:H | 1:A:123:HIS:H | 1 | 0.11 |
| (1,877) | 1:A:122:LEU:H | 1:A:123:HIS:H | 8 | 0.11 |
| (1,877) | 1:A:122:LEU:H | 1:A:123:HIS:H | 16 | 0.11 |
| (1,802) | 1:A:116:TRP:HE1 | 1:A:202:MET:HB2 | 4 | 0.11 |
| (1,802) | 1:A:116:TRP:HE1 | 1:A:202:MET:HB3 | 4 | 0.11 |
| (1,747) | 1:A:112:ALA:HA | 1:A:193:THR:HA | 15 | 0.11 |
| (1,739) | 1:A:111:LYS:HA | 1:A:114:ASN:H | 14 | 0.11 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB1 | 13 | 0.11 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB2 | 13 | 0.11 |
| (1,736) | 1:A:111:LYS:H | 1:A:112:ALA:HB3 | 13 | 0.11 |
| (1,670) | 1:A:103:ILE:HD11 | 1:A:104:THR:H | 10 | 0.11 |
| (1,670) | 1:A:103:ILE:HD12 | 1:A:104:THR:H | 10 | 0.11 |
| (1,670) | 1:A:103:ILE:HD13 | 1:A:104:THR:H | 10 | 0.11 |
| (1,610) | 1:A:96:TYR:HB2 | 1:A:102:HIS:HD2 | 4 | 0.11 |
| (1,610) | 1:A:96:TYR:HB2 | 1:A:102:HIS:HD2 | 13 | 0.11 |
| (1,572) | 1:A:93:ILE:H | 1:A:93:ILE:HG12 | 12 | 0.11 |
| (1,572) | 1:A:93:ILE:H | 1:A:93:ILE:HG13 | 12 | 0.11 |
| (1,532) | 1:A:91:TYR:HD1 | 1:A:126:LYS:HA | 5 | 0.11 |
| (1,532) | 1:A:91:TYR:HD2 | 1:A:126:LYS:HA | 5 | 0.11 |
| (1,519) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:134:ILE:HG21 | 8 | 0.11 |
| (1,519) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:134:ILE:HG22 | 8 | 0.11 |
| (1,519) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:134:ILE:HG23 | 8 | 0.11 |
| (1,519) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:134:ILE:HG21 | 15 | 0.11 |
| (1,519) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:134:ILE:HG22 | 15 | 0.11 |
| (1,519) | 1:A:91:TYR:HA | 1:A:134:ILE:HG23 | 15 | 0.11 |
| (1,468) | 1:A:84:TRP:HE1 | 1:A:200:LEU:H | 6 | 0.11 |
| (1,46) | 1:A:16:GLN:HE21 | 1:A:35:LEU:H | 6 | 0.11 |
| (1,46) | 1:A:16:GLN:HE22 | 1:A:35:LEU:H | 6 | 0.11 |
| (1,437) | 1:A:79:PRO:HD2 | 1:A:163:GLY:HA2 | 13 | 0.11 |
| (1,437) | 1:A:79:PRO:HD2 | 1:A:163:GLY:HA3 | 13 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,437) | 1:A:79:PRO:HD3 | 1:A:163:GLY:HA2 | 13 | 0.11 |
| (1,437) | 1:A:79:PRO:HD3 | 1:A:163:GLY:HA3 | 13 | 0.11 |
| (1,406) | 1:A:69:VAL:H | 1:A:159:ALA:H | 3 | 0.11 |
