# Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

Jun 5, 2023 – 12:29 PM EDT

| | | |
|---|---|---|
| PDB ID | : | 2M2K |
| BMRB ID | : | 15440 |
| Title | : | The structure of HasB CTD |
| Authors | : | Prochnicka-Chalufour, A.; Lefevre, J.; Simenel, C.; Delepelaire, P.; Wandersman, C.; Delepierre, M.; Izadi-Pruneyre, N. |
| Deposited on | : | 2012-12-26 |

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

We welcome your comments at *validation@mail.wwpdb.org*
A user guide is available at
https://www.wwpdb.org/validation/2017/NMRValidationReportHelp
with specific help available everywhere you see the (i) symbol.

The types of validation reports are described at
http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types.

The following versions of software and data (see references (1)) were used in the production of this report:

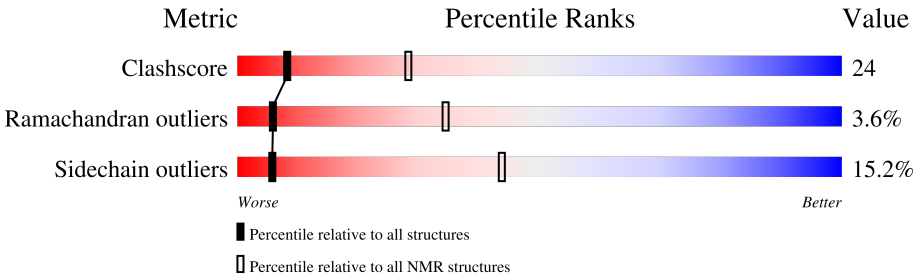
| | | |
|---|---|---|
| MolProbity | : | 4.02b-467 |
| Percentile statistics | : | 20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019) |
| wwPDB-RCI | : | v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005) |
| PANAV | : | Wang et al. (2010) |
| wwPDB-ShiftChecker | : | v1.2 |
| BMRB Restraints Analysis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

# 1 Overall quality at a glance (i)

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

The overall completeness of chemical shifts assignment is 88%.

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




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

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

| Mol | Chain | Length | Quality of chain |
|---|---|---|---|
| 1 | A | 131 | 35% 31% 5% 30% |

# 2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 20 models. Model 7 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

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

| Well-defined (core) protein residues | | | |
|---|---|---|---|
| **Well-defined core** | **Residue range (total)** | **Backbone RMSD (Å)** | **Medoid model** |
| 1 | A:37-A:128 (92) | 0.82 | 7 |

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

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

The models can be grouped into 3 clusters and 2 single-model clusters were found.

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

# 3 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2046 atoms, of which 1037 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called HasB protein.

| Mol | Chain | Residues | Atoms | | | | | Trace |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | Total | C | H | N | O | |
| 1 | A | 131 | 2046 | 632 | 1037 | 193 | 184 | 0 |

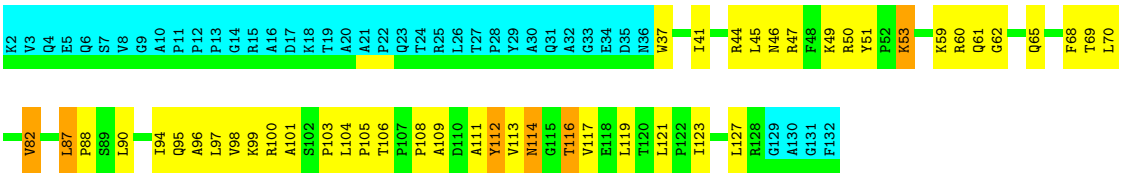
# 4 Residue-property plots (i)

## 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: HasB protein

Chain A: 35% 31% 5% 30%



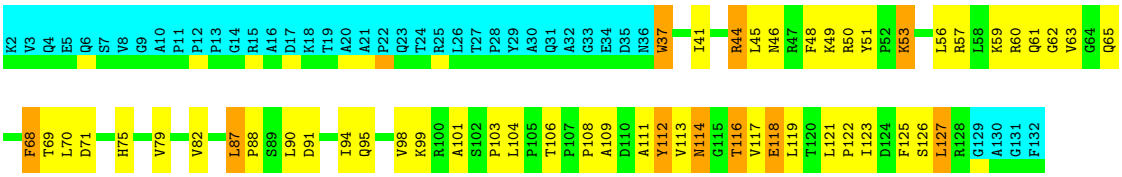

## 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

### 4.2.1 Score per residue for model 1

• Molecule 1: HasB protein

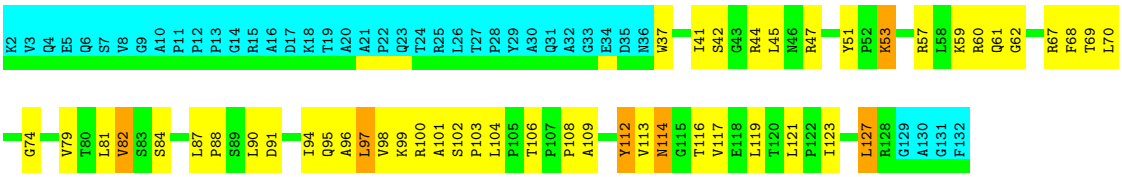
Chain A: 30% 33% 8% 30%




### 4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: HasB protein

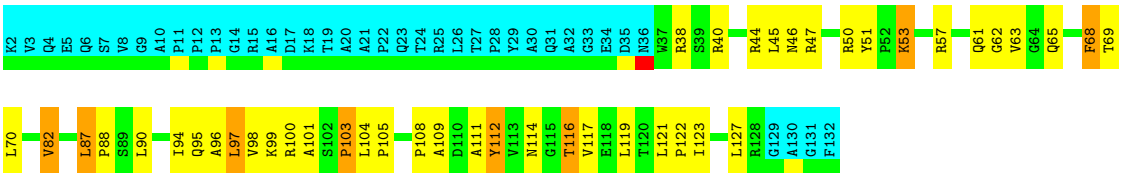
Chain A: 33% 33% 5% 30%




### 4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: HasB protein

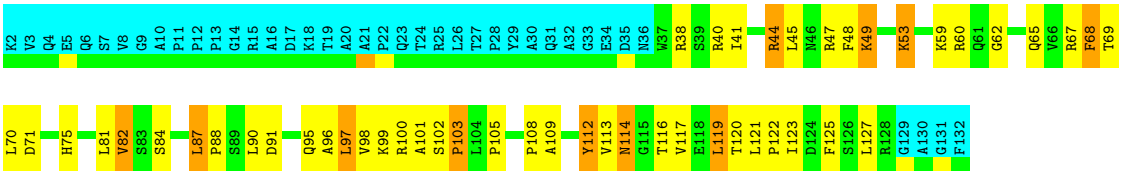
Chain A: 37% 27% 6% 30%




### 4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: HasB protein

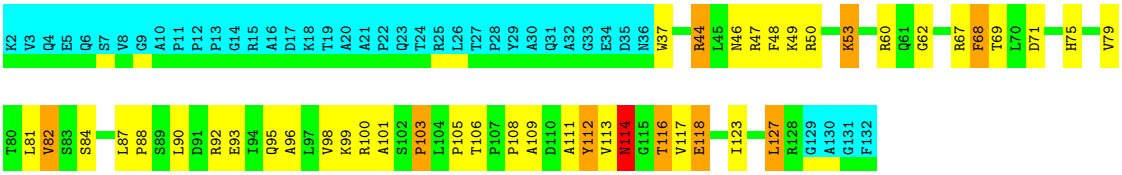
Chain A: 32% 30% 8% 30%




### 4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: HasB protein

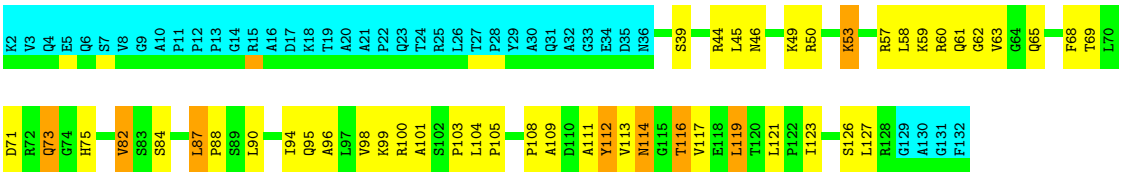
Chain A: 37% 26% 7% • 30%




### 4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: HasB protein

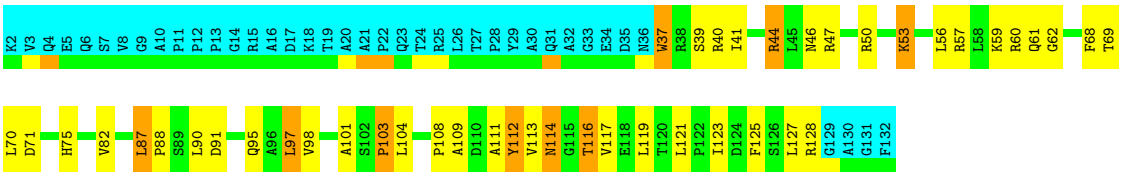
Chain A: 34% 31% 6% 30%




### 4.2.7 Score per residue for model 7 (medoid)

- Molecule 1: HasB protein

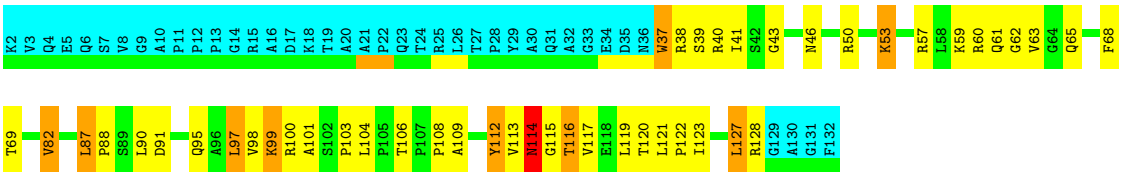
Chain A: 36% 27% 7% 30%




### 4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: HasB protein

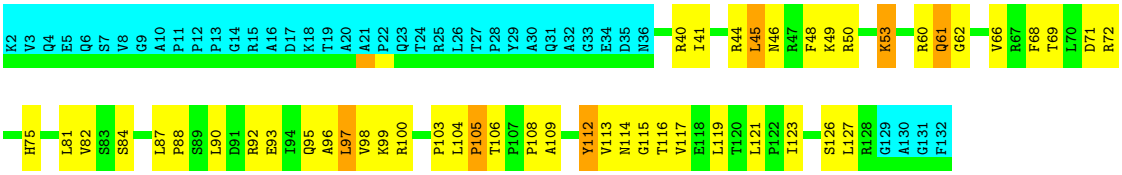
Chain A: 34% 28% 7% • 30%




### 4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: HasB protein

Chain A: 33% 33% 5% 30%



### 4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: HasB protein

Chain A: 34% 30% 7% 30%

K2 V3 Q4 E5 Q6 S7 V8 G9 A10 P11 P12 P13 G14 R15 A16 D17 K18 T19 A20 A21 P22 Q23 T24 R25 L26 T27 P28 Y29 A30 Q31 A32 G33 E34 D35 N36 W37 R44 L45 N46 R47 F48 K49 R50 Y51 P52 K53 L56 R60 Q61 Q65 Y66 R67 F68 T69 L70 D71

G74 H75 V82 L87 P88 S89 L90 D91 R92 E93 I94 Q95 A96 L97 V98 K99 R100 A101 S102 P103 L104 P105 T106 P107 P108 A109 D110 A111 Y112 V113 N114 G115 T116 V117 E118 L119 T120 L121 P122 I123 L127 R128 G129 A130 G131 F132

### 4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: HasB protein

Chain A: 27% 37% 6% 30%

K2 V3 Q4 E5 Q6 S7 V8 G9 A10 P11 P12 P13 G14 R15 A16 D17 K18 T19 A20 A21 P22 Q23 T24 R25 L26 T27 P28 Y29 A30 Q31 A32 G33 E34 D35 N36 R40 R44 L45 N46 R47 R50 Y51 P52 K53 L56 R57 L58 K59 R60 Q61 G62 V63 G64 Q65 F68

T69 L70 D71 H75 V82 S83 S84 L87 P88 S89 L90 D91 R92 E93 I94 Q95 A96 L97 V98 K99 R100 A101 S102 P103 L104 P105 T106 P107 P108 A109 D110 A111 Y112 V113 N114 G115 T116 V117 E118 L119 T120 L121 P122 I123 D124 F125 S126 L127 R128 G129 A130 G131 F132

### 4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: HasB protein

Chain A: 31% 30% 8% • 30%

K2 V3 Q4 E5 Q6 S7 V8 G9 A10 P11 P12 P13 G14 R15 A16 D17 K18 T19 A20 A21 P22 Q23 T24 R25 L26 T27 P28 Y29 A30 Q31 A32 G33 E34 D35 N36 W37 I41 S42 G43 R44 L45 N46 R47 F48 K49 R50 Y51 P52 K53 R60 Q61 G62 V63 F68 T69 L70

L81 V82 S83 S84 A85 C86 L87 P88 S89 L90 E93 I94 Q95 A96 L97 V98 K99 R100 P103 L104 P105 P108 A109 Y112 V113 N114 G115 T116 V117 E118 L119 T120 L121 P122 I123 D124 F125 S126 L127 R128 G129 A130 G131 F132

### 4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: HasB protein

Chain A: 31% 33% 5% • 30%

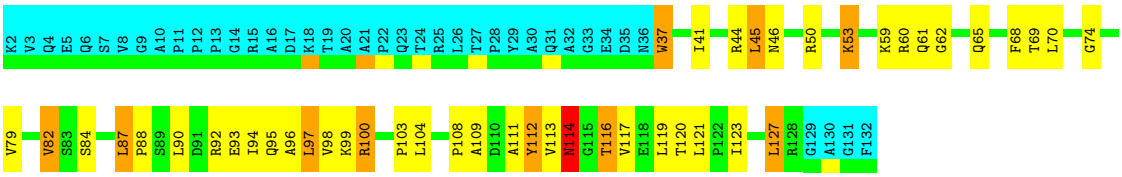
K2 V3 Q4 E5 Q6 S7 V8 G9 A10 P11 P12 P13 G14 R15 A16 D17 K18 T19 A20 A21 P22 Q23 T24 R25 L26 T27 P28 Y29 A30 Q31 A32 G33 E34 D35 N36 W37 R38 S39 R40 I41 R44 L45 N46 R50 Y51 P52 K53 L56 R57 L58 K59 R60 Q61 G62 V63 G64

F68 T69 L70 D71 H75 V82 S83 G86 L87 P88 S89 L90 D91 I94 Q95 A96 L97 V98 K99 R100 A101 S102 P103 L104 P105 P108 A109 D110 A111 Y112 V113 N114 G115 T116 V117 I123 L127 R128 G129 A130 G131 F132

### 4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: HasB protein

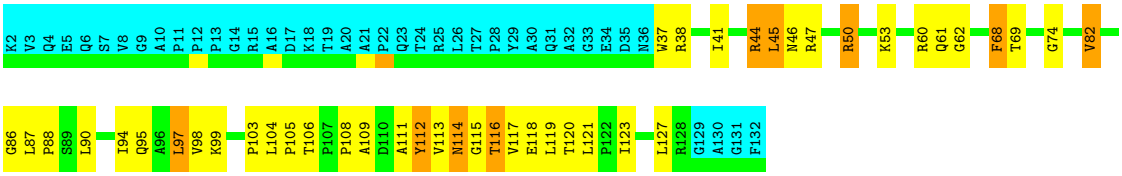
Chain A: 35% 27% 8% • 30%




### 4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: HasB protein

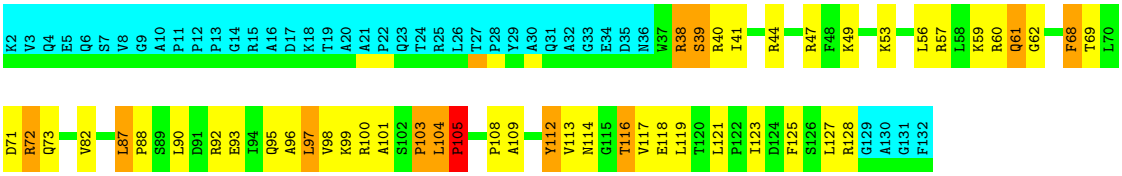
Chain A: 37% 27% 7% 30%




### 4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: HasB protein

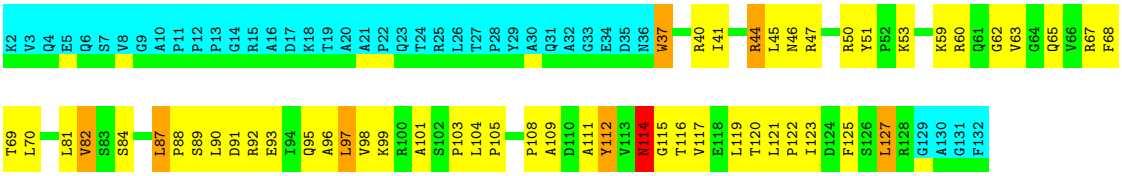
Chain A: 33% 28% 8% • 30%




### 4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: HasB protein

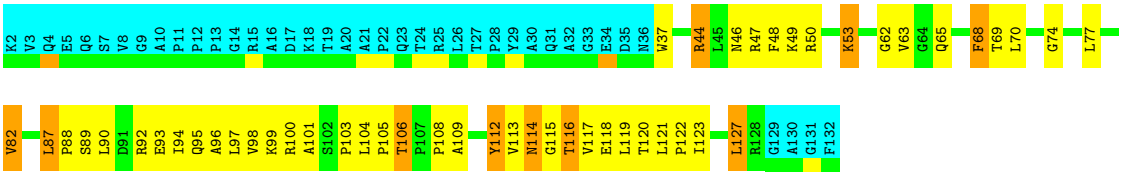
Chain A: 30% 34% 5% • 30%



### 4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: HasB protein

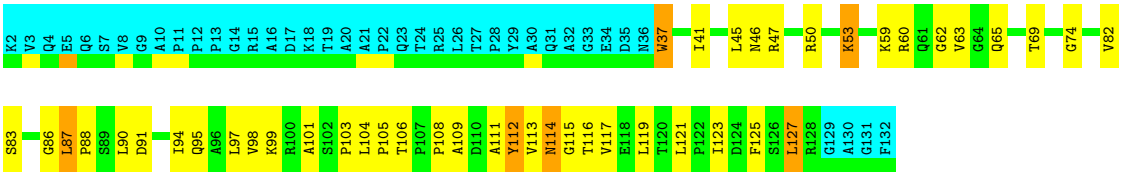
Chain A: 32% 31% 8% 30%




### 4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: HasB protein

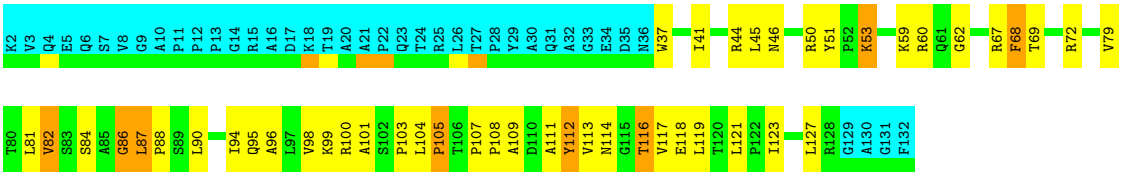
Chain A: 36% 30% 5% 30%




### 4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: HasB protein

Chain A: 34% 30% 6% 30%



# 5 Refinement protocol and experimental data overview (i)

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

Of the 500 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy.*

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

| Software name | Classification | Version |
|---|---|---|
| CNS 1.2 | structure solution | |
| Aria 2.2 | structure solution | |
| Aria 2.2 | refinement | |
| CNS 1.2 | refinement | |

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

| Chemical shift file(s) | working_cs.cif |
|---|---|
| Number of chemical shift lists | 1 |
| Total number of shifts | 1576 |
| Number of shifts mapped to atoms | 1576 |
| Number of unparsed shifts | 0 |
| Number of shifts with mapping errors | 0 |
| Number of shifts with mapping warnings | 0 |
| Assignment completeness (well-defined parts) | 88% |

# 6 Model quality (i)

## 6.1 Standard geometry (i)

There are no covalent bond-length or bond-angle outliers.