| (1,406) | 1:A:69:VAL:H | 1:A:159:ALA:H | 3 | 0.11 |
| (1,371) | 1:A:63:GLN:HB2 | 1:A:64:LYS:H | 3 | 0.11 |
| (1,371) | 1:A:63:GLN:HB3 | 1:A:64:LYS:H | 3 | 0.11 |
| (1,371) | 1:A:63:GLN:HB2 | 1:A:64:LYS:H | 5 | 0.11 |
| (1,371) | 1:A:63:GLN:HB3 | 1:A:64:LYS:H | 5 | 0.11 |
| (1,33) | 1:A:15:ALA:H | 1:A:59:ILE:HD11 | 9 | 0.11 |
| (1,33) | 1:A:15:ALA:H | 1:A:59:ILE:HD12 | 9 | 0.11 |
| (1,33) | 1:A:15:ALA:H | 1:A:59:ILE:HD13 | 9 | 0.11 |
| (1,33) | 1:A:15:ALA:H | 1:A:59:ILE:HD11 | 15 | 0.11 |
| (1,33) | 1:A:15:ALA:H | 1:A:59:ILE:HD12 | 15 | 0.11 |
| (1,33) | 1:A:15:ALA:H | 1:A:59:ILE:HD13 | 15 | 0.11 |
| (1,326) | 1:A:59:ILE:HA | 1:A:62:MET:HE1 | 5 | 0.11 |
| (1,326) | 1:A:59:ILE:HA | 1:A:62:MET:HE2 | 5 | 0.11 |
| (1,326) | 1:A:59:ILE:HA | 1:A:62:MET:HE3 | 5 | 0.11 |
| (1,304) | 1:A:57:ARG:H | 1:A:59:ILE:H | 12 | 0.11 |
| (1,288) | 1:A:52:GLY:H | 1:A:53:MET:HG2 | 15 | 0.11 |
| (1,288) | 1:A:52:GLY:H | 1:A:53:MET:HG3 | 15 | 0.11 |
| (1,277) | 1:A:50:ILE:H | 1:A:51:THR:H | 14 | 0.11 |
| (1,267) | 1:A:48:LEU:HB2 | 1:A:58:VAL:HA | 8 | 0.11 |
| (1,267) | 1:A:48:LEU:HB3 | 1:A:58:VAL:HA | 8 | 0.11 |
| (1,230) | 1:A:45:PHE:H | 1:A:45:PHE:HD1 | 4 | 0.11 |
| (1,230) | 1:A:45:PHE:H | 1:A:45:PHE:HD2 | 4 | 0.11 |
| (1,22) | 1:A:13:GLU:H | 1:A:15:ALA:H | 16 | 0.11 |
| (1,1480) | 1:A:237:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HE1 | 6 | 0.11 |
| (1,1480) | 1:A:237:LEU:HB2 | 1:A:238:TYR:HE2 | 6 | 0.11 |
| (1,1480) | 1:A:237:LEU:HB3 | 1:A:238:TYR:HE1 | 6 | 0.11 |
| (1,1480) | 1:A:237:LEU:HB3 | 1:A:238:TYR:HE2 | 6 | 0.11 |
| (1,145) | 1:A:37:ALA:H | 1:A:39:LEU:H | 12 | 0.11 |
| (1,1345) | 1:A:209:ASN:H | 1:A:210:ALA:HB1 | 1 | 0.11 |
| (1,1345) | 1:A:209:ASN:H | 1:A:210:ALA:HB2 | 1 | 0.11 |
| (1,1345) | 1:A:209:ASN:H | 1:A:210:ALA:HB3 | 1 | 0.11 |
| (1,1345) | 1:A:209:ASN:H | 1:A:210:ALA:HB1 | 12 | 0.11 |
| (1,1345) | 1:A:209:ASN:H | 1:A:210:ALA:HB2 | 12 | 0.11 |
| (1,1345) | 1:A:209:ASN:H | 1:A:210:ALA:HB3 | 12 | 0.11 |
| (1,1345) | 1:A:209:ASN:H | 1:A:210:ALA:HB1 | 15 | 0.11 |
| (1,1345) | 1:A:209:ASN:H | 1:A:210:ALA:HB2 | 15 | 0.11 |