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

## 6.2 Too-close contacts (i)

In the following table, the Non-H and H(model) columns list the number of non-hydrogen atoms and hydrogen atoms in each chain respectively. The H(added) column lists the number of hydrogen atoms added and optimized by MolProbity. The Clashes column lists the number of clashes averaged over the ensemble.

| Mol | Chain | Non-H | H(model) | H(added) | Clashes |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | 728 | 767 | 766 | 37±4 |
| All | All | 14560 | 15340 | 15320 | 731 |

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 24.

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:ASN:HA | 1:A:50:ARG:HB2 | 0.94 | 1.40 | 19 | 15 |
| 1:A:62:GLY:HA2 | 1:A:127:LEU:HG | 0.91 | 1.42 | 7 | 16 |
| 1:A:44:ARG:HG3 | 1:A:103:PRO:HB2 | 0.87 | 1.45 | 5 | 2 |
| 1:A:60:ARG:HG3 | 1:A:93:GLU:HG2 | 0.85 | 1.47 | 12 | 3 |
| 1:A:87:LEU:HA | 1:A:90:LEU:HD12 | 0.83 | 1.50 | 9 | 10 |
| 1:A:62:GLY:HA3 | 1:A:87:LEU:HD11 | 0.82 | 1.52 | 9 | 3 |
| 1:A:98:VAL:HG11 | 1:A:123:ILE:HG21 | 0.76 | 1.57 | 3 | 20 |
| 1:A:79:VAL:HG11 | 1:A:99:LYS:HG3 | 0.75 | 1.58 | 14 | 2 |
| 1:A:59:LYS:HG2 | 1:A:60:ARG:HG2 | 0.73 | 1.60 | 19 | 12 |
| 1:A:108:PRO:HB2 | 1:A:111:ALA:HB3 | 0.73 | 1.60 | 15 | 13 |
| 1:A:112:TYR:HB3 | 1:A:117:VAL:HG13 | 0.72 | 1.60 | 16 | 13 |
| 1:A:41:ILE:HG23 | 1:A:103:PRO:HG2 | 0.71 | 1.61 | 1 | 5 |
| 1:A:62:GLY:HA2 | 1:A:127:LEU:CG | 0.71 | 2.14 | 8 | 12 |
| 1:A:109:ALA:HA | 1:A:112:TYR:CE1 | 0.71 | 2.20 | 3 | 19 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|---|---|---|---|---|---|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:87:LEU:HB3 | 1:A:90:LEU:HB2 | 0.71 | 1.62 | 7 | 18 |
| 1:A:57:ARG:HA | 1:A:61:GLN:HG2 | 0.70 | 1.63 | 13 | 2 |
| 1:A:63:VAL:HG12 | 1:A:127:LEU:HD12 | 0.69 | 1.64 | 13 | 3 |
| 1:A:59:LYS:HD2 | 1:A:93:GLU:HG2 | 0.68 | 1.63 | 14 | 1 |
| 1:A:69:THR:HA | 1:A:117:VAL:O | 0.68 | 1.89 | 3 | 20 |
| 1:A:95:GLN:HB3 | 1:A:99:LYS:HE3 | 0.67 | 1.65 | 19 | 10 |
| 1:A:53:LYS:HE3 | 1:A:53:LYS:HA | 0.66 | 1.66 | 14 | 13 |
| 1:A:112:TYR:CD2 | 1:A:117:VAL:HG13 | 0.66 | 2.26 | 18 | 17 |
| 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:108:PRO:HD2 | 0.65 | 1.67 | 19 | 6 |
| 1:A:96:ALA:O | 1:A:100:ARG:HB3 | 0.65 | 1.92 | 4 | 12 |
| 1:A:87:LEU:HD11 | 1:A:127:LEU:HD11 | 0.64 | 1.67 | 16 | 4 |
| 1:A:45:LEU:HB3 | 1:A:50:ARG:HD2 | 0.64 | 1.67 | 14 | 1 |
| 1:A:63:VAL:H | 1:A:127:LEU:HD12 | 0.64 | 1.53 | 3 | 7 |
| 1:A:41:ILE:O | 1:A:44:ARG:HG2 | 0.64 | 1.93 | 2 | 1 |
| 1:A:112:TYR:HD2 | 1:A:117:VAL:HG13 | 0.63 | 1.53 | 8 | 6 |
| 1:A:44:ARG:HG2 | 1:A:103:PRO:HG2 | 0.63 | 1.71 | 4 | 1 |
| 1:A:97:LEU:HD23 | 1:A:98:VAL:HG23 | 0.62 | 1.71 | 15 | 8 |
| 1:A:62:GLY:HA3 | 1:A:87:LEU:CD1 | 0.62 | 2.24 | 9 | 4 |
| 1:A:71:ASP:HB3 | 1:A:75:HIS:HB3 | 0.61 | 1.71 | 1 | 8 |
| 1:A:44:ARG:HD3 | 1:A:105:PRO:HB3 | 0.61 | 1.71 | 17 | 1 |
| 1:A:123:ILE:O | 1:A:123:ILE:HG13 | 0.60 | 1.96 | 5 | 13 |
| 1:A:44:ARG:HB3 | 1:A:103:PRO:HB2 | 0.59 | 1.74 | 13 | 10 |
| 1:A:119:LEU:CD1 | 1:A:121:LEU:HG | 0.59 | 2.27 | 14 | 13 |
| 1:A:38:ARG:HA | 1:A:41:ILE:HB | 0.59 | 1.74 | 4 | 1 |
| 1:A:95:GLN:O | 1:A:99:LYS:HB3 | 0.58 | 1.97 | 20 | 16 |
| 1:A:44:ARG:HD3 | 1:A:103:PRO:HB2 | 0.58 | 1.73 | 16 | 1 |
| 1:A:62:GLY:CA | 1:A:127:LEU:HG | 0.58 | 2.25 | 7 | 5 |
| 1:A:74:GLY:HA2 | 1:A:104:LEU:HB3 | 0.58 | 1.75 | 14 | 5 |
| 1:A:57:ARG:HA | 1:A:61:GLN:CG | 0.58 | 2.28 | 13 | 1 |
| 1:A:60:ARG:HG3 | 1:A:93:GLU:HB2 | 0.58 | 1.74 | 14 | 1 |
| 1:A:119:LEU:HD12 | 1:A:121:LEU:HG | 0.58 | 1.73 | 6 | 9 |
| 1:A:44:ARG:HB3 | 1:A:103:PRO:CB | 0.58 | 2.28 | 17 | 10 |
| 1:A:41:ILE:O | 1:A:44:ARG:HD3 | 0.58 | 1.99 | 4 | 1 |
| 1:A:57:ARG:HB3 | 1:A:126:SER:HB2 | 0.58 | 1.74 | 1 | 1 |
| 1:A:79:VAL:HG11 | 1:A:99:LYS:HD3 | 0.57 | 1.75 | 1 | 1 |
| 1:A:97:LEU:HD22 | 1:A:98:VAL:N | 0.57 | 2.14 | 7 | 4 |
| 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:60:ARG:HB2 | 0.57 | 1.76 | 16 | 3 |
| 1:A:106:THR:O | 1:A:108:PRO:HD3 | 0.57 | 2.00 | 18 | 9 |
| 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:120:THR:HG23 | 0.57 | 1.75 | 4 | 7 |
| 1:A:53:LYS:HA | 1:A:53:LYS:HE2 | 0.57 | 1.75 | 9 | 1 |
| 1:A:69:THR:CG2 | 1:A:116:THR:HB | 0.57 | 2.29 | 8 | 8 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|---|---|---|---|---|---|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:46:ASN:HA | 1:A:50:ARG:HG2 | 0.56 | 1.77 | 14 | 1 |
| 1:A:61:GLN:HB3 | 1:A:127:LEU:HA | 0.56 | 1.75 | 1 | 2 |
| 1:A:101:ALA:O | 1:A:103:PRO:HD3 | 0.56 | 2.01 | 3 | 15 |
| 1:A:44:ARG:O | 1:A:47:ARG:HB3 | 0.56 | 2.01 | 4 | 4 |
| 1:A:60:ARG:HD2 | 1:A:90:LEU:HA | 0.56 | 1.78 | 2 | 3 |
| 1:A:90:LEU:O | 1:A:94:ILE:HG12 | 0.56 | 2.00 | 13 | 9 |
| 1:A:121:LEU:HD22 | 1:A:121:LEU:N | 0.55 | 2.16 | 10 | 1 |
| 1:A:44:ARG:HG3 | 1:A:103:PRO:HG2 | 0.55 | 1.78 | 16 | 2 |
| 1:A:73:GLN:HE21 | 1:A:73:GLN:HA | 0.55 | 1.61 | 6 | 1 |
| 1:A:60:ARG:HD2 | 1:A:60:ARG:O | 0.55 | 2.02 | 15 | 1 |
| 1:A:97:LEU:O | 1:A:101:ALA:HB3 | 0.54 | 2.02 | 3 | 5 |
| 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:124:ASP:HA | 0.54 | 1.78 | 11 | 1 |
| 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:104:LEU:HB2 | 0.54 | 1.79 | 10 | 1 |
| 1:A:46:ASN:CA | 1:A:50:ARG:HB2 | 0.53 | 2.33 | 1 | 4 |
| 1:A:44:ARG:CZ | 1:A:105:PRO:HA | 0.53 | 2.34 | 20 | 2 |
| 1:A:44:ARG:HD2 | 1:A:105:PRO:HD3 | 0.53 | 1.79 | 4 | 1 |
| 1:A:40:ARG:HB2 | 1:A:105:PRO:CG | 0.53 | 2.33 | 11 | 2 |
| 1:A:41:ILE:HG23 | 1:A:44:ARG:NE | 0.53 | 2.18 | 2 | 1 |
| 1:A:114:ASN:HD22 | 1:A:115:GLY:N | 0.53 | 2.02 | 12 | 4 |
| 1:A:70:LEU:HB3 | 1:A:104:LEU:HB2 | 0.53 | 1.79 | 14 | 4 |
| 1:A:44:ARG:NE | 1:A:105:PRO:HA | 0.53 | 2.19 | 12 | 1 |
| 1:A:72:ARG:HB2 | 1:A:107:PRO:HB3 | 0.53 | 1.79 | 20 | 1 |
| 1:A:71:ASP:HB3 | 1:A:75:HIS:H | 0.53 | 1.63 | 5 | 3 |
| 1:A:45:LEU:HD11 | 1:A:98:VAL:HG22 | 0.53 | 1.80 | 19 | 2 |
| 1:A:41:ILE:HG23 | 1:A:103:PRO:HD2 | 0.52 | 1.82 | 14 | 5 |
| 1:A:98:VAL:HG11 | 1:A:123:ILE:CG2 | 0.52 | 2.33 | 15 | 3 |
| 1:A:37:TRP:HA | 1:A:40:ARG:HG2 | 0.52 | 1.81 | 8 | 2 |
| 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:108:PRO:CD | 0.52 | 2.33 | 2 | 6 |
| 1:A:81:LEU:HD21 | 1:A:84:SER:HB2 | 0.52 | 1.80 | 2 | 7 |
| 1:A:46:ASN:HA | 1:A:50:ARG:HB3 | 0.52 | 1.82 | 9 | 1 |
| 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:105:PRO:HD2 | 0.52 | 1.82 | 16 | 1 |
| 1:A:60:ARG:HG3 | 1:A:93:GLU:CG | 0.51 | 2.35 | 9 | 1 |
| 1:A:62:GLY:N | 1:A:125:PHE:HB2 | 0.51 | 2.19 | 16 | 4 |
| 1:A:68:PHE:O | 1:A:118:GLU:HA | 0.51 | 2.05 | 20 | 7 |
| 1:A:61:GLN:O | 1:A:90:LEU:HD13 | 0.51 | 2.06 | 10 | 1 |
| 1:A:41:ILE:HA | 1:A:44:ARG:HD2 | 0.51 | 1.81 | 4 | 1 |
| 1:A:119:LEU:CD1 | 1:A:121:LEU:HD21 | 0.51 | 2.35 | 10 | 1 |
| 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:39:SER:N | 0.51 | 2.21 | 8 | 1 |
| 1:A:95:GLN:NE2 | 1:A:123:ILE:HD11 | 0.51 | 2.19 | 14 | 10 |
| 1:A:109:ALA:O | 1:A:113:VAL:HG13 | 0.51 | 2.06 | 11 | 10 |
| 1:A:67:ARG:HD3 | 1:A:118:GLU:OE2 | 0.51 | 2.05 | 10 | 1 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|---|---|---|---|---|---|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:112:TYR:HB2 | 1:A:116:THR:HA | 0.51 | 1.81 | 15 | 7 |
| 1:A:65:GLN:HG3 | 1:A:84:SER:OG | 0.50 | 2.06 | 6 | 2 |
| 1:A:44:ARG:HG2 | 1:A:103:PRO:CG | 0.50 | 2.36 | 4 | 1 |
| 1:A:65:GLN:H | 1:A:83:SER:HA | 0.50 | 1.66 | 19 | 1 |
| 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:104:LEU:HG | 0.50 | 1.82 | 3 | 2 |
| 1:A:57:ARG:HG3 | 1:A:58:LEU:HG | 0.50 | 1.83 | 6 | 1 |
| 1:A:65:GLN:O | 1:A:82:VAL:HG23 | 0.50 | 2.06 | 14 | 4 |
| 1:A:87:LEU:CD1 | 1:A:127:LEU:HD11 | 0.50 | 2.37 | 12 | 3 |
| 1:A:48:PHE:O | 1:A:49:LYS:HG2 | 0.49 | 2.07 | 5 | 4 |
| 1:A:61:GLN:HB2 | 1:A:126:SER:O | 0.49 | 2.07 | 9 | 2 |
| 1:A:56:LEU:HG | 1:A:125:PHE:CE2 | 0.49 | 2.42 | 11 | 1 |
| 1:A:60:ARG:HD2 | 1:A:60:ARG:C | 0.49 | 2.27 | 15 | 1 |
| 1:A:108:PRO:HB2 | 1:A:111:ALA:CB | 0.49 | 2.36 | 1 | 2 |
| 1:A:56:LEU:HG | 1:A:125:PHE:HE2 | 0.49 | 1.68 | 11 | 1 |
| 1:A:86:GLY:O | 1:A:88:PRO:HD3 | 0.49 | 2.08 | 13 | 1 |
| 1:A:95:GLN:O | 1:A:99:LYS:N | 0.49 | 2.44 | 1 | 2 |
| 1:A:67:ARG:HG2 | 1:A:82:VAL:HG22 | 0.49 | 1.85 | 17 | 4 |
| 1:A:79:VAL:HG21 | 1:A:99:LYS:HG3 | 0.49 | 1.84 | 2 | 1 |
| 1:A:48:PHE:O | 1:A:49:LYS:HG3 | 0.49 | 2.07 | 12 | 1 |
| 1:A:48:PHE:O | 1:A:49:LYS:HB2 | 0.49 | 2.08 | 1 | 1 |
| 1:A:56:LEU:HG | 1:A:125:PHE:CD1 | 0.49 | 2.43 | 1 | 1 |
| 1:A:92:ARG:O | 1:A:96:ALA:HB2 | 0.48 | 2.07 | 14 | 3 |
| 1:A:37:TRP:O | 1:A:41:ILE:HG13 | 0.48 | 2.08 | 13 | 3 |
| 1:A:119:LEU:HD13 | 1:A:121:LEU:HD21 | 0.48 | 1.85 | 10 | 1 |
| 1:A:44:ARG:CZ | 1:A:103:PRO:HD2 | 0.48 | 2.38 | 4 | 1 |
| 1:A:95:GLN:HE22 | 1:A:123:ILE:HD11 | 0.48 | 1.68 | 7 | 2 |
| 1:A:57:ARG:HA | 1:A:61:GLN:HB3 | 0.48 | 1.85 | 3 | 1 |
| 1:A:44:ARG:CD | 1:A:103:PRO:HB2 | 0.48 | 2.39 | 16 | 1 |
| 1:A:72:ARG:HG2 | 1:A:73:GLN:N | 0.48 | 2.23 | 16 | 1 |
| 1:A:44:ARG:CD | 1:A:103:PRO:HD2 | 0.48 | 2.38 | 2 | 1 |
| 1:A:53:LYS:HE2 | 1:A:125:PHE:CE2 | 0.48 | 2.44 | 7 | 1 |
| 1:A:40:ARG:C | 1:A:105:PRO:HG3 | 0.48 | 2.29 | 4 | 1 |
| 1:A:91:ASP:O | 1:A:95:GLN:HG2 | 0.48 | 2.08 | 7 | 2 |
| 1:A:87:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:CD1 | 0.48 | 2.38 | 13 | 1 |
| 1:A:44:ARG:HG3 | 1:A:103:PRO:CB | 0.48 | 2.31 | 5 | 1 |
| 1:A:53:LYS:O | 1:A:57:ARG:HG3 | 0.47 | 2.09 | 13 | 4 |
| 1:A:45:LEU:HD22 | 1:A:97:LEU:HD23 | 0.47 | 1.85 | 14 | 1 |
| 1:A:53:LYS:HE3 | 1:A:53:LYS:CA | 0.47 | 2.38 | 20 | 4 |
| 1:A:68:PHE:CE1 | 1:A:70:LEU:HD11 | 0.47 | 2.44 | 4 | 4 |
| 1:A:71:ASP:OD1 | 1:A:73:GLN:HG2 | 0.47 | 2.09 | 16 | 1 |
| 1:A:65:GLN:HA | 1:A:122:PRO:HA | 0.47 | 1.85 | 11 | 7 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|---|---|---|---|---|---|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:40:ARG:CB | 1:A:105:PRO:HG2 | 0.47 | 2.39 | 3 | 3 |
| 1:A:100:ARG:C | 1:A:100:ARG:HD3 | 0.47 | 2.30 | 9 | 1 |
| 1:A:119:LEU:HD11 | 1:A:121:LEU:HG | 0.47 | 1.85 | 19 | 4 |
| 1:A:108:PRO:HG2 | 1:A:117:VAL:HG11 | 0.47 | 1.86 | 18 | 1 |
| 1:A:57:ARG:CB | 1:A:126:SER:HB2 | 0.46 | 2.39 | 1 | 1 |
| 1:A:112:TYR:HB2 | 1:A:116:THR:CA | 0.46 | 2.41 | 8 | 5 |
| 1:A:61:GLN:HB3 | 1:A:126:SER:O | 0.46 | 2.10 | 11 | 1 |
| 1:A:66:VAL:HG12 | 1:A:121:LEU:O | 0.46 | 2.11 | 9 | 1 |
| 1:A:69:THR:HG22 | 1:A:116:THR:HB | 0.46 | 1.88 | 18 | 1 |
| 1:A:41:ILE:HG23 | 1:A:44:ARG:NH1 | 0.46 | 2.26 | 4 | 1 |
| 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:39:SER:N | 0.46 | 2.26 | 16 | 1 |
| 1:A:113:VAL:O | 1:A:114:ASN:HB3 | 0.46 | 2.09 | 6 | 11 |
| 1:A:87:LEU:O | 1:A:91:ASP:HB2 | 0.45 | 2.11 | 1 | 4 |
| 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:108:PRO:HG3 | 0.45 | 1.88 | 16 | 2 |
| 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:90:LEU:HD23 | 0.45 | 1.89 | 15 | 1 |
| 1:A:60:ARG:NH1 | 1:A:94:ILE:HG22 | 0.45 | 2.26 | 15 | 1 |
| 1:A:41:ILE:N | 1:A:105:PRO:HG3 | 0.45 | 2.26 | 12 | 1 |
| 1:A:86:GLY:H | 1:A:87:LEU:HD22 | 0.45 | 1.70 | 15 | 2 |
| 1:A:94:ILE:HB | 1:A:125:PHE:CE1 | 0.45 | 2.47 | 19 | 2 |
| 1:A:41:ILE:HA | 1:A:44:ARG:CD | 0.44 | 2.42 | 4 | 1 |
| 1:A:95:GLN:CB | 1:A:99:LYS:HE3 | 0.44 | 2.40 | 19 | 3 |
| 1:A:56:LEU:O | 1:A:61:GLN:HG3 | 0.44 | 2.12 | 13 | 1 |
| 1:A:49:LYS:O | 1:A:97:LEU:HG | 0.44 | 2.11 | 16 | 1 |
| 1:A:44:ARG:NH1 | 1:A:105:PRO:HA | 0.44 | 2.27 | 20 | 1 |
| 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:94:ILE:HG23 | 0.44 | 1.88 | 10 | 1 |
| 1:A:37:TRP:CZ2 | 1:A:121:LEU:HD21 | 0.44 | 2.48 | 14 | 2 |
| 1:A:62:GLY:CA | 1:A:87:LEU:HD11 | 0.44 | 2.42 | 15 | 1 |
| 1:A:91:ASP:OD1 | 1:A:95:GLN:HG3 | 0.44 | 2.12 | 17 | 1 |
| 1:A:72:ARG:HB3 | 1:A:112:TYR:OH | 0.44 | 2.13 | 20 | 1 |
| 1:A:108:PRO:HG2 | 1:A:112:TYR:CE2 | 0.44 | 2.48 | 4 | 1 |
| 1:A:64:GLY:HA3 | 1:A:83:SER:OG | 0.44 | 2.13 | 13 | 1 |
| 1:A:56:LEU:CD1 | 1:A:60:ARG:HB2 | 0.44 | 2.42 | 7 | 2 |
| 1:A:119:LEU:HD13 | 1:A:121:LEU:HD11 | 0.44 | 1.88 | 10 | 1 |
| 1:A:91:ASP:OD2 | 1:A:95:GLN:HG3 | 0.44 | 2.12 | 2 | 2 |
| 1:A:69:THR:HG22 | 1:A:116:THR:OG1 | 0.44 | 2.13 | 12 | 1 |
| 1:A:67:ARG:HB2 | 1:A:82:VAL:CG2 | 0.43 | 2.43 | 4 | 1 |
| 1:A:62:GLY:HA2 | 1:A:127:LEU:CD1 | 0.43 | 2.43 | 6 | 1 |
| 1:A:43:GLY:O | 1:A:46:ASN:HB3 | 0.43 | 2.13 | 12 | 2 |
| 1:A:65:GLN:HG2 | 1:A:84:SER:OG | 0.43 | 2.13 | 14 | 1 |
| 1:A:61:GLN:O | 1:A:90:LEU:HB3 | 0.43 | 2.13 | 16 | 1 |
| 1:A:44:ARG:CB | 1:A:103:PRO:HB2 | 0.43 | 2.43 | 13 | 1 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|---|---|---|---|---|---|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:45:LEU:HD11 | 1:A:98:VAL:HG13 | 0.43 | 1.89 | 15 | 1 |
| 1:A:71:ASP:CB | 1:A:75:HIS:HB3 | 0.42 | 2.43 | 1 | 2 |
| 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:108:PRO:HD3 | 0.42 | 1.90 | 10 | 1 |
| 1:A:51:TYR:H | 1:A:97:LEU:HD11 | 0.42 | 1.74 | 10 | 1 |
| 1:A:46:ASN:HA | 1:A:50:ARG:CB | 0.42 | 2.45 | 20 | 1 |
| 1:A:92:ARG:HG3 | 1:A:93:GLU:N | 0.42 | 2.30 | 18 | 1 |
| 1:A:108:PRO:CG | 1:A:117:VAL:HG11 | 0.42 | 2.44 | 18 | 1 |
| 1:A:44:ARG:CG | 1:A:103:PRO:HB2 | 0.41 | 2.45 | 4 | 1 |
| 1:A:45:LEU:HD21 | 1:A:97:LEU:O | 0.41 | 2.15 | 9 | 1 |
| 1:A:87:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HD12 | 0.41 | 1.91 | 13 | 1 |
| 1:A:61:GLN:O | 1:A:90:LEU:HD22 | 0.41 | 2.15 | 15 | 1 |
| 1:A:37:TRP:CZ3 | 1:A:119:LEU:HD22 | 0.41 | 2.49 | 10 | 1 |
| 1:A:77:LEU:CD1 | 1:A:116:THR:HG21 | 0.41 | 2.46 | 18 | 1 |
| 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:102:SER:HB3 | 0.41 | 1.92 | 2 | 2 |
| 1:A:72:ARG:HA | 1:A:112:TYR:OH | 0.41 | 2.15 | 9 | 1 |
| 1:A:60:ARG:HG3 | 1:A:93:GLU:HB3 | 0.41 | 1.91 | 10 | 1 |
| 1:A:112:TYR:HB3 | 1:A:116:THR:C | 0.41 | 2.36 | 14 | 1 |
| 1:A:94:ILE:HB | 1:A:125:PHE:CE2 | 0.41 | 2.51 | 1 | 1 |
| 1:A:89:SER:O | 1:A:92:ARG:HG2 | 0.41 | 2.15 | 17 | 2 |
| 1:A:48:PHE:CD2 | 1:A:103:PRO:HG3 | 0.41 | 2.51 | 4 | 1 |
| 1:A:116:THR:OG1 | 1:A:117:VAL:N | 0.41 | 2.54 | 12 | 1 |
| 1:A:37:TRP:CD1 | 1:A:37:TRP:N | 0.40 | 2.89 | 1 | 1 |
| 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:127:LEU:HB2 | 0.40 | 1.92 | 1 | 1 |
| 1:A:101:ALA:C | 1:A:103:PRO:HD3 | 0.40 | 2.37 | 2 | 1 |
| 1:A:41:ILE:HG23 | 1:A:44:ARG:CZ | 0.40 | 2.46 | 4 | 1 |
| 1:A:57:ARG:HA | 1:A:61:GLN:HG3 | 0.40 | 1.93 | 16 | 1 |
| 1:A:74:GLY:O | 1:A:103:PRO:HA | 0.40 | 2.17 | 2 | 1 |
| 1:A:48:PHE:O | 1:A:49:LYS:HB3 | 0.40 | 2.16 | 9 | 1 |
| 1:A:51:TYR:HB2 | 1:A:97:LEU:HG | 0.40 | 1.94 | 11 | 1 |
| 1:A:62:GLY:HA2 | 1:A:87:LEU:CD1 | 0.40 | 2.46 | 16 | 1 |
| 1:A:79:VAL:CG1 | 1:A:99:LYS:HG3 | 0.40 | 2.44 | 20 | 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 | 92/131 (70%) | 77±2 (83±2%) | 12±2 (13±2%) | 3±1 (4±1%) | 6 34 |
| All | All | 1840/2620 (70%) | 1535 (83%) | 238 (13%) | 67 (4%) | 6 34 |

All 7 unique Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|---|---|---|---|---|
| 1 | A | 88 | PRO | 20 |
| 1 | A | 114 | ASN | 20 |
| 1 | A | 105 | PRO | 11 |
| 1 | A | 115 | GLY | 6 |
| 1 | A | 103 | PRO | 5 |
| 1 | A | 86 | GLY | 3 |
| 1 | A | 49 | LYS | 2 |

### 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 | 79/106 (75%) | 67±2 (85±3%) | 12±2 (15±3%) | 6 44 |
| All | All | 1580/2120 (75%) | 1340 (85%) | 240 (15%) | 6 44 |

All 34 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 | 53 | LYS | 20 |
| 1 | A | 82 | VAL | 20 |
| 1 | A | 112 | TYR | 20 |
| 1 | A | 116 | THR | 19 |
| 1 | A | 68 | PHE | 18 |
| 1 | A | 87 | LEU | 15 |
| 1 | A | 97 | LEU | 14 |
| 1 | A | 37 | TRP | 12 |
| 1 | A | 45 | LEU | 12 |
| 1 | A | 44 | ARG | 10 |
| 1 | A | 51 | TYR | 9 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|---|---|---|---|---|
| 1 | A | 127 | LEU | 9 |
| 1 | A | 47 | ARG | 9 |
| 1 | A | 61 | GLN | 7 |
| 1 | A | 114 | ASN | 6 |
| 1 | A | 119 | LEU | 5 |
| 1 | A | 38 | ARG | 4 |
| 1 | A | 92 | ARG | 4 |
| 1 | A | 39 | SER | 4 |
| 1 | A | 128 | ARG | 3 |
| 1 | A | 104 | LEU | 3 |
| 1 | A | 118 | GLU | 2 |
| 1 | A | 93 | GLU | 2 |
| 1 | A | 100 | ARG | 2 |
| 1 | A | 106 | THR | 2 |
| 1 | A | 42 | SER | 1 |
| 1 | A | 49 | LYS | 1 |
| 1 | A | 79 | VAL | 1 |
| 1 | A | 73 | GLN | 1 |
| 1 | A | 99 | LYS | 1 |
| 1 | A | 121 | LEU | 1 |
| 1 | A | 50 | ARG | 1 |
| 1 | A | 72 | ARG | 1 |
| 1 | A | 105 | PRO | 1 |

### 6.3.3 RNA (i)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

## 6.5 Carbohydrates (i)

There are no monosaccharides in this entry.

## 6.6 Ligand geometry (i)

There are no ligands in this entry.

## 6.7 Other polymers (i)

There are no such molecules in this entry.

## 6.8 Polymer linkage issues (i)

There are no chain breaks in this entry.

# 7 Chemical shift validation (i)

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 88% for the well-defined parts and 88% 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 | 1576 |
| Number of shifts mapped to atoms | 1576 |
| Number of unparsed shifts | 0 |
| Number of shifts with mapping errors | 0 |
| Number of shifts with mapping warnings | 0 |
| Number of shift outliers (ShiftChecker) | 1 |

### 7.1.2 Chemical shift referencing (i)

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

| Nucleus | # values | Correction ± precision, *ppm* | Suggested action |
|---|---|---|---|
| $^{13}C_{\alpha}$ | 128 | -0.13 ± 0.14 | None needed (< 0.5 ppm) |
| $^{13}C_{\beta}$ | 116 | 0.07 ± 0.15 | None needed (< 0.5 ppm) |
| $^{13}C'$ | 114 | 0.00 ± 0.13 | None needed (< 0.5 ppm) |
| $^{15}N$ | 115 | 0.03 ± 0.32 | 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 88%, i.e. 1171 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1327. 0 out of 21 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

| | Total | $^{1}H$ | $^{13}C$ | $^{15}N$ |
|---|---|---|---|---|
| Backbone | 438/452 (97%) | 183/183 (100%) | 173/184 (94%) | 82/85 (96%) |
| Sidechain | 675/807 (84%) | 463/525 (88%) | 207/236 (88%) | 5/46 (11%) |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| | Total | $^{1}$H | $^{13}$C | $^{15}$N |
|---|---|---|---|---|
| Aromatic | 58/68 (85%) | 30/33 (91%) | 27/32 (84%) | 1/3 (33%) |
| Overall | 1171/1327 (88%) | 676/741 (91%) | 407/452 (90%) | 88/134 (66%) |

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 88%, i.e. 1576 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1800. 0 out of 24 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

| | Total | $^{1}$H | $^{13}$C | $^{15}$N |
|---|---|---|---|---|
| Backbone | 615/642 (96%) | 258/261 (99%) | 242/262 (92%) | 115/119 (97%) |
| Sidechain | 891/1071 (83%) | 609/695 (88%) | 273/317 (86%) | 9/59 (15%) |
| Aromatic | 70/87 (80%) | 38/42 (90%) | 31/42 (74%) | 1/3 (33%) |
| Overall | 1576/1800 (88%) | 905/998 (91%) | 546/621 (88%) | 125/181 (69%) |

### 7.1.4 Statistically unusual chemical shifts (i)

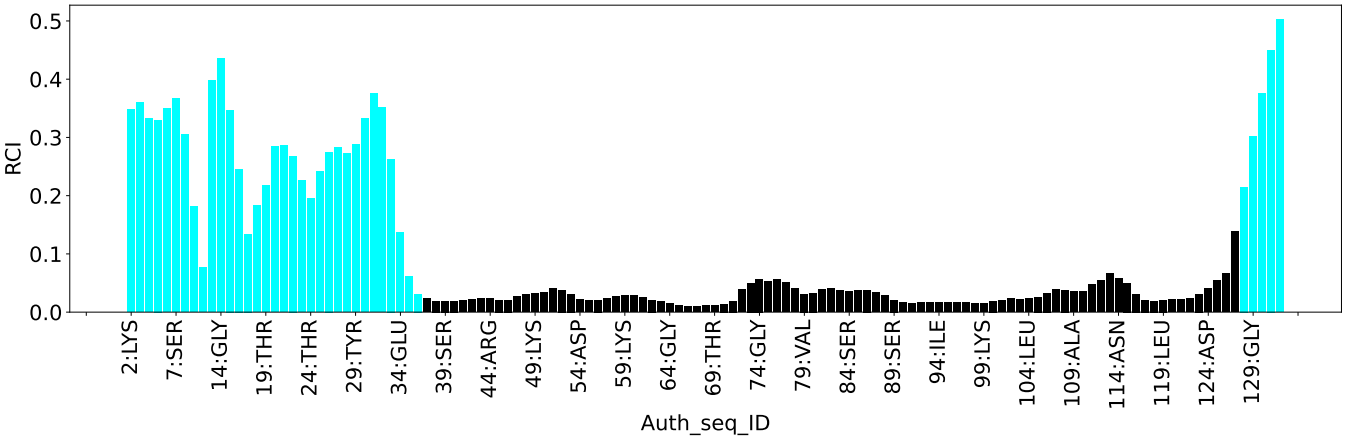
The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

| List Id | Chain | Res | Type | Atom | Shift, *ppm* | Expected range, *ppm* | Z-score |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | 105 | PRO | CD | 58.30 | 45.11 – 55.58 | 7.6 |

### 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:


RCI
0.0
0.1
0.2
0.3
0.4
0.5
2:LYS
7:SER
14:GLY
19:THR
24:THR
29:TYR
34:GLU
39:SER
44:ARG
49:LYS
54:ASP
59:LYS
64:GLY
69:THR
74:GLY
79:VAL
84:SER
89:SER
94:ILE
99:LYS
104:LEU
109:ALA
114:ASN
119:LEU
124:ASP
129:GLY
Auth_seq_ID

# 8 NMR restraints analysis (i)

## 8.1 Conformationally restricting restraints (i)

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

| Description | Value |
|---|---|
| Total distance restraints | 2138 |
| Intra-residue (\|i-j\|=0) | 618 |
| Sequential (\|i-j\|=1) | 480 |
| Medium range (\|i-j\|>1 and \|i-j\|<5) | 410 |
| Long range (\|i-j\|≥5) | 609 |
| Inter-chain | 0 |
| Hydrogen bond restraints | 21 |
| Disulfide bond restraints | 0 |
| Total dihedral-angle restraints | 143 |
| Number of unmapped restraints | 0 |
| Number of restraints per residue | 17.4 |
| Number of long range restraints per residue[1] | 4.7 |

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

## 8.2 Residual restraint violations (i)

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

### 8.2.1 Average number of distance violations per model (i)

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

| Bins (Å) | Average number of violations per model | Max (Å) |
|---|---|---|
| 0.1-0.2 (Small) | 31.1 | 0.2 |
| 0.2-0.5 (Medium) | 13.4 | 0.5 |
| >0.5 (Large) | 2.5 | 3.64 |

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

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

| Bins (°) | Average number of violations per model | Max (°) |
|---|---|---|
| 1.0-10.0 (Small) | 26.1 | 10.0 |
| 10.0-20.0 (Medium) | None | None |
| >20.0 (Large) | None | None |

# 9 Distance violation analysis (i)

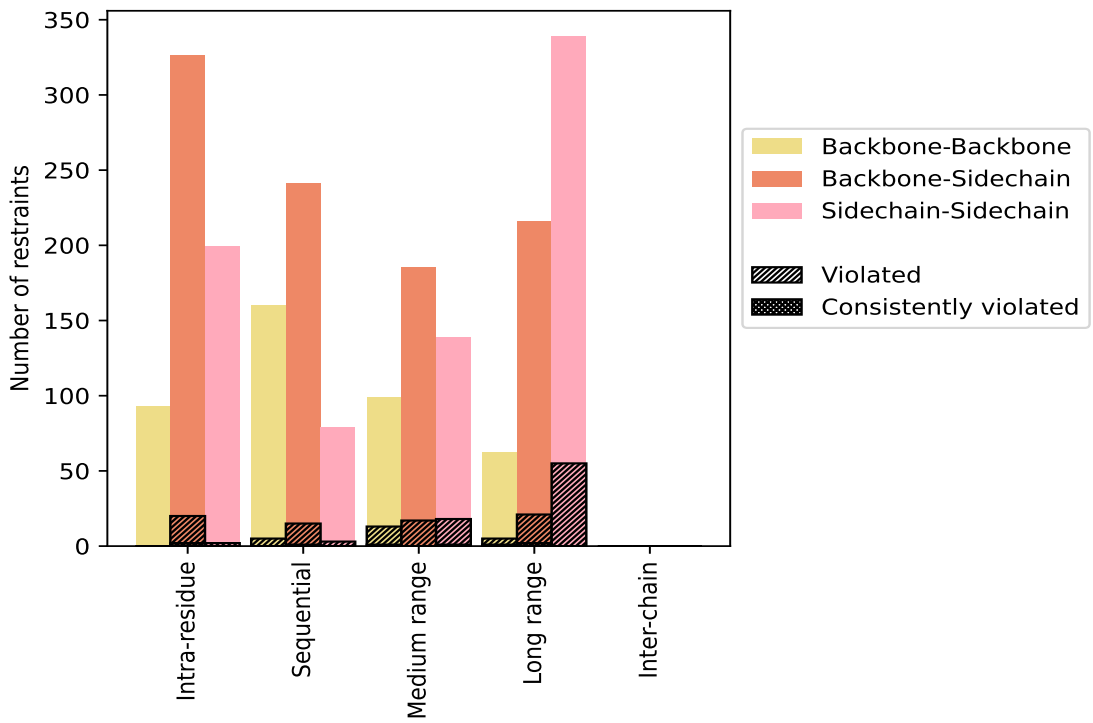
## 9.1 Summary of distance violations (i)