| (1,1345) | 1:A:209:ASN:H | 1:A:210:ALA:HB3 | 15 | 0.11 |
| (1,1341) | 1:A:207:ASP:H | 1:A:213:TYR:HE1 | 9 | 0.11 |
| (1,1341) | 1:A:207:ASP:H | 1:A:213:TYR:HE2 | 9 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1304) | 1:A:200:LEU:HG | 1:A:201:GLY:H | 9 | 0.11 |
| (1,1269) | 1:A:195:ALA:H | 1:A:198:HIS:H | 6 | 0.11 |
| (1,123) | 1:A:29:THR:HG21 | 1:A:38:LYS:H | 8 | 0.11 |
| (1,123) | 1:A:29:THR:HG22 | 1:A:38:LYS:H | 8 | 0.11 |
| (1,123) | 1:A:29:THR:HG23 | 1:A:38:LYS:H | 8 | 0.11 |
| (1,1222) | 1:A:184:LEU:HA | 1:A:185:GLY:H | 7 | 0.11 |
| (1,1222) | 1:A:184:LEU:HA | 1:A:185:GLY:H | 9 | 0.11 |
| (1,1208) | 1:A:179:THR:HB | 1:A:185:GLY:H | 8 | 0.11 |
| (1,1198) | 1:A:178:TRP:HZ2 | 1:A:186:ILE:HB | 14 | 0.11 |
| (1,1176) | 1:A:176:GLU:H | 1:A:177:ARG:H | 5 | 0.11 |
| (1,1176) | 1:A:176:GLU:H | 1:A:177:ARG:H | 7 | 0.11 |
| (1,1160) | 1:A:173:ASP:H | 1:A:174:GLU:H | 16 | 0.11 |
| (1,1135) | 1:A:171:HIS:H | 1:A:172:PHE:HD1 | 1 | 0.11 |
| (1,1135) | 1:A:171:HIS:H | 1:A:172:PHE:HD2 | 1 | 0.11 |
| (1,1135) | 1:A:171:HIS:H | 1:A:172:PHE:HD1 | 15 | 0.11 |
| (1,1135) | 1:A:171:HIS:H | 1:A:172:PHE:HD2 | 15 | 0.11 |
| (1,1131) | 1:A:170:ALA:H | 1:A:171:HIS:HD2 | 6 | 0.11 |
| (1,11) | 1:A:10:LEU:H | 1:A:13:GLU:H | 7 | 0.11 |
| (1,11) | 1:A:10:LEU:H | 1:A:13:GLU:H | 8 | 0.11 |
| (1,107) | 1:A:25:TYR:HA | 1:A:25:TYR:HE1 | 12 | 0.11 |
| (1,107) | 1:A:25:TYR:HA | 1:A:25:TYR:HE2 | 12 | 0.11 |
| (1,107) | 1:A:25:TYR:HA | 1:A:25:TYR:HE1 | 13 | 0.11 |
| (1,107) | 1:A:25:TYR:HA | 1:A:25:TYR:HE2 | 13 | 0.11 |
| (1,1058) | 1:A:156:LEU:HB2 | 1:A:178:TRP:HH2 | 4 | 0.11 |
| (1,1058) | 1:A:156:LEU:HB3 | 1:A:178:TRP:HH2 | 4 | 0.11 |
| (1,1058) | 1:A:156:LEU:HB2 | 1:A:178:TRP:HH2 | 15 | 0.11 |
| (1,1058) | 1:A:156:LEU:HB3 | 1:A:178:TRP:HH2 | 15 | 0.11 |
| (1,1035) | 1:A:149:PHE:HB2 | 1:A:150:ASP:H | 2 | 0.11 |
| (1,1020) | 1:A:142:ALA:HB1 | 1:A:145:ASP:H | 1 | 0.11 |
| (1,1020) | 1:A:142:ALA:HB2 | 1:A:145:ASP:H | 1 | 0.11 |
| (1,1020) | 1:A:142:ALA:HB3 | 1:A:145:ASP:H | 1 | 0.11 |

10 Dihedral-angle violation analysis

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