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

| Restraints type | Count | %[1] | Violated[3] | | | Consistently Violated[4] | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | Count | %[2] | %[1] | Count | %[2] | %[1] |
| Intra-residue (\|i-j\|=0) | 618 | 28.9 | 22 | 3.6 | 1.0 | 2 | 0.3 | 0.1 |
| Backbone-Backbone | 93 | 4.3 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 326 | 15.2 | 20 | 6.1 | 0.9 | 2 | 0.6 | 0.1 |
| Sidechain-Sidechain | 199 | 9.3 | 2 | 1.0 | 0.1 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Sequential (\|i-j\|=1) | 480 | 22.5 | 23 | 4.8 | 1.1 | 1 | 0.2 | 0.0 |
| Backbone-Backbone | 160 | 7.5 | 5 | 3.1 | 0.2 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 241 | 11.3 | 15 | 6.2 | 0.7 | 1 | 0.4 | 0.0 |
| Sidechain-Sidechain | 79 | 3.7 | 3 | 3.8 | 0.1 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Medium range (\|i-j\|>1 & \|i-j\|<5) | 410 | 19.2 | 42 | 10.2 | 2.0 | 2 | 0.5 | 0.1 |
| Backbone-Backbone | 86 | 4.0 | 7 | 8.1 | 0.3 | 1 | 1.2 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 185 | 8.7 | 17 | 9.2 | 0.8 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Sidechain-Sidechain | 139 | 6.5 | 18 | 12.9 | 0.8 | 1 | 0.7 | 0.0 |
| Long range (\|i-j\|≥5) | 609 | 28.5 | 81 | 13.3 | 3.8 | 3 | 0.5 | 0.1 |
| Backbone-Backbone | 54 | 2.5 | 5 | 9.3 | 0.2 | 1 | 1.9 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 216 | 10.1 | 21 | 9.7 | 1.0 | 2 | 0.9 | 0.1 |
| Sidechain-Sidechain | 339 | 15.9 | 55 | 16.2 | 2.6 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Inter-chain | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Backbone | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Sidechain-Sidechain | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Hydrogen bond | 21 | 1.0 | 6 | 28.6 | 0.3 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Disulfide bond | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Total | 2138 | 100.0 | 174 | 8.1 | 8.1 | 8 | 0.4 | 0.4 |
| Backbone-Backbone | 414 | 19.4 | 23 | 5.6 | 1.1 | 2 | 0.5 | 0.1 |
| Backbone-Sidechain | 968 | 45.3 | 73 | 7.5 | 3.4 | 5 | 0.5 | 0.2 |
| Sidechain-Sidechain | 756 | 35.4 | 78 | 10.3 | 3.6 | 1 | 0.1 | 0.0 |

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

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




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

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

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

| Model ID | Number of violations | | | | | | Mean (Å) | Max (Å) | SD[6] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | IR[1] | SQ[2] | MR[3] | LR[4] | IC[5] | Total | | | | |
| 1 | 9 | 4 | 15 | 23 | 0 | 51 | 0.29 | 3.44 | 0.53 | 0.17 |
| 2 | 6 | 6 | 12 | 22 | 0 | 46 | 0.31 | 3.49 | 0.59 | 0.16 |
| 3 | 6 | 6 | 15 | 17 | 0 | 44 | 0.32 | 3.4 | 0.59 | 0.16 |
| 4 | 8 | 6 | 13 | 19 | 0 | 46 | 0.32 | 3.64 | 0.65 | 0.17 |
| 5 | 9 | 5 | 16 | 20 | 0 | 50 | 0.28 | 3.3 | 0.53 | 0.15 |
| 6 | 9 | 4 | 12 | 23 | 0 | 48 | 0.31 | 3.48 | 0.57 | 0.16 |
| 7 | 7 | 8 | 11 | 23 | 0 | 49 | 0.31 | 3.36 | 0.57 | 0.16 |
| 8 | 6 | 7 | 16 | 28 | 0 | 57 | 0.28 | 3.2 | 0.49 | 0.16 |
| 9 | 4 | 7 | 13 | 18 | 0 | 42 | 0.35 | 3.53 | 0.64 | 0.18 |
| 10 | 6 | 5 | 12 | 16 | 0 | 39 | 0.37 | 3.51 | 0.67 | 0.17 |
| 11 | 6 | 9 | 16 | 21 | 0 | 52 | 0.3 | 3.38 | 0.54 | 0.16 |

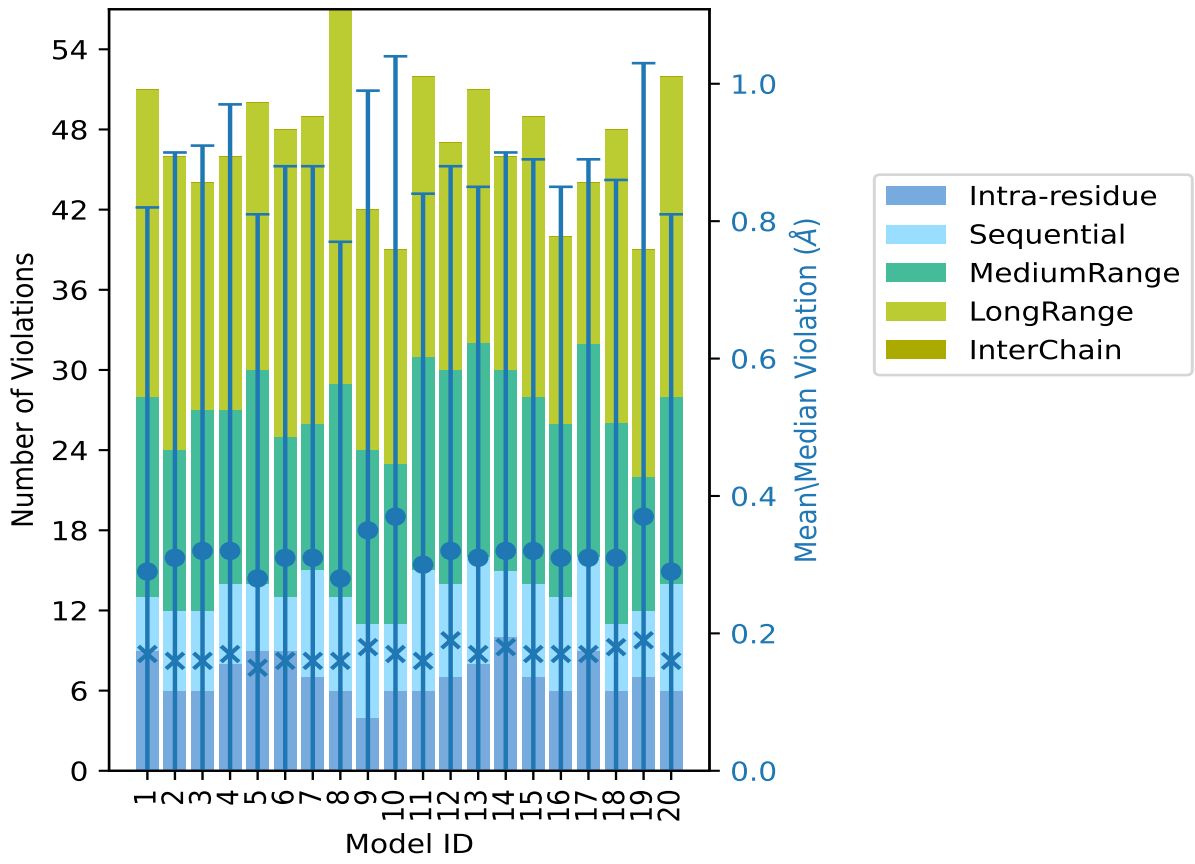
*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Model ID | Number of violations | | | | | | Mean (Å) | Max (Å) | SD[6] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | IR[1] | SQ[2] | MR[3] | LR[4] | IC[5] | Total | | | | |
| 12 | 7 | 7 | 16 | 17 | 0 | 47 | 0.32 | 3.36 | 0.56 | 0.19 |
| 13 | 8 | 8 | 16 | 19 | 0 | 51 | 0.31 | 3.26 | 0.54 | 0.17 |
| 14 | 10 | 5 | 15 | 16 | 0 | 46 | 0.32 | 3.54 | 0.58 | 0.18 |
| 15 | 7 | 7 | 14 | 21 | 0 | 49 | 0.32 | 3.44 | 0.57 | 0.17 |
| 16 | 6 | 7 | 13 | 14 | 0 | 40 | 0.31 | 2.86 | 0.54 | 0.17 |
| 17 | 9 | 7 | 16 | 12 | 0 | 44 | 0.31 | 3.44 | 0.58 | 0.17 |
| 18 | 6 | 5 | 15 | 22 | 0 | 48 | 0.31 | 3.43 | 0.55 | 0.18 |
| 19 | 7 | 5 | 10 | 17 | 0 | 39 | 0.37 | 3.57 | 0.66 | 0.19 |
| 20 | 6 | 8 | 14 | 24 | 0 | 52 | 0.29 | 3.26 | 0.52 | 0.16 |

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

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




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

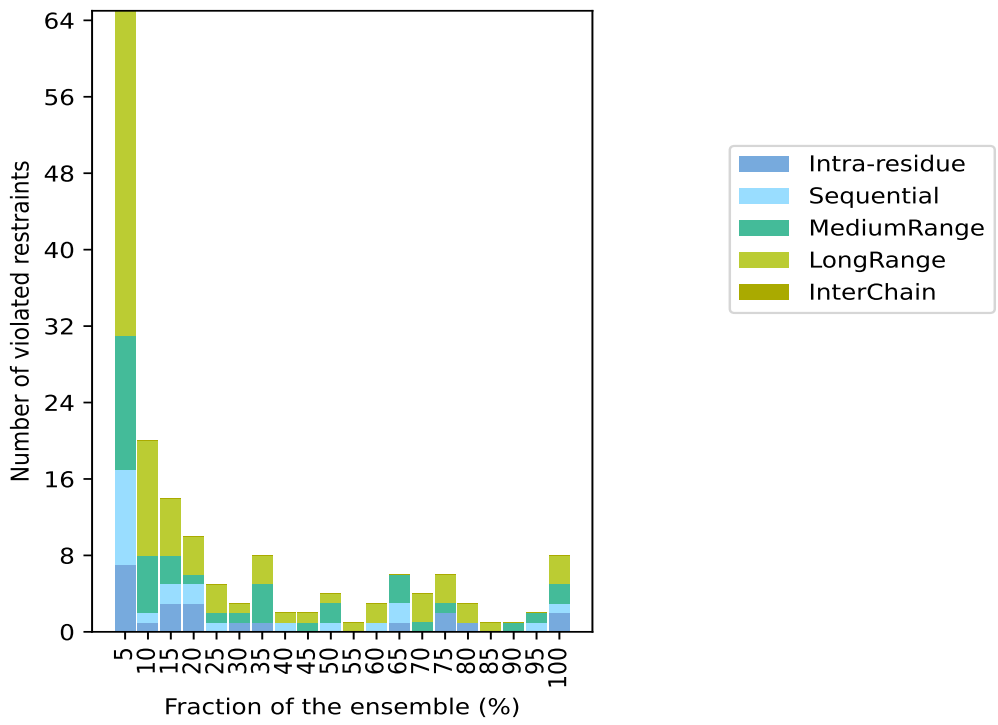
## 9.3 Distance violation statistics for the ensemble (i)

Violation analysis may find that some restraints are violated in few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of the ensemble. In total, 1949(IR:596, SQ:457, MR:368, LR:528, IC:0) restraints are not violated in the ensemble.

| Number of violated restraints | | | | | | Fraction of the ensemble | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| IR[1] | SQ[2] | MR[3] | LR[4] | IC[5] | Total | Count[6] | % |
| 7 | 10 | 14 | 34 | 0 | 65 | 1 | 5.0 |
| 1 | 1 | 6 | 12 | 0 | 20 | 2 | 10.0 |
| 3 | 2 | 3 | 6 | 0 | 14 | 3 | 15.0 |
| 3 | 2 | 1 | 4 | 0 | 10 | 4 | 20.0 |
| 0 | 1 | 1 | 3 | 0 | 5 | 5 | 25.0 |
| 1 | 0 | 1 | 1 | 0 | 3 | 6 | 30.0 |
| 1 | 0 | 4 | 3 | 0 | 8 | 7 | 35.0 |
| 0 | 1 | 0 | 1 | 0 | 2 | 8 | 40.0 |
| 0 | 0 | 1 | 1 | 0 | 2 | 9 | 45.0 |
| 0 | 1 | 2 | 1 | 0 | 4 | 10 | 50.0 |
| 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 1 | 11 | 55.0 |
| 0 | 1 | 0 | 2 | 0 | 3 | 12 | 60.0 |
| 1 | 2 | 3 | 0 | 0 | 6 | 13 | 65.0 |
| 0 | 0 | 1 | 3 | 0 | 4 | 14 | 70.0 |
| 2 | 0 | 1 | 3 | 0 | 6 | 15 | 75.0 |
| 1 | 0 | 0 | 2 | 0 | 3 | 16 | 80.0 |
| 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 1 | 17 | 85.0 |
| 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 1 | 18 | 90.0 |
| 0 | 1 | 1 | 0 | 0 | 2 | 19 | 95.0 |
| 2 | 1 | 2 | 3 | 0 | 8 | 20 | 100.0 |

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

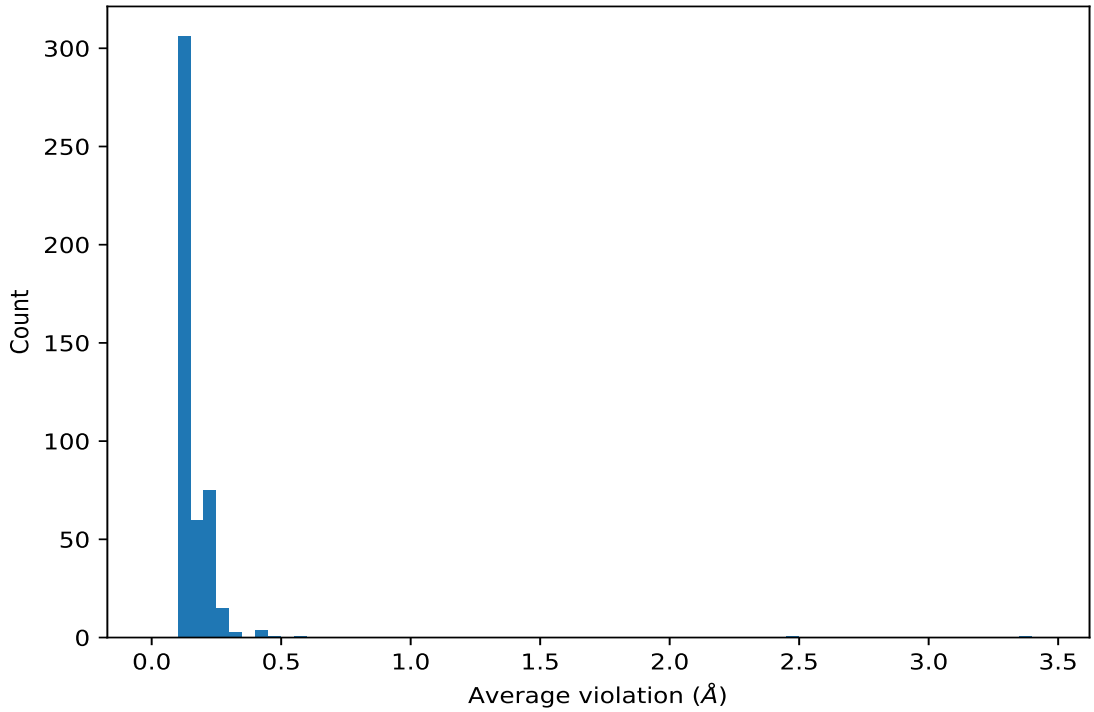
### 9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble (i)




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

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

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




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

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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,709) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:69:THR:HA | 20 | 3.39 | 0.16 | 3.44 |
| (1,1216) | 1:A:116:THR:H | 1:A:69:THR:HA | 20 | 2.49 | 0.21 | 2.45 |
| (1,980) | 1:A:40:ARG:H | 1:A:40:ARG:HB3 | 20 | 0.4 | 0.02 | 0.4 |
| (1,565) | 1:A:48:PHE:HA | 1:A:46:ASN:H | 20 | 0.29 | 0.06 | 0.3 |
| (1,591) | 1:A:99:LYS:HB2 | 1:A:95:GLN:HB2 | 20 | 0.29 | 0.04 | 0.28 |
| (1,591) | 1:A:99:LYS:HB3 | 1:A:95:GLN:HB2 | 20 | 0.29 | 0.04 | 0.28 |
| (1,1235) | 1:A:113:VAL:H | 1:A:112:TYR:HB3 | 20 | 0.24 | 0.01 | 0.24 |
| (1,1198) | 1:A:95:GLN:H | 1:A:95:GLN:HB3 | 20 | 0.2 | 0.02 | 0.2 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB2 | 20 | 0.19 | 0.06 | 0.17 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB1 | 20 | 0.19 | 0.06 | 0.17 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB3 | 20 | 0.19 | 0.06 | 0.17 |
| (1,2043) | 1:A:125:PHE:H | 1:A:123:ILE:HG12 | 20 | 0.19 | 0.06 | 0.17 |
| (2,21) | 1:A:96:ALA:O | 1:A:100:ARG:H | 19 | 0.23 | 0.03 | 0.22 |
| (1,1418) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:95:GLN:HB3 | 19 | 0.22 | 0.06 | 0.2 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:87:LEU:HB2 | 19 | 0.21 | 0.05 | 0.2 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:87:LEU:HB2 | 19 | 0.21 | 0.05 | 0.2 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:87:LEU:HB2 | 19 | 0.21 | 0.05 | 0.2 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:79:VAL:H | 18 | 0.19 | 0.04 | 0.18 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:79:VAL:H | 18 | 0.19 | 0.04 | 0.18 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:79:VAL:H | 18 | 0.19 | 0.04 | 0.18 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:124:ASP:H | 18 | 0.19 | 0.04 | 0.18 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:124:ASP:H | 18 | 0.19 | 0.04 | 0.18 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:124:ASP:H | 18 | 0.19 | 0.04 | 0.18 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG12 | 17 | 0.27 | 0.04 | 0.28 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG11 | 17 | 0.27 | 0.04 | 0.28 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG13 | 17 | 0.27 | 0.04 | 0.28 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG12 | 17 | 0.27 | 0.04 | 0.28 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG11 | 17 | 0.27 | 0.04 | 0.28 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG13 | 17 | 0.27 | 0.04 | 0.28 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG12 | 17 | 0.27 | 0.04 | 0.28 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG11 | 17 | 0.27 | 0.04 | 0.28 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG13 | 17 | 0.27 | 0.04 | 0.28 |
| (1,779) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HG | 16 | 0.49 | 0.01 | 0.49 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD12 | 16 | 0.21 | 0.05 | 0.22 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD11 | 16 | 0.21 | 0.05 | 0.22 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD13 | 16 | 0.21 | 0.05 | 0.22 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD22 | 16 | 0.21 | 0.05 | 0.22 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD21 | 16 | 0.21 | 0.05 | 0.22 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD23 | 16 | 0.21 | 0.05 | 0.22 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD12 | 16 | 0.21 | 0.05 | 0.22 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD11 | 16 | 0.21 | 0.05 | 0.22 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD13 | 16 | 0.21 | 0.05 | 0.22 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG22 | 16 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG21 | 16 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG23 | 16 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG22 | 16 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG21 | 16 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG23 | 16 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG22 | 16 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG21 | 16 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG23 | 16 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD22 | 16 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD21 | 16 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD23 | 16 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD22 | 16 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD21 | 16 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD23 | 16 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD22 | 16 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD21 | 16 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD23 | 16 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (1,1060) | 1:A:44:ARG:HB3 | 1:A:44:ARG:H | 15 | 0.55 | 0.23 | 0.65 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB2 | 15 | 0.2 | 0.05 | 0.18 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB1 | 15 | 0.2 | 0.05 | 0.18 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB3 | 15 | 0.2 | 0.05 | 0.18 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG22 | 15 | 0.2 | 0.05 | 0.18 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG21 | 15 | 0.2 | 0.05 | 0.18 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG23 | 15 | 0.2 | 0.05 | 0.18 |
| (1,1054) | 1:A:47:ARG:HB2 | 1:A:47:ARG:H | 15 | 0.19 | 0.07 | 0.16 |
| (1,1990) | 1:A:42:SER:H | 1:A:38:ARG:HB2 | 15 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1990) | 1:A:42:SER:H | 1:A:40:ARG:HB3 | 15 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:95:GLN:HB2 | 15 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:95:GLN:HB2 | 15 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:95:GLN:HB2 | 15 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:95:GLN:HG2 | 15 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:95:GLN:HG2 | 15 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:95:GLN:HG2 | 15 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,970) | 1:A:76:VAL:H | 1:A:102:SER:HA | 15 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG12 | 1:A:67:ARG:HB2 | 14 | 0.19 | 0.04 | 0.19 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG12 | 1:A:67:ARG:HB3 | 14 | 0.19 | 0.04 | 0.19 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG11 | 1:A:67:ARG:HB2 | 14 | 0.19 | 0.04 | 0.19 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG11 | 1:A:67:ARG:HB3 | 14 | 0.19 | 0.04 | 0.19 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG13 | 1:A:67:ARG:HB2 | 14 | 0.19 | 0.04 | 0.19 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG13 | 1:A:67:ARG:HB3 | 14 | 0.19 | 0.04 | 0.19 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HB2 | 14 | 0.18 | 0.05 | 0.18 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HB2 | 14 | 0.18 | 0.05 | 0.18 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HB2 | 14 | 0.18 | 0.05 | 0.18 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:128:ARG:HB3 | 14 | 0.18 | 0.05 | 0.18 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:128:ARG:HB3 | 14 | 0.18 | 0.05 | 0.18 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:128:ARG:HB3 | 14 | 0.18 | 0.05 | 0.18 |
| (1,153) | 1:A:105:PRO:HG2 | 1:A:40:ARG:HB2 | 14 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:74:GLY:HA3 | 14 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:74:GLY:HA3 | 14 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:74:GLY:HA3 | 14 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1134) | 1:A:98:VAL:H | 1:A:97:LEU:HG | 13 | 0.26 | 0.1 | 0.22 |
| (1,672) | 1:A:41:ILE:HA | 1:A:44:ARG:HD2 | 13 | 0.21 | 0.07 | 0.21 |
| (1,672) | 1:A:41:ILE:HA | 1:A:44:ARG:HD3 | 13 | 0.21 | 0.07 | 0.21 |
| (1,920) | 1:A:128:ARG:H | 1:A:128:ARG:HB3 | 13 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD22 | 13 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD21 | 13 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD23 | 13 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD22 | 13 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD21 | 13 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD23 | 13 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD22 | 13 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD21 | 13 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD23 | 13 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD12 | 13 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD11 | 13 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD13 | 13 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD12 | 13 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD11 | 13 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD13 | 13 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD12 | 13 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD11 | 13 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD13 | 13 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD22 | 13 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD21 | 13 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD23 | 13 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD12 | 13 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD11 | 13 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD13 | 13 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (1,132) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:81:LEU:HG | 13 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:81:LEU:HG | 13 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:81:LEU:HG | 13 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,574) | 1:A:41:ILE:HA | 1:A:105:PRO:HD3 | 12 | 0.18 | 0.07 | 0.16 |
| (1,2037) | 1:A:117:VAL:H | 1:A:68:PHE:HD1 | 12 | 0.17 | 0.03 | 0.17 |
| (1,2037) | 1:A:117:VAL:H | 1:A:68:PHE:HD2 | 12 | 0.17 | 0.03 | 0.17 |
| (1,2037) | 1:A:117:VAL:H | 1:A:114:ASN:HD21 | 12 | 0.17 | 0.03 | 0.17 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:111:ALA:HB2 | 12 | 0.14 | 0.02 | 0.15 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:111:ALA:HB1 | 12 | 0.14 | 0.02 | 0.15 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:111:ALA:HB3 | 12 | 0.14 | 0.02 | 0.15 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE2 | 1:A:111:ALA:HB2 | 12 | 0.14 | 0.02 | 0.15 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE2 | 1:A:111:ALA:HB1 | 12 | 0.14 | 0.02 | 0.15 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE2 | 1:A:111:ALA:HB3 | 12 | 0.14 | 0.02 | 0.15 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:104:LEU:HD12 | 11 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:104:LEU:HD11 | 11 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:104:LEU:HD13 | 11 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:104:LEU:HD12 | 11 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:104:LEU:HD11 | 11 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:104:LEU:HD13 | 11 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:104:LEU:HD12 | 11 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:104:LEU:HD11 | 11 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:104:LEU:HD13 | 11 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:53:LYS:HE2 | 10 | 0.21 | 0.07 | 0.19 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:60:ARG:HD2 | 10 | 0.21 | 0.07 | 0.19 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:60:ARG:HD3 | 10 | 0.21 | 0.07 | 0.19 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:92:ARG:HD2 | 10 | 0.21 | 0.07 | 0.19 |
| (1,1674) | 1:A:97:LEU:HA | 1:A:53:LYS:HE2 | 10 | 0.21 | 0.07 | 0.19 |
| (1,1674) | 1:A:97:LEU:HA | 1:A:60:ARG:HD2 | 10 | 0.21 | 0.07 | 0.19 |
| (1,1674) | 1:A:97:LEU:HA | 1:A:60:ARG:HD3 | 10 | 0.21 | 0.07 | 0.19 |
| (1,977) | 1:A:40:ARG:H | 1:A:38:ARG:H | 10 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:73:GLN:HA | 10 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:73:GLN:HA | 10 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:73:GLN:HA | 10 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:77:LEU:HA | 10 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:77:LEU:HA | 10 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:77:LEU:HA | 10 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,949) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:45:LEU:HG | 10 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1238) | 1:A:116:THR:H | 1:A:113:VAL:H | 9 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1172) | 1:A:125:PHE:HB2 | 1:A:62:GLY:H | 9 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,1233) | 1:A:106:THR:H | 1:A:105:PRO:HG3 | 8 | 0.18 | 0.05 | 0.18 |
| (1,459) | 1:A:69:THR:HG21 | 1:A:108:PRO:HG3 | 8 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,459) | 1:A:69:THR:HG22 | 1:A:108:PRO:HG3 | 8 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,459) | 1:A:69:THR:HG23 | 1:A:108:PRO:HG3 | 8 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD22 | 1:A:45:LEU:HB2 | 7 | 0.22 | 0.08 | 0.2 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD21 | 1:A:45:LEU:HB2 | 7 | 0.22 | 0.08 | 0.2 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD23 | 1:A:45:LEU:HB2 | 7 | 0.22 | 0.08 | 0.2 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD12 | 1:A:45:LEU:HB2 | 7 | 0.22 | 0.08 | 0.2 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD11 | 1:A:45:LEU:HB2 | 7 | 0.22 | 0.08 | 0.2 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD13 | 1:A:45:LEU:HB2 | 7 | 0.22 | 0.08 | 0.2 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD22 | 1:A:49:LYS:HB2 | 7 | 0.22 | 0.08 | 0.2 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD21 | 1:A:49:LYS:HB2 | 7 | 0.22 | 0.08 | 0.2 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD23 | 1:A:49:LYS:HB2 | 7 | 0.22 | 0.08 | 0.2 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD12 | 1:A:49:LYS:HB2 | 7 | 0.22 | 0.08 | 0.2 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD11 | 1:A:49:LYS:HB2 | 7 | 0.22 | 0.08 | 0.2 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD13 | 1:A:49:LYS:HB2 | 7 | 0.22 | 0.08 | 0.2 |
| (1,1180) | 1:A:45:LEU:H | 1:A:45:LEU:HB3 | 7 | 0.17 | 0.06 | 0.16 |
| (1,535) | 1:A:108:PRO:HA | 1:A:110:ASP:HA | 7 | 0.16 | 0.04 | 0.15 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD22 | 7 | 0.15 | 0.02 | 0.14 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD21 | 7 | 0.15 | 0.02 | 0.14 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD23 | 7 | 0.15 | 0.02 | 0.14 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD12 | 7 | 0.15 | 0.02 | 0.14 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD11 | 7 | 0.15 | 0.02 | 0.14 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD13 | 7 | 0.15 | 0.02 | 0.14 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD22 | 7 | 0.15 | 0.02 | 0.14 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD21 | 7 | 0.15 | 0.02 | 0.14 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD23 | 7 | 0.15 | 0.02 | 0.14 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD12 | 7 | 0.15 | 0.02 | 0.14 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD11 | 7 | 0.15 | 0.02 | 0.14 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD13 | 7 | 0.15 | 0.02 | 0.14 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD22 | 7 | 0.15 | 0.02 | 0.14 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD21 | 7 | 0.15 | 0.02 | 0.14 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD23 | 7 | 0.15 | 0.02 | 0.14 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD12 | 7 | 0.15 | 0.02 | 0.14 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD11 | 7 | 0.15 | 0.02 | 0.14 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD13 | 7 | 0.15 | 0.02 | 0.14 |
| (1,569) | 1:A:56:LEU:HA | 1:A:59:LYS:HG3 | 7 | 0.14 | 0.03 | 0.15 |
| (1,17) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:53:LYS:HA | 7 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (1,17) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:53:LYS:HA | 7 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (1,17) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:53:LYS:HA | 7 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (1,225) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:119:LEU:HG | 7 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,225) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:119:LEU:HG | 7 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,225) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:119:LEU:HG | 7 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,632) | 1:A:97:LEU:HD22 | 1:A:45:LEU:HD22 | 7 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,1044) | 1:A:93:GLU:H | 1:A:93:GLU:HB3 | 6 | 0.22 | 0.03 | 0.2 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:87:LEU:HD12 | 6 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:87:LEU:HD11 | 6 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:87:LEU:HD13 | 6 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:87:LEU:HD12 | 6 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:87:LEU:HD11 | 6 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:87:LEU:HD13 | 6 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:97:LEU:HD22 | 6 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:97:LEU:HD21 | 6 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:97:LEU:HD23 | 6 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:97:LEU:HD12 | 6 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:97:LEU:HD11 | 6 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:97:LEU:HD13 | 6 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:97:LEU:HD22 | 6 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:97:LEU:HD21 | 6 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:97:LEU:HD23 | 6 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:97:LEU:HD12 | 6 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:97:LEU:HD11 | 6 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:97:LEU:HD13 | 6 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,126) | 1:A:51:TYR:HB3 | 1:A:53:LYS:HE2 | 6 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,474) | 1:A:44:ARG:HB2 | 1:A:103:PRO:HB2 | 5 | 0.28 | 0.05 | 0.26 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:124:ASP:HB2 | 5 | 0.2 | 0.07 | 0.22 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:124:ASP:HB3 | 5 | 0.2 | 0.07 | 0.22 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD21 | 1:A:124:ASP:HB2 | 5 | 0.2 | 0.07 | 0.22 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD21 | 1:A:124:ASP:HB3 | 5 | 0.2 | 0.07 | 0.22 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD23 | 1:A:124:ASP:HB2 | 5 | 0.2 | 0.07 | 0.22 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD23 | 1:A:124:ASP:HB3 | 5 | 0.2 | 0.07 | 0.22 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:95:GLN:HG2 | 5 | 0.2 | 0.07 | 0.22 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD21 | 1:A:95:GLN:HG2 | 5 | 0.2 | 0.07 | 0.22 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD23 | 1:A:95:GLN:HG2 | 5 | 0.2 | 0.07 | 0.22 |
| (1,1565) | 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:59:LYS:HA | 5 | 0.18 | 0.08 | 0.16 |
| (1,1565) | 1:A:127:LEU:HD21 | 1:A:59:LYS:HA | 5 | 0.18 | 0.08 | 0.16 |
| (1,1565) | 1:A:127:LEU:HD23 | 1:A:59:LYS:HA | 5 | 0.18 | 0.08 | 0.16 |
| (1,1565) | 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:86:GLY:HA3 | 5 | 0.18 | 0.08 | 0.16 |
| (1,1565) | 1:A:127:LEU:HD21 | 1:A:86:GLY:HA3 | 5 | 0.18 | 0.08 | 0.16 |
| (1,1565) | 1:A:127:LEU:HD23 | 1:A:86:GLY:HA3 | 5 | 0.18 | 0.08 | 0.16 |
| (1,1600) | 1:A:59:LYS:HB2 | 1:A:60:ARG:H | 5 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,1600) | 1:A:59:LYS:HB3 | 1:A:60:ARG:H | 5 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,1600) | 1:A:72:ARG:HB2 | 1:A:72:ARG:H | 5 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,1600) | 1:A:72:ARG:HB3 | 1:A:72:ARG:H | 5 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:68:PHE:HE1 | 5 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:68:PHE:HE2 | 5 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:68:PHE:HE1 | 5 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:68:PHE:HE2 | 5 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:68:PHE:HE1 | 5 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:68:PHE:HE2 | 5 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:68:PHE:HZ | 5 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:68:PHE:HZ | 5 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:68:PHE:HZ | 5 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,18) | 1:A:93:GLU:O | 1:A:97:LEU:H | 4 | 0.22 | 0.06 | 0.23 |
| (1,502) | 1:A:97:LEU:HD22 | 1:A:98:VAL:H | 4 | 0.22 | 0.01 | 0.22 |
| (1,502) | 1:A:97:LEU:HD21 | 1:A:98:VAL:H | 4 | 0.22 | 0.01 | 0.22 |
| (1,502) | 1:A:97:LEU:HD23 | 1:A:98:VAL:H | 4 | 0.22 | 0.01 | 0.22 |
| (1,502) | 1:A:97:LEU:HD12 | 1:A:98:VAL:H | 4 | 0.22 | 0.01 | 0.22 |
| (1,502) | 1:A:97:LEU:HD11 | 1:A:98:VAL:H | 4 | 0.22 | 0.01 | 0.22 |
| (1,502) | 1:A:97:LEU:HD13 | 1:A:98:VAL:H | 4 | 0.22 | 0.01 | 0.22 |
| (1,729) | 1:A:37:TRP:HH2 | 1:A:37:TRP:HB2 | 4 | 0.2 | 0.05 | 0.2 |
| (1,1471) | 1:A:27:THR:H | 1:A:27:THR:HG21 | 4 | 0.19 | 0.07 | 0.19 |
| (1,863) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:93:GLU:HB3 | 4 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (1,781) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HD22 | 4 | 0.14 | 0.01 | 0.15 |
| (1,781) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HD21 | 4 | 0.14 | 0.01 | 0.15 |
| (1,781) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HD23 | 4 | 0.14 | 0.01 | 0.15 |
| (1,781) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HD12 | 4 | 0.14 | 0.01 | 0.15 |
| (1,781) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HD11 | 4 | 0.14 | 0.01 | 0.15 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,781) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HD13 | 4 | 0.14 | 0.01 | 0.15 |
| (1,273) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:100:ARG:HD2 | 4 | 0.14 | 0.04 | 0.12 |
| (1,273) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:100:ARG:HD3 | 4 | 0.14 | 0.04 | 0.12 |
| (1,273) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:100:ARG:HD2 | 4 | 0.14 | 0.04 | 0.12 |
| (1,273) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:100:ARG:HD3 | 4 | 0.14 | 0.04 | 0.12 |
| (1,273) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:100:ARG:HD2 | 4 | 0.14 | 0.04 | 0.12 |
| (1,273) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:100:ARG:HD3 | 4 | 0.14 | 0.04 | 0.12 |
| (1,493) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:118:GLU:HG2 | 4 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,493) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:118:GLU:HG3 | 4 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,493) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:118:GLU:HG2 | 4 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,493) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:118:GLU:HG3 | 4 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,493) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:118:GLU:HG2 | 4 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,493) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:118:GLU:HG3 | 4 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1573) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:67:ARG:HD2 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1573) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:67:ARG:HD3 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1573) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:67:ARG:HD2 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1573) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:67:ARG:HD3 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1573) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:67:ARG:HD2 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1573) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:67:ARG:HD3 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1573) | 1:A:119:LEU:HD12 | 1:A:67:ARG:HD2 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1573) | 1:A:119:LEU:HD12 | 1:A:67:ARG:HD3 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1573) | 1:A:119:LEU:HD11 | 1:A:67:ARG:HD2 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1573) | 1:A:119:LEU:HD11 | 1:A:67:ARG:HD3 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1573) | 1:A:119:LEU:HD13 | 1:A:67:ARG:HD2 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1573) | 1:A:119:LEU:HD13 | 1:A:67:ARG:HD3 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:70:LEU:HD12 | 4 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:70:LEU:HD11 | 4 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:70:LEU:HD13 | 4 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:70:LEU:HD12 | 4 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:70:LEU:HD11 | 4 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:70:LEU:HD13 | 4 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:70:LEU:HD12 | 4 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:70:LEU:HD11 | 4 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:70:LEU:HD13 | 4 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,195) | 1:A:45:LEU:HD22 | 1:A:101:ALA:HB2 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,64) | 1:A:66:VAL:HG22 | 1:A:123:ILE:HG12 | 3 | 0.4 | 0.02 | 0.4 |
| (1,64) | 1:A:66:VAL:HG21 | 1:A:123:ILE:HG12 | 3 | 0.4 | 0.02 | 0.4 |
| (1,64) | 1:A:66:VAL:HG23 | 1:A:123:ILE:HG12 | 3 | 0.4 | 0.02 | 0.4 |
| (1,1072) | 1:A:132:PHE:HB3 | 1:A:132:PHE:H | 3 | 0.27 | 0.04 | 0.29 |
| (1,654) | 1:A:44:ARG:HG2 | 1:A:47:ARG:HD3 | 3 | 0.2 | 0.03 | 0.19 |
| (1,654) | 1:A:44:ARG:HG3 | 1:A:47:ARG:HD3 | 3 | 0.2 | 0.03 | 0.19 |
| (1,1575) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:67:ARG:H | 3 | 0.2 | 0.03 | 0.19 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,1575) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:67:ARG:H | 3 | 0.2 | 0.03 | 0.19 |
| (1,1575) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:67:ARG:H | 3 | 0.2 | 0.03 | 0.19 |
| (1,1575) | 1:A:119:LEU:HD12 | 1:A:66:VAL:H | 3 | 0.2 | 0.03 | 0.19 |
| (1,1575) | 1:A:119:LEU:HD11 | 1:A:66:VAL:H | 3 | 0.2 | 0.03 | 0.19 |
| (1,1575) | 1:A:119:LEU:HD13 | 1:A:66:VAL:H | 3 | 0.2 | 0.03 | 0.19 |
| (1,1575) | 1:A:119:LEU:HD12 | 1:A:67:ARG:H | 3 | 0.2 | 0.03 | 0.19 |
| (1,1575) | 1:A:119:LEU:HD11 | 1:A:67:ARG:H | 3 | 0.2 | 0.03 | 0.19 |
| (1,1575) | 1:A:119:LEU:HD13 | 1:A:67:ARG:H | 3 | 0.2 | 0.03 | 0.19 |
| (1,1489) | 1:A:34:GLU:H | 1:A:33:GLY:HA2 | 3 | 0.19 | 0.02 | 0.19 |
| (1,618) | 1:A:44:ARG:HB3 | 1:A:103:PRO:HB2 | 3 | 0.18 | 0.07 | 0.17 |
| (1,417) | 1:A:66:VAL:HG12 | 1:A:95:GLN:HG2 | 3 | 0.15 | 0.02 | 0.14 |
| (1,417) | 1:A:66:VAL:HG11 | 1:A:95:GLN:HG2 | 3 | 0.15 | 0.02 | 0.14 |
| (1,417) | 1:A:66:VAL:HG13 | 1:A:95:GLN:HG2 | 3 | 0.15 | 0.02 | 0.14 |
| (1,146) | 1:A:45:LEU:HD12 | 1:A:41:ILE:HG22 | 3 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (1,146) | 1:A:45:LEU:HD12 | 1:A:41:ILE:HG21 | 3 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (1,146) | 1:A:45:LEU:HD12 | 1:A:41:ILE:HG23 | 3 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (1,146) | 1:A:45:LEU:HD11 | 1:A:41:ILE:HG22 | 3 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (1,146) | 1:A:45:LEU:HD11 | 1:A:41:ILE:HG21 | 3 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (1,146) | 1:A:45:LEU:HD11 | 1:A:41:ILE:HG23 | 3 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (1,146) | 1:A:45:LEU:HD13 | 1:A:41:ILE:HG22 | 3 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (1,146) | 1:A:45:LEU:HD13 | 1:A:41:ILE:HG21 | 3 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (1,146) | 1:A:45:LEU:HD13 | 1:A:41:ILE:HG23 | 3 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1459) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:20:ALA:HA | 3 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,1498) | 1:A:87:LEU:HD22 | 1:A:123:ILE:HG12 | 3 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1498) | 1:A:87:LEU:HD21 | 1:A:123:ILE:HG12 | 3 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1498) | 1:A:87:LEU:HD23 | 1:A:123:ILE:HG12 | 3 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1498) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:130:ALA:HB2 | 3 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1498) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:130:ALA:HB1 | 3 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1498) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:130:ALA:HB3 | 3 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1979) | 1:A:64:GLY:H | 1:A:94:ILE:HG22 | 3 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1979) | 1:A:64:GLY:H | 1:A:94:ILE:HG21 | 3 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1979) | 1:A:64:GLY:H | 1:A:94:ILE:HG23 | 3 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1979) | 1:A:64:GLY:H | 1:A:94:ILE:HG12 | 3 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1979) | 1:A:64:GLY:H | 1:A:94:ILE:HG13 | 3 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1979) | 1:A:64:GLY:H | 1:A:66:VAL:HG22 | 3 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1979) | 1:A:64:GLY:H | 1:A:66:VAL:HG21 | 3 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1979) | 1:A:64:GLY:H | 1:A:66:VAL:HG23 | 3 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,999) | 1:A:73:GLN:H | 1:A:73:GLN:HG3 | 3 | 0.13 | 0.0 | 0.13 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD22 | 1:A:45:LEU:HD12 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD22 | 1:A:45:LEU:HD11 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD22 | 1:A:45:LEU:HD13 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD21 | 1:A:45:LEU:HD12 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD21 | 1:A:45:LEU:HD11 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD21 | 1:A:45:LEU:HD13 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD23 | 1:A:45:LEU:HD12 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD23 | 1:A:45:LEU:HD11 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD23 | 1:A:45:LEU:HD13 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD12 | 1:A:45:LEU:HD12 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD12 | 1:A:45:LEU:HD11 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD12 | 1:A:45:LEU:HD13 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD11 | 1:A:45:LEU:HD12 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD11 | 1:A:45:LEU:HD11 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD11 | 1:A:45:LEU:HD13 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD13 | 1:A:45:LEU:HD12 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD13 | 1:A:45:LEU:HD11 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD13 | 1:A:45:LEU:HD13 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,718) | 1:A:51:TYR:HE1 | 1:A:51:TYR:H | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,718) | 1:A:51:TYR:HE2 | 1:A:51:TYR:H | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,869) | 1:A:82:VAL:H | 1:A:66:VAL:HG22 | 2 | 0.32 | 0.02 | 0.32 |
| (1,869) | 1:A:82:VAL:H | 1:A:66:VAL:HG21 | 2 | 0.32 | 0.02 | 0.32 |
| (1,869) | 1:A:82:VAL:H | 1:A:66:VAL:HG23 | 2 | 0.32 | 0.02 | 0.32 |
| (1,2060) | 1:A:72:ARG:H | 1:A:70:LEU:HB3 | 2 | 0.2 | 0.04 | 0.2 |
| (1,2060) | 1:A:72:ARG:H | 1:A:104:LEU:HB2 | 2 | 0.2 | 0.04 | 0.2 |
| (1,2060) | 1:A:72:ARG:H | 1:A:117:VAL:HB | 2 | 0.2 | 0.04 | 0.2 |
| (1,62) | 1:A:111:ALA:HB2 | 1:A:30:ALA:HB2 | 2 | 0.17 | 0.01 | 0.17 |
| (1,62) | 1:A:111:ALA:HB2 | 1:A:30:ALA:HB1 | 2 | 0.17 | 0.01 | 0.17 |
| (1,62) | 1:A:111:ALA:HB2 | 1:A:30:ALA:HB3 | 2 | 0.17 | 0.01 | 0.17 |
| (1,62) | 1:A:111:ALA:HB1 | 1:A:30:ALA:HB2 | 2 | 0.17 | 0.01 | 0.17 |
| (1,62) | 1:A:111:ALA:HB1 | 1:A:30:ALA:HB1 | 2 | 0.17 | 0.01 | 0.17 |
| (1,62) | 1:A:111:ALA:HB1 | 1:A:30:ALA:HB3 | 2 | 0.17 | 0.01 | 0.17 |
| (1,62) | 1:A:111:ALA:HB3 | 1:A:30:ALA:HB2 | 2 | 0.17 | 0.01 | 0.17 |
| (1,62) | 1:A:111:ALA:HB3 | 1:A:30:ALA:HB1 | 2 | 0.17 | 0.01 | 0.17 |
| (1,62) | 1:A:111:ALA:HB3 | 1:A:30:ALA:HB3 | 2 | 0.17 | 0.01 | 0.17 |
| (1,2009) | 1:A:83:SER:H | 1:A:67:ARG:HG2 | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (1,2009) | 1:A:83:SER:H | 1:A:67:ARG:HG3 | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (1,2009) | 1:A:83:SER:H | 1:A:123:ILE:HG12 | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (1,2009) | 1:A:114:ASN:HD22 | 1:A:30:ALA:HB2 | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (1,2009) | 1:A:114:ASN:HD22 | 1:A:30:ALA:HB1 | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (1,2009) | 1:A:114:ASN:HD22 | 1:A:30:ALA:HB3 | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (1,2009) | 1:A:114:ASN:HD22 | 1:A:109:ALA:HB2 | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (1,2009) | 1:A:114:ASN:HD22 | 1:A:109:ALA:HB1 | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (1,2009) | 1:A:114:ASN:HD22 | 1:A:109:ALA:HB3 | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (1,422) | 1:A:66:VAL:HG12 | 1:A:98:VAL:HG12 | 2 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (1,422) | 1:A:66:VAL:HG12 | 1:A:98:VAL:HG11 | 2 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,422) | 1:A:66:VAL:HG12 | 1:A:98:VAL:HG13 | 2 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (1,422) | 1:A:66:VAL:HG11 | 1:A:98:VAL:HG12 | 2 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (1,422) | 1:A:66:VAL:HG11 | 1:A:98:VAL:HG11 | 2 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (1,422) | 1:A:66:VAL:HG11 | 1:A:98:VAL:HG13 | 2 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (1,422) | 1:A:66:VAL:HG13 | 1:A:98:VAL:HG12 | 2 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (1,422) | 1:A:66:VAL:HG13 | 1:A:98:VAL:HG11 | 2 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (1,422) | 1:A:66:VAL:HG13 | 1:A:98:VAL:HG13 | 2 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:83:SER:H | 1:A:82:VAL:HB | 2 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (1,1590) | 1:A:99:LYS:HE2 | 1:A:66:VAL:HG22 | 2 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (1,1590) | 1:A:99:LYS:HE2 | 1:A:66:VAL:HG21 | 2 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (1,1590) | 1:A:99:LYS:HE2 | 1:A:66:VAL:HG23 | 2 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (1,1590) | 1:A:99:LYS:HE3 | 1:A:66:VAL:HG22 | 2 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (1,1590) | 1:A:99:LYS:HE3 | 1:A:66:VAL:HG21 | 2 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (1,1590) | 1:A:99:LYS:HE3 | 1:A:66:VAL:HG23 | 2 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (1,449) | 1:A:119:LEU:HD22 | 1:A:37:TRP:HB3 | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,449) | 1:A:119:LEU:HD21 | 1:A:37:TRP:HB3 | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,449) | 1:A:119:LEU:HD23 | 1:A:37:TRP:HB3 | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,486) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:119:LEU:HG | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,486) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:119:LEU:HG | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,486) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:119:LEU:HG | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,623) | 1:A:99:LYS:HE3 | 1:A:95:GLN:HB2 | 2 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,1466) | 1:A:25:ARG:H | 1:A:23:GLN:HA | 2 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1997) | 1:A:57:ARG:H | 1:A:53:LYS:HG2 | 2 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,1997) | 1:A:57:ARG:H | 1:A:53:LYS:HG3 | 2 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,1997) | 1:A:57:ARG:H | 1:A:56:LEU:HG | 2 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,2094) | 1:A:43:GLY:H | 1:A:40:ARG:HD2 | 2 | 0.13 | 0.0 | 0.13 |
| (1,2094) | 1:A:43:GLY:H | 1:A:105:PRO:HD3 | 2 | 0.13 | 0.0 | 0.13 |
| (1,1630) | 1:A:98:VAL:HG22 | 1:A:50:ARG:HG2 | 2 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1630) | 1:A:98:VAL:HG22 | 1:A:50:ARG:HG3 | 2 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1630) | 1:A:98:VAL:HG21 | 1:A:50:ARG:HG2 | 2 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1630) | 1:A:98:VAL:HG21 | 1:A:50:ARG:HG3 | 2 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1630) | 1:A:98:VAL:HG23 | 1:A:50:ARG:HG2 | 2 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1630) | 1:A:98:VAL:HG23 | 1:A:50:ARG:HG3 | 2 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1630) | 1:A:98:VAL:HG22 | 1:A:53:LYS:HG2 | 2 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1630) | 1:A:98:VAL:HG22 | 1:A:53:LYS:HG3 | 2 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1630) | 1:A:98:VAL:HG21 | 1:A:53:LYS:HG2 | 2 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1630) | 1:A:98:VAL:HG21 | 1:A:53:LYS:HG3 | 2 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1630) | 1:A:98:VAL:HG23 | 1:A:53:LYS:HG2 | 2 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1630) | 1:A:98:VAL:HG23 | 1:A:53:LYS:HG3 | 2 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1816) | 1:A:83:SER:HB2 | 1:A:67:ARG:HG2 | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1816) | 1:A:83:SER:HB2 | 1:A:67:ARG:HG3 | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1816) | 1:A:83:SER:HB2 | 1:A:99:LYS:HG3 | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

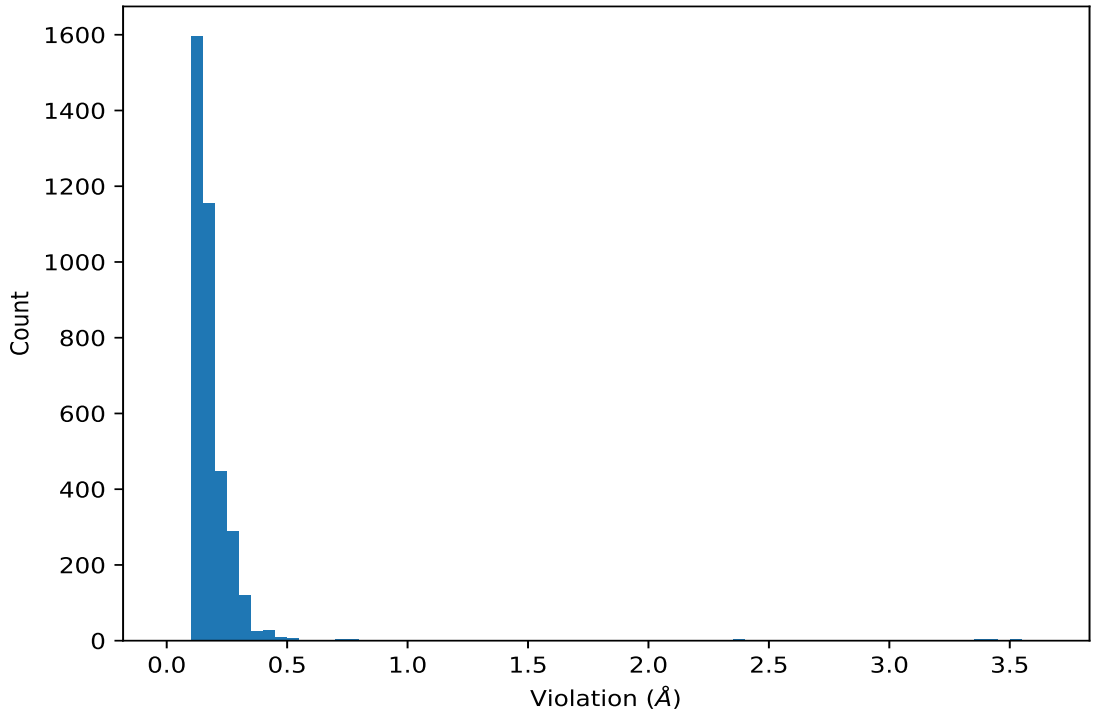
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,1816) | 1:A:83:SER:HB2 | 1:A:121:LEU:HG | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1462) | 1:A:24:THR:H | 1:A:20:ALA:HA | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,206) | 1:A:56:LEU:HD22 | 1:A:51:TYR:HB3 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,206) | 1:A:56:LEU:HD21 | 1:A:51:TYR:HB3 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,206) | 1:A:56:LEU:HD23 | 1:A:51:TYR:HB3 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,534) | 1:A:72:ARG:HA | 1:A:77:LEU:HD12 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,534) | 1:A:72:ARG:HA | 1:A:77:LEU:HD11 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,534) | 1:A:72:ARG:HA | 1:A:77:LEU:HD13 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1616) | 1:A:87:LEU:HD22 | 1:A:87:LEU:H | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1616) | 1:A:87:LEU:HD21 | 1:A:87:LEU:H | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1616) | 1:A:87:LEU:HD23 | 1:A:87:LEU:H | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1616) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:90:LEU:H | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1713) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:117:VAL:HG12 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1713) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:117:VAL:HG11 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1713) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:117:VAL:HG13 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1713) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:117:VAL:HG12 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1713) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:117:VAL:HG11 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1713) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:117:VAL:HG13 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1713) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:117:VAL:HG12 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1713) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:117:VAL:HG11 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1713) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:117:VAL:HG13 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1713) | 1:A:109:ALA:HB2 | 1:A:117:VAL:HG12 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1713) | 1:A:109:ALA:HB2 | 1:A:117:VAL:HG11 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1713) | 1:A:109:ALA:HB2 | 1:A:117:VAL:HG13 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1713) | 1:A:109:ALA:HB1 | 1:A:117:VAL:HG12 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1713) | 1:A:109:ALA:HB1 | 1:A:117:VAL:HG11 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1713) | 1:A:109:ALA:HB1 | 1:A:117:VAL:HG13 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1713) | 1:A:109:ALA:HB3 | 1:A:117:VAL:HG12 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1713) | 1:A:109:ALA:HB3 | 1:A:117:VAL:HG11 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1713) | 1:A:109:ALA:HB3 | 1:A:117:VAL:HG13 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (2,10) | 1:A:39:SER:O | 1:A:43:GLY:H | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |

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

## 9.5 All violated distance restraints (i)

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

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




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

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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,709) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:69:THR:HA | 4 | 3.64 |
| (1,709) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:69:THR:HA | 19 | 3.57 |
| (1,709) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:69:THR:HA | 14 | 3.54 |
| (1,709) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:69:THR:HA | 9 | 3.53 |
| (1,709) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:69:THR:HA | 10 | 3.51 |
| (1,709) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:69:THR:HA | 2 | 3.49 |
| (1,709) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:69:THR:HA | 6 | 3.48 |
| (1,709) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:69:THR:HA | 1 | 3.44 |
| (1,709) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:69:THR:HA | 15 | 3.44 |
| (1,709) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:69:THR:HA | 17 | 3.44 |
| (1,709) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:69:THR:HA | 18 | 3.43 |
| (1,709) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:69:THR:HA | 3 | 3.4 |
| (1,709) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:69:THR:HA | 11 | 3.38 |
| (1,709) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:69:THR:HA | 7 | 3.36 |
| (1,709) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:69:THR:HA | 12 | 3.36 |
| (1,709) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:69:THR:HA | 5 | 3.3 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,709) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:69:THR:HA | 13 | 3.26 |
| (1,709) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:69:THR:HA | 20 | 3.26 |
| (1,709) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:69:THR:HA | 8 | 3.2 |
| (1,1216) | 1:A:116:THR:H | 1:A:69:THR:HA | 4 | 3.01 |
| (1,709) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:69:THR:HA | 16 | 2.86 |
| (1,1216) | 1:A:116:THR:H | 1:A:69:THR:HA | 10 | 2.86 |
| (1,1216) | 1:A:116:THR:H | 1:A:69:THR:HA | 9 | 2.81 |
| (1,1216) | 1:A:116:THR:H | 1:A:69:THR:HA | 7 | 2.64 |
| (1,1216) | 1:A:116:THR:H | 1:A:69:THR:HA | 19 | 2.63 |
| (1,1216) | 1:A:116:THR:H | 1:A:69:THR:HA | 13 | 2.55 |
| (1,1216) | 1:A:116:THR:H | 1:A:69:THR:HA | 15 | 2.54 |
| (1,1216) | 1:A:116:THR:H | 1:A:69:THR:HA | 12 | 2.51 |
| (1,1216) | 1:A:116:THR:H | 1:A:69:THR:HA | 2 | 2.49 |
| (1,1216) | 1:A:116:THR:H | 1:A:69:THR:HA | 11 | 2.47 |
| (1,1216) | 1:A:116:THR:H | 1:A:69:THR:HA | 3 | 2.42 |
| (1,1216) | 1:A:116:THR:H | 1:A:69:THR:HA | 6 | 2.4 |
| (1,1216) | 1:A:116:THR:H | 1:A:69:THR:HA | 14 | 2.38 |
| (1,1216) | 1:A:116:THR:H | 1:A:69:THR:HA | 20 | 2.38 |
| (1,1216) | 1:A:116:THR:H | 1:A:69:THR:HA | 16 | 2.36 |
| (1,1216) | 1:A:116:THR:H | 1:A:69:THR:HA | 17 | 2.36 |
| (1,1216) | 1:A:116:THR:H | 1:A:69:THR:HA | 8 | 2.35 |
| (1,1216) | 1:A:116:THR:H | 1:A:69:THR:HA | 5 | 2.28 |
| (1,1216) | 1:A:116:THR:H | 1:A:69:THR:HA | 1 | 2.25 |
| (1,1216) | 1:A:116:THR:H | 1:A:69:THR:HA | 18 | 2.16 |
| (1,1060) | 1:A:44:ARG:HB3 | 1:A:44:ARG:H | 19 | 0.85 |
| (1,1060) | 1:A:44:ARG:HB3 | 1:A:44:ARG:H | 8 | 0.79 |
| (1,1060) | 1:A:44:ARG:HB3 | 1:A:44:ARG:H | 11 | 0.78 |
| (1,1060) | 1:A:44:ARG:HB3 | 1:A:44:ARG:H | 10 | 0.75 |
| (1,1060) | 1:A:44:ARG:HB3 | 1:A:44:ARG:H | 18 | 0.71 |
| (1,1060) | 1:A:44:ARG:HB3 | 1:A:44:ARG:H | 3 | 0.7 |
| (1,1060) | 1:A:44:ARG:HB3 | 1:A:44:ARG:H | 6 | 0.7 |
| (1,1060) | 1:A:44:ARG:HB3 | 1:A:44:ARG:H | 7 | 0.65 |
| (1,1060) | 1:A:44:ARG:HB3 | 1:A:44:ARG:H | 15 | 0.63 |
| (1,779) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HG | 15 | 0.53 |
| (1,779) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HG | 3 | 0.5 |
| (1,779) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HG | 5 | 0.5 |
| (1,779) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HG | 6 | 0.5 |
| (1,779) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HG | 18 | 0.5 |
| (1,779) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HG | 19 | 0.5 |
| (1,779) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HG | 1 | 0.49 |
| (1,779) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HG | 2 | 0.49 |
| (1,779) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HG | 4 | 0.49 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,779) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HG | 8 | 0.49 |
| (1,779) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HG | 9 | 0.49 |
| (1,779) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HG | 10 | 0.49 |
| (1,779) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HG | 12 | 0.49 |
| (1,779) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HG | 20 | 0.49 |
| (1,779) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HG | 16 | 0.48 |
| (1,779) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HG | 13 | 0.46 |
| (1,1467) | 1:A:25:ARG:HG2 | 1:A:26:LEU:H | 11 | 0.44 |
| (1,64) | 1:A:66:VAL:HG22 | 1:A:123:ILE:HG12 | 15 | 0.43 |
| (1,64) | 1:A:66:VAL:HG21 | 1:A:123:ILE:HG12 | 15 | 0.43 |
| (1,64) | 1:A:66:VAL:HG23 | 1:A:123:ILE:HG12 | 15 | 0.43 |
| (1,591) | 1:A:99:LYS:HB2 | 1:A:95:GLN:HB2 | 19 | 0.43 |
| (1,591) | 1:A:99:LYS:HB3 | 1:A:95:GLN:HB2 | 19 | 0.43 |
| (1,980) | 1:A:40:ARG:H | 1:A:40:ARG:HB3 | 4 | 0.42 |
| (1,980) | 1:A:40:ARG:H | 1:A:40:ARG:HB3 | 6 | 0.42 |
| (1,980) | 1:A:40:ARG:H | 1:A:40:ARG:HB3 | 7 | 0.42 |
| (1,980) | 1:A:40:ARG:H | 1:A:40:ARG:HB3 | 18 | 0.42 |
| (1,980) | 1:A:40:ARG:H | 1:A:40:ARG:HB3 | 1 | 0.41 |
| (1,980) | 1:A:40:ARG:H | 1:A:40:ARG:HB3 | 3 | 0.41 |
| (1,980) | 1:A:40:ARG:H | 1:A:40:ARG:HB3 | 10 | 0.41 |
| (1,980) | 1:A:40:ARG:H | 1:A:40:ARG:HB3 | 16 | 0.41 |
| (1,1134) | 1:A:98:VAL:H | 1:A:97:LEU:HG | 17 | 0.41 |
| (1,980) | 1:A:40:ARG:H | 1:A:40:ARG:HB3 | 2 | 0.4 |
| (1,980) | 1:A:40:ARG:H | 1:A:40:ARG:HB3 | 5 | 0.4 |
| (1,980) | 1:A:40:ARG:H | 1:A:40:ARG:HB3 | 8 | 0.4 |
| (1,980) | 1:A:40:ARG:H | 1:A:40:ARG:HB3 | 9 | 0.4 |
| (1,980) | 1:A:40:ARG:H | 1:A:40:ARG:HB3 | 12 | 0.4 |
| (1,980) | 1:A:40:ARG:H | 1:A:40:ARG:HB3 | 14 | 0.4 |
| (1,980) | 1:A:40:ARG:H | 1:A:40:ARG:HB3 | 15 | 0.4 |
| (1,980) | 1:A:40:ARG:H | 1:A:40:ARG:HB3 | 20 | 0.4 |
| (1,64) | 1:A:66:VAL:HG22 | 1:A:123:ILE:HG12 | 9 | 0.4 |
| (1,64) | 1:A:66:VAL:HG21 | 1:A:123:ILE:HG12 | 9 | 0.4 |
| (1,64) | 1:A:66:VAL:HG23 | 1:A:123:ILE:HG12 | 9 | 0.4 |
| (1,1134) | 1:A:98:VAL:H | 1:A:97:LEU:HG | 7 | 0.4 |
| (1,1134) | 1:A:98:VAL:H | 1:A:97:LEU:HG | 11 | 0.4 |
| (1,980) | 1:A:40:ARG:H | 1:A:40:ARG:HB3 | 17 | 0.39 |
| (1,980) | 1:A:40:ARG:H | 1:A:40:ARG:HB3 | 19 | 0.39 |
| (1,574) | 1:A:41:ILE:HA | 1:A:105:PRO:HD3 | 2 | 0.39 |
| (1,1060) | 1:A:44:ARG:HB3 | 1:A:44:ARG:H | 17 | 0.39 |
| (1,980) | 1:A:40:ARG:H | 1:A:40:ARG:HB3 | 13 | 0.38 |
| (1,672) | 1:A:41:ILE:HA | 1:A:44:ARG:HD2 | 12 | 0.38 |
| (1,672) | 1:A:41:ILE:HA | 1:A:44:ARG:HD3 | 12 | 0.38 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,114) | 1:A:60:ARG:HA | 1:A:60:ARG:HD2 | 15 | 0.38 |
| (1,114) | 1:A:60:ARG:HA | 1:A:60:ARG:HD3 | 15 | 0.38 |
| (1,64) | 1:A:66:VAL:HG22 | 1:A:123:ILE:HG12 | 19 | 0.37 |
| (1,64) | 1:A:66:VAL:HG21 | 1:A:123:ILE:HG12 | 19 | 0.37 |
| (1,64) | 1:A:66:VAL:HG23 | 1:A:123:ILE:HG12 | 19 | 0.37 |
| (1,565) | 1:A:48:PHE:HA | 1:A:46:ASN:H | 4 | 0.37 |
| (1,1418) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:95:GLN:HB3 | 7 | 0.37 |
| (1,1134) | 1:A:98:VAL:H | 1:A:97:LEU:HG | 14 | 0.37 |
| (1,1060) | 1:A:44:ARG:HB3 | 1:A:44:ARG:H | 13 | 0.37 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:53:LYS:HE2 | 13 | 0.36 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:60:ARG:HD2 | 13 | 0.36 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:60:ARG:HD3 | 13 | 0.36 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:92:ARG:HD2 | 13 | 0.36 |
| (1,1674) | 1:A:97:LEU:HA | 1:A:53:LYS:HE2 | 13 | 0.36 |
| (1,1674) | 1:A:97:LEU:HA | 1:A:60:ARG:HD2 | 13 | 0.36 |
| (1,1674) | 1:A:97:LEU:HA | 1:A:60:ARG:HD3 | 13 | 0.36 |
| (1,474) | 1:A:44:ARG:HB2 | 1:A:103:PRO:HB2 | 20 | 0.35 |
| (1,1054) | 1:A:47:ARG:HB2 | 1:A:47:ARG:H | 13 | 0.35 |
| (1,980) | 1:A:40:ARG:H | 1:A:40:ARG:HB3 | 11 | 0.34 |
| (1,869) | 1:A:82:VAL:H | 1:A:66:VAL:HG22 | 7 | 0.34 |
| (1,869) | 1:A:82:VAL:H | 1:A:66:VAL:HG21 | 7 | 0.34 |
| (1,869) | 1:A:82:VAL:H | 1:A:66:VAL:HG23 | 7 | 0.34 |
| (1,591) | 1:A:99:LYS:HB2 | 1:A:95:GLN:HB2 | 13 | 0.34 |
| (1,591) | 1:A:99:LYS:HB3 | 1:A:95:GLN:HB2 | 13 | 0.34 |
| (1,565) | 1:A:48:PHE:HA | 1:A:46:ASN:H | 2 | 0.34 |
| (1,565) | 1:A:48:PHE:HA | 1:A:46:ASN:H | 3 | 0.34 |
| (1,565) | 1:A:48:PHE:HA | 1:A:46:ASN:H | 7 | 0.34 |
| (1,565) | 1:A:48:PHE:HA | 1:A:46:ASN:H | 11 | 0.34 |
| (1,565) | 1:A:48:PHE:HA | 1:A:46:ASN:H | 16 | 0.34 |
| (1,1565) | 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:59:LYS:HA | 10 | 0.34 |
| (1,1565) | 1:A:127:LEU:HD21 | 1:A:59:LYS:HA | 10 | 0.34 |
| (1,1565) | 1:A:127:LEU:HD23 | 1:A:59:LYS:HA | 10 | 0.34 |
| (1,1565) | 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:86:GLY:HA3 | 10 | 0.34 |
| (1,1565) | 1:A:127:LEU:HD21 | 1:A:86:GLY:HA3 | 10 | 0.34 |
| (1,1565) | 1:A:127:LEU:HD23 | 1:A:86:GLY:HA3 | 10 | 0.34 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG12 | 11 | 0.33 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG11 | 11 | 0.33 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG13 | 11 | 0.33 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG12 | 11 | 0.33 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG11 | 11 | 0.33 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG13 | 11 | 0.33 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG12 | 11 | 0.33 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG11 | 11 | 0.33 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG13 | 11 | 0.33 |
| (1,565) | 1:A:48:PHE:HA | 1:A:46:ASN:H | 5 | 0.33 |
| (1,474) | 1:A:44:ARG:HB2 | 1:A:103:PRO:HB2 | 9 | 0.33 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB2 | 1 | 0.33 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB1 | 1 | 0.33 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB3 | 1 | 0.33 |
| (1,2043) | 1:A:125:PHE:H | 1:A:123:ILE:HG12 | 1 | 0.33 |
| (1,1060) | 1:A:44:ARG:HB3 | 1:A:44:ARG:H | 1 | 0.33 |
| (1,1054) | 1:A:47:ARG:HB2 | 1:A:47:ARG:H | 8 | 0.33 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG12 | 13 | 0.32 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG11 | 13 | 0.32 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG13 | 13 | 0.32 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG12 | 13 | 0.32 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG11 | 13 | 0.32 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG13 | 13 | 0.32 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG12 | 13 | 0.32 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG11 | 13 | 0.32 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG13 | 13 | 0.32 |
| (1,565) | 1:A:48:PHE:HA | 1:A:46:ASN:H | 18 | 0.32 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB2 | 19 | 0.32 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB1 | 19 | 0.32 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB3 | 19 | 0.32 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG22 | 19 | 0.32 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG21 | 19 | 0.32 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG23 | 19 | 0.32 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD22 | 1:A:45:LEU:HB2 | 9 | 0.32 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD21 | 1:A:45:LEU:HB2 | 9 | 0.32 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD23 | 1:A:45:LEU:HB2 | 9 | 0.32 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD12 | 1:A:45:LEU:HB2 | 9 | 0.32 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD11 | 1:A:45:LEU:HB2 | 9 | 0.32 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD13 | 1:A:45:LEU:HB2 | 9 | 0.32 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD22 | 1:A:49:LYS:HB2 | 9 | 0.32 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD21 | 1:A:49:LYS:HB2 | 9 | 0.32 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD23 | 1:A:49:LYS:HB2 | 9 | 0.32 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD12 | 1:A:49:LYS:HB2 | 9 | 0.32 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD11 | 1:A:49:LYS:HB2 | 9 | 0.32 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD13 | 1:A:49:LYS:HB2 | 9 | 0.32 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD22 | 1:A:45:LEU:HB2 | 14 | 0.32 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD21 | 1:A:45:LEU:HB2 | 14 | 0.32 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD23 | 1:A:45:LEU:HB2 | 14 | 0.32 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD12 | 1:A:45:LEU:HB2 | 14 | 0.32 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD11 | 1:A:45:LEU:HB2 | 14 | 0.32 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD13 | 1:A:45:LEU:HB2 | 14 | 0.32 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD22 | 1:A:49:LYS:HB2 | 14 | 0.32 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD21 | 1:A:49:LYS:HB2 | 14 | 0.32 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD23 | 1:A:49:LYS:HB2 | 14 | 0.32 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD12 | 1:A:49:LYS:HB2 | 14 | 0.32 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD11 | 1:A:49:LYS:HB2 | 14 | 0.32 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD13 | 1:A:49:LYS:HB2 | 14 | 0.32 |
| (1,1418) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:95:GLN:HB3 | 11 | 0.32 |
| (1,1418) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:95:GLN:HB3 | 14 | 0.32 |
| (1,869) | 1:A:82:VAL:H | 1:A:66:VAL:HG22 | 8 | 0.31 |
| (1,869) | 1:A:82:VAL:H | 1:A:66:VAL:HG21 | 8 | 0.31 |
| (1,869) | 1:A:82:VAL:H | 1:A:66:VAL:HG23 | 8 | 0.31 |
| (1,591) | 1:A:99:LYS:HB2 | 1:A:95:GLN:HB2 | 5 | 0.31 |
| (1,591) | 1:A:99:LYS:HB3 | 1:A:95:GLN:HB2 | 5 | 0.31 |
| (1,591) | 1:A:99:LYS:HB2 | 1:A:95:GLN:HB2 | 16 | 0.31 |
| (1,591) | 1:A:99:LYS:HB3 | 1:A:95:GLN:HB2 | 16 | 0.31 |
| (1,591) | 1:A:99:LYS:HB2 | 1:A:95:GLN:HB2 | 18 | 0.31 |
| (1,591) | 1:A:99:LYS:HB3 | 1:A:95:GLN:HB2 | 18 | 0.31 |
| (1,591) | 1:A:99:LYS:HB2 | 1:A:95:GLN:HB2 | 20 | 0.31 |
| (1,591) | 1:A:99:LYS:HB3 | 1:A:95:GLN:HB2 | 20 | 0.31 |
| (1,565) | 1:A:48:PHE:HA | 1:A:46:ASN:H | 10 | 0.31 |
| (1,565) | 1:A:48:PHE:HA | 1:A:46:ASN:H | 13 | 0.31 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:87:LEU:HB2 | 5 | 0.31 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:87:LEU:HB2 | 5 | 0.31 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:87:LEU:HB2 | 5 | 0.31 |
| (1,1072) | 1:A:132:PHE:HB3 | 1:A:132:PHE:H | 4 | 0.31 |
| (1,923) | 1:A:117:VAL:H | 1:A:116:THR:HB | 12 | 0.3 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG12 | 4 | 0.3 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG11 | 4 | 0.3 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG13 | 4 | 0.3 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG12 | 4 | 0.3 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG11 | 4 | 0.3 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG13 | 4 | 0.3 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG12 | 4 | 0.3 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG11 | 4 | 0.3 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG13 | 4 | 0.3 |
| (1,565) | 1:A:48:PHE:HA | 1:A:46:ASN:H | 15 | 0.3 |
| (1,565) | 1:A:48:PHE:HA | 1:A:46:ASN:H | 20 | 0.3 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:87:LEU:HB2 | 9 | 0.3 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:87:LEU:HB2 | 9 | 0.3 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:87:LEU:HB2 | 9 | 0.3 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB2 | 20 | 0.3 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB1 | 20 | 0.3 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB3 | 20 | 0.3 |
| (1,2043) | 1:A:125:PHE:H | 1:A:123:ILE:HG12 | 20 | 0.3 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD12 | 1 | 0.3 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD11 | 1 | 0.3 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD13 | 1 | 0.3 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD22 | 1 | 0.3 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD21 | 1 | 0.3 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD23 | 1 | 0.3 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD12 | 1 | 0.3 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD11 | 1 | 0.3 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD13 | 1 | 0.3 |
| (2,18) | 1:A:93:GLU:O | 1:A:97:LEU:H | 14 | 0.29 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG12 | 1 | 0.29 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG11 | 1 | 0.29 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG13 | 1 | 0.29 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG12 | 1 | 0.29 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG11 | 1 | 0.29 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG13 | 1 | 0.29 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG12 | 1 | 0.29 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG11 | 1 | 0.29 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG13 | 1 | 0.29 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG12 | 16 | 0.29 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG11 | 16 | 0.29 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG13 | 16 | 0.29 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG12 | 16 | 0.29 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG11 | 16 | 0.29 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG13 | 16 | 0.29 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG12 | 16 | 0.29 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG11 | 16 | 0.29 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG13 | 16 | 0.29 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG12 | 18 | 0.29 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG11 | 18 | 0.29 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG13 | 18 | 0.29 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG12 | 18 | 0.29 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG11 | 18 | 0.29 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG13 | 18 | 0.29 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG12 | 18 | 0.29 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG11 | 18 | 0.29 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG13 | 18 | 0.29 |
| (1,672) | 1:A:41:ILE:HA | 1:A:44:ARG:HD2 | 17 | 0.29 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,672) | 1:A:41:ILE:HA | 1:A:44:ARG:HD3 | 17 | 0.29 |
| (1,591) | 1:A:99:LYS:HB2 | 1:A:95:GLN:HB2 | 1 | 0.29 |
| (1,591) | 1:A:99:LYS:HB3 | 1:A:95:GLN:HB2 | 1 | 0.29 |
| (1,591) | 1:A:99:LYS:HB2 | 1:A:95:GLN:HB2 | 6 | 0.29 |
| (1,591) | 1:A:99:LYS:HB3 | 1:A:95:GLN:HB2 | 6 | 0.29 |
| (1,565) | 1:A:48:PHE:HA | 1:A:46:ASN:H | 6 | 0.29 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:87:LEU:HB2 | 15 | 0.29 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:87:LEU:HB2 | 15 | 0.29 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:87:LEU:HB2 | 15 | 0.29 |
| (1,1591) | 1:A:17:ASP:HB2 | 1:A:15:ARG:HB3 | 14 | 0.29 |
| (1,1591) | 1:A:17:ASP:HB2 | 1:A:18:LYS:HD2 | 14 | 0.29 |
| (1,1591) | 1:A:99:LYS:HE2 | 1:A:94:ILE:HB | 14 | 0.29 |
| (1,1591) | 1:A:99:LYS:HE3 | 1:A:94:ILE:HB | 14 | 0.29 |
| (1,1418) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:95:GLN:HB3 | 17 | 0.29 |
| (1,1180) | 1:A:45:LEU:H | 1:A:45:LEU:HB3 | 2 | 0.29 |
| (1,1072) | 1:A:132:PHE:HB3 | 1:A:132:PHE:H | 14 | 0.29 |
| (2,21) | 1:A:96:ALA:O | 1:A:100:ARG:H | 1 | 0.28 |
| (2,21) | 1:A:96:ALA:O | 1:A:100:ARG:H | 10 | 0.28 |
| (1,729) | 1:A:37:TRP:HH2 | 1:A:37:TRP:HB2 | 12 | 0.28 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG12 | 3 | 0.28 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG11 | 3 | 0.28 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG13 | 3 | 0.28 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG12 | 3 | 0.28 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG11 | 3 | 0.28 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG13 | 3 | 0.28 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG12 | 3 | 0.28 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG11 | 3 | 0.28 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG13 | 3 | 0.28 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG12 | 5 | 0.28 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG11 | 5 | 0.28 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG13 | 5 | 0.28 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG12 | 5 | 0.28 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG11 | 5 | 0.28 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG13 | 5 | 0.28 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG12 | 5 | 0.28 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG11 | 5 | 0.28 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG13 | 5 | 0.28 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG12 | 6 | 0.28 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG11 | 6 | 0.28 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG13 | 6 | 0.28 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG12 | 6 | 0.28 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG11 | 6 | 0.28 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG13 | 6 | 0.28 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG12 | 6 | 0.28 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG11 | 6 | 0.28 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG13 | 6 | 0.28 |
| (1,672) | 1:A:41:ILE:HA | 1:A:44:ARG:HD2 | 14 | 0.28 |
| (1,672) | 1:A:41:ILE:HA | 1:A:44:ARG:HD3 | 14 | 0.28 |
| (1,591) | 1:A:99:LYS:HB2 | 1:A:95:GLN:HB2 | 11 | 0.28 |
| (1,591) | 1:A:99:LYS:HB3 | 1:A:95:GLN:HB2 | 11 | 0.28 |
| (1,591) | 1:A:99:LYS:HB2 | 1:A:95:GLN:HB2 | 14 | 0.28 |
| (1,591) | 1:A:99:LYS:HB3 | 1:A:95:GLN:HB2 | 14 | 0.28 |
| (1,591) | 1:A:99:LYS:HB2 | 1:A:95:GLN:HB2 | 17 | 0.28 |
| (1,591) | 1:A:99:LYS:HB3 | 1:A:95:GLN:HB2 | 17 | 0.28 |
| (1,565) | 1:A:48:PHE:HA | 1:A:46:ASN:H | 12 | 0.28 |
| (1,565) | 1:A:48:PHE:HA | 1:A:46:ASN:H | 17 | 0.28 |
| (1,565) | 1:A:48:PHE:HA | 1:A:46:ASN:H | 19 | 0.28 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD12 | 10 | 0.28 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD11 | 10 | 0.28 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD13 | 10 | 0.28 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD22 | 10 | 0.28 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD21 | 10 | 0.28 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD23 | 10 | 0.28 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD12 | 10 | 0.28 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD11 | 10 | 0.28 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD13 | 10 | 0.28 |
| (1,1233) | 1:A:106:THR:H | 1:A:105:PRO:HG3 | 9 | 0.28 |
| (1,1054) | 1:A:47:ARG:HB2 | 1:A:47:ARG:H | 6 | 0.28 |
| (2,21) | 1:A:96:ALA:O | 1:A:100:ARG:H | 6 | 0.27 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG12 | 2 | 0.27 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG11 | 2 | 0.27 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG13 | 2 | 0.27 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG12 | 2 | 0.27 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG11 | 2 | 0.27 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG13 | 2 | 0.27 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG12 | 2 | 0.27 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG11 | 2 | 0.27 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG13 | 2 | 0.27 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG12 | 10 | 0.27 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG11 | 10 | 0.27 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG13 | 10 | 0.27 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG12 | 10 | 0.27 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG11 | 10 | 0.27 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG13 | 10 | 0.27 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG12 | 10 | 0.27 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG11 | 10 | 0.27 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG13 | 10 | 0.27 |
| (1,672) | 1:A:41:ILE:HA | 1:A:44:ARG:HD2 | 9 | 0.27 |
| (1,672) | 1:A:41:ILE:HA | 1:A:44:ARG:HD3 | 9 | 0.27 |
| (1,618) | 1:A:44:ARG:HB3 | 1:A:103:PRO:HB2 | 4 | 0.27 |
| (1,591) | 1:A:99:LYS:HB2 | 1:A:95:GLN:HB2 | 4 | 0.27 |
| (1,591) | 1:A:99:LYS:HB3 | 1:A:95:GLN:HB2 | 4 | 0.27 |
| (1,591) | 1:A:99:LYS:HB2 | 1:A:95:GLN:HB2 | 8 | 0.27 |
| (1,591) | 1:A:99:LYS:HB3 | 1:A:95:GLN:HB2 | 8 | 0.27 |
| (1,591) | 1:A:99:LYS:HB2 | 1:A:95:GLN:HB2 | 9 | 0.27 |
| (1,591) | 1:A:99:LYS:HB3 | 1:A:95:GLN:HB2 | 9 | 0.27 |
| (1,591) | 1:A:99:LYS:HB2 | 1:A:95:GLN:HB2 | 15 | 0.27 |
| (1,591) | 1:A:99:LYS:HB3 | 1:A:95:GLN:HB2 | 15 | 0.27 |
| (1,565) | 1:A:48:PHE:HA | 1:A:46:ASN:H | 8 | 0.27 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB2 | 3 | 0.27 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB1 | 3 | 0.27 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB3 | 3 | 0.27 |
| (1,2043) | 1:A:125:PHE:H | 1:A:123:ILE:HG12 | 3 | 0.27 |
| (1,1990) | 1:A:42:SER:H | 1:A:38:ARG:HB2 | 13 | 0.27 |
| (1,1990) | 1:A:42:SER:H | 1:A:40:ARG:HB3 | 13 | 0.27 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD12 | 8 | 0.27 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD11 | 8 | 0.27 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD13 | 8 | 0.27 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD22 | 8 | 0.27 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD21 | 8 | 0.27 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD23 | 8 | 0.27 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD12 | 8 | 0.27 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD11 | 8 | 0.27 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD13 | 8 | 0.27 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:124:ASP:HB2 | 13 | 0.27 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:124:ASP:HB3 | 13 | 0.27 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD21 | 1:A:124:ASP:HB2 | 13 | 0.27 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD21 | 1:A:124:ASP:HB3 | 13 | 0.27 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD23 | 1:A:124:ASP:HB2 | 13 | 0.27 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD23 | 1:A:124:ASP:HB3 | 13 | 0.27 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:95:GLN:HG2 | 13 | 0.27 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD21 | 1:A:95:GLN:HG2 | 13 | 0.27 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD23 | 1:A:95:GLN:HG2 | 13 | 0.27 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:79:VAL:H | 10 | 0.27 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:79:VAL:H | 10 | 0.27 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:79:VAL:H | 10 | 0.27 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:124:ASP:H | 10 | 0.27 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:124:ASP:H | 10 | 0.27 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:124:ASP:H | 10 | 0.27 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:53:LYS:HE2 | 7 | 0.27 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:60:ARG:HD2 | 7 | 0.27 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:60:ARG:HD3 | 7 | 0.27 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:92:ARG:HD2 | 7 | 0.27 |
| (1,1674) | 1:A:97:LEU:HA | 1:A:53:LYS:HE2 | 7 | 0.27 |
| (1,1674) | 1:A:97:LEU:HA | 1:A:60:ARG:HD2 | 7 | 0.27 |
| (1,1674) | 1:A:97:LEU:HA | 1:A:60:ARG:HD3 | 7 | 0.27 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HB2 | 7 | 0.27 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HB2 | 7 | 0.27 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HB2 | 7 | 0.27 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:128:ARG:HB3 | 7 | 0.27 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:128:ARG:HB3 | 7 | 0.27 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:128:ARG:HB3 | 7 | 0.27 |
| (1,1473) | 1:A:27:THR:H | 1:A:26:LEU:HA | 1 | 0.27 |
| (1,1235) | 1:A:113:VAL:H | 1:A:112:TYR:HB3 | 3 | 0.27 |
| (1,1235) | 1:A:113:VAL:H | 1:A:112:TYR:HB3 | 14 | 0.27 |
| (1,1044) | 1:A:93:GLU:H | 1:A:93:GLU:HB3 | 19 | 0.27 |
| (2,21) | 1:A:96:ALA:O | 1:A:100:ARG:H | 12 | 0.26 |
| (2,18) | 1:A:93:GLU:O | 1:A:97:LEU:H | 11 | 0.26 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG12 | 20 | 0.26 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG11 | 20 | 0.26 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG13 | 20 | 0.26 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG12 | 20 | 0.26 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG11 | 20 | 0.26 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG13 | 20 | 0.26 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG12 | 20 | 0.26 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG11 | 20 | 0.26 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG13 | 20 | 0.26 |
| (1,591) | 1:A:99:LYS:HB2 | 1:A:95:GLN:HB2 | 2 | 0.26 |
| (1,591) | 1:A:99:LYS:HB3 | 1:A:95:GLN:HB2 | 2 | 0.26 |
| (1,591) | 1:A:99:LYS:HB2 | 1:A:95:GLN:HB2 | 3 | 0.26 |
| (1,591) | 1:A:99:LYS:HB3 | 1:A:95:GLN:HB2 | 3 | 0.26 |
| (1,591) | 1:A:99:LYS:HB2 | 1:A:95:GLN:HB2 | 7 | 0.26 |
| (1,591) | 1:A:99:LYS:HB3 | 1:A:95:GLN:HB2 | 7 | 0.26 |
| (1,591) | 1:A:99:LYS:HB2 | 1:A:95:GLN:HB2 | 10 | 0.26 |
| (1,591) | 1:A:99:LYS:HB3 | 1:A:95:GLN:HB2 | 10 | 0.26 |
| (1,474) | 1:A:44:ARG:HB2 | 1:A:103:PRO:HB2 | 12 | 0.26 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB2 | 14 | 0.26 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB1 | 14 | 0.26 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB3 | 14 | 0.26 |
| (1,2043) | 1:A:125:PHE:H | 1:A:123:ILE:HG12 | 14 | 0.26 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB2 | 18 | 0.26 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB1 | 18 | 0.26 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB3 | 18 | 0.26 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG22 | 18 | 0.26 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG21 | 18 | 0.26 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG23 | 18 | 0.26 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB2 | 20 | 0.26 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB1 | 20 | 0.26 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB3 | 20 | 0.26 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG22 | 20 | 0.26 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG21 | 20 | 0.26 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG23 | 20 | 0.26 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:124:ASP:HB2 | 11 | 0.26 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:124:ASP:HB3 | 11 | 0.26 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD21 | 1:A:124:ASP:HB2 | 11 | 0.26 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD21 | 1:A:124:ASP:HB3 | 11 | 0.26 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD23 | 1:A:124:ASP:HB2 | 11 | 0.26 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD23 | 1:A:124:ASP:HB3 | 11 | 0.26 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:95:GLN:HG2 | 11 | 0.26 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD21 | 1:A:95:GLN:HG2 | 11 | 0.26 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD23 | 1:A:95:GLN:HG2 | 11 | 0.26 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD22 | 1:A:45:LEU:HB2 | 20 | 0.26 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD21 | 1:A:45:LEU:HB2 | 20 | 0.26 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD23 | 1:A:45:LEU:HB2 | 20 | 0.26 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD12 | 1:A:45:LEU:HB2 | 20 | 0.26 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD11 | 1:A:45:LEU:HB2 | 20 | 0.26 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD13 | 1:A:45:LEU:HB2 | 20 | 0.26 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD22 | 1:A:49:LYS:HB2 | 20 | 0.26 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD21 | 1:A:49:LYS:HB2 | 20 | 0.26 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD23 | 1:A:49:LYS:HB2 | 20 | 0.26 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD12 | 1:A:49:LYS:HB2 | 20 | 0.26 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD11 | 1:A:49:LYS:HB2 | 20 | 0.26 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD13 | 1:A:49:LYS:HB2 | 20 | 0.26 |
| (1,1471) | 1:A:27:THR:H | 1:A:27:THR:HG21 | 5 | 0.26 |
| (1,1418) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:95:GLN:HB3 | 8 | 0.26 |
| (1,1235) | 1:A:113:VAL:H | 1:A:112:TYR:HB3 | 2 | 0.26 |
| (1,1235) | 1:A:113:VAL:H | 1:A:112:TYR:HB3 | 4 | 0.26 |
| (1,1134) | 1:A:98:VAL:H | 1:A:97:LEU:HG | 9 | 0.26 |
| (1,654) | 1:A:44:ARG:HG2 | 1:A:47:ARG:HD3 | 16 | 0.25 |
| (1,654) | 1:A:44:ARG:HG3 | 1:A:47:ARG:HD3 | 16 | 0.25 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG12 | 1:A:67:ARG:HB2 | 13 | 0.25 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG12 | 1:A:67:ARG:HB3 | 13 | 0.25 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG11 | 1:A:67:ARG:HB2 | 13 | 0.25 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG11 | 1:A:67:ARG:HB3 | 13 | 0.25 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG13 | 1:A:67:ARG:HB2 | 13 | 0.25 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG13 | 1:A:67:ARG:HB3 | 13 | 0.25 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:87:LEU:HB2 | 2 | 0.25 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:87:LEU:HB2 | 2 | 0.25 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:87:LEU:HB2 | 2 | 0.25 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:87:LEU:HB2 | 8 | 0.25 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:87:LEU:HB2 | 8 | 0.25 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:87:LEU:HB2 | 8 | 0.25 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB2 | 12 | 0.25 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB1 | 12 | 0.25 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB3 | 12 | 0.25 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG22 | 12 | 0.25 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG21 | 12 | 0.25 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG23 | 12 | 0.25 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:79:VAL:H | 9 | 0.25 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:79:VAL:H | 9 | 0.25 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:79:VAL:H | 9 | 0.25 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:124:ASP:H | 9 | 0.25 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:124:ASP:H | 9 | 0.25 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:124:ASP:H | 9 | 0.25 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:79:VAL:H | 19 | 0.25 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:79:VAL:H | 19 | 0.25 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:79:VAL:H | 19 | 0.25 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:124:ASP:H | 19 | 0.25 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:124:ASP:H | 19 | 0.25 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:124:ASP:H | 19 | 0.25 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HB2 | 12 | 0.25 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HB2 | 12 | 0.25 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HB2 | 12 | 0.25 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:128:ARG:HB3 | 12 | 0.25 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:128:ARG:HB3 | 12 | 0.25 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:128:ARG:HB3 | 12 | 0.25 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HB2 | 16 | 0.25 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HB2 | 16 | 0.25 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HB2 | 16 | 0.25 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:128:ARG:HB3 | 16 | 0.25 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:128:ARG:HB3 | 16 | 0.25 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:128:ARG:HB3 | 16 | 0.25 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1471) | 1:A:27:THR:H | 1:A:27:THR:HG21 | 2 | 0.25 |
| (1,141) | 1:A:69:THR:HG21 | 1:A:116:THR:HB | 12 | 0.25 |
| (1,141) | 1:A:69:THR:HG22 | 1:A:116:THR:HB | 12 | 0.25 |
| (1,141) | 1:A:69:THR:HG23 | 1:A:116:THR:HB | 12 | 0.25 |
| (1,1235) | 1:A:113:VAL:H | 1:A:112:TYR:HB3 | 6 | 0.25 |
| (1,1235) | 1:A:113:VAL:H | 1:A:112:TYR:HB3 | 9 | 0.25 |
| (1,1235) | 1:A:113:VAL:H | 1:A:112:TYR:HB3 | 10 | 0.25 |
| (2,21) | 1:A:96:ALA:O | 1:A:100:ARG:H | 5 | 0.24 |
| (2,21) | 1:A:96:ALA:O | 1:A:100:ARG:H | 20 | 0.24 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG12 | 12 | 0.24 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG11 | 12 | 0.24 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG13 | 12 | 0.24 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG12 | 12 | 0.24 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG11 | 12 | 0.24 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG13 | 12 | 0.24 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG12 | 12 | 0.24 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG11 | 12 | 0.24 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG13 | 12 | 0.24 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG12 | 14 | 0.24 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG11 | 14 | 0.24 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG13 | 14 | 0.24 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG12 | 14 | 0.24 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG11 | 14 | 0.24 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG13 | 14 | 0.24 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG12 | 14 | 0.24 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG11 | 14 | 0.24 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG13 | 14 | 0.24 |
| (1,672) | 1:A:41:ILE:HA | 1:A:44:ARG:HD2 | 20 | 0.24 |
| (1,672) | 1:A:41:ILE:HA | 1:A:44:ARG:HD3 | 20 | 0.24 |
| (1,474) | 1:A:44:ARG:HB2 | 1:A:103:PRO:HB2 | 14 | 0.24 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB2 | 18 | 0.24 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB1 | 18 | 0.24 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB3 | 18 | 0.24 |
| (1,2043) | 1:A:125:PHE:H | 1:A:123:ILE:HG12 | 18 | 0.24 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD12 | 12 | 0.24 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD11 | 12 | 0.24 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD13 | 12 | 0.24 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD22 | 12 | 0.24 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD21 | 12 | 0.24 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD23 | 12 | 0.24 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD12 | 12 | 0.24 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD11 | 12 | 0.24 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD13 | 12 | 0.24 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB2 | 10 | 0.24 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB1 | 10 | 0.24 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB3 | 10 | 0.24 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG22 | 10 | 0.24 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG21 | 10 | 0.24 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG23 | 10 | 0.24 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB2 | 15 | 0.24 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB1 | 15 | 0.24 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB3 | 15 | 0.24 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG22 | 15 | 0.24 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG21 | 15 | 0.24 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG23 | 15 | 0.24 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:79:VAL:H | 14 | 0.24 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:79:VAL:H | 14 | 0.24 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:79:VAL:H | 14 | 0.24 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:124:ASP:H | 14 | 0.24 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:124:ASP:H | 14 | 0.24 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:124:ASP:H | 14 | 0.24 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD22 | 1 | 0.24 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD21 | 1 | 0.24 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD23 | 1 | 0.24 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD12 | 1 | 0.24 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD11 | 1 | 0.24 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD13 | 1 | 0.24 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:53:LYS:HE2 | 11 | 0.24 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:60:ARG:HD2 | 11 | 0.24 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:60:ARG:HD3 | 11 | 0.24 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:92:ARG:HD2 | 11 | 0.24 |
| (1,1674) | 1:A:97:LEU:HA | 1:A:53:LYS:HE2 | 11 | 0.24 |
| (1,1674) | 1:A:97:LEU:HA | 1:A:60:ARG:HD2 | 11 | 0.24 |
| (1,1674) | 1:A:97:LEU:HA | 1:A:60:ARG:HD3 | 11 | 0.24 |
| (1,1575) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:67:ARG:H | 12 | 0.24 |
| (1,1575) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:67:ARG:H | 12 | 0.24 |
| (1,1575) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:67:ARG:H | 12 | 0.24 |
| (1,1575) | 1:A:119:LEU:HD12 | 1:A:66:VAL:H | 12 | 0.24 |
| (1,1575) | 1:A:119:LEU:HD11 | 1:A:66:VAL:H | 12 | 0.24 |
| (1,1575) | 1:A:119:LEU:HD13 | 1:A:66:VAL:H | 12 | 0.24 |
| (1,1575) | 1:A:119:LEU:HD12 | 1:A:67:ARG:H | 12 | 0.24 |
| (1,1575) | 1:A:119:LEU:HD11 | 1:A:67:ARG:H | 12 | 0.24 |
| (1,1575) | 1:A:119:LEU:HD13 | 1:A:67:ARG:H | 12 | 0.24 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG22 | 13 | 0.24 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG21 | 13 | 0.24 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG23 | 13 | 0.24 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG22 | 13 | 0.24 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG21 | 13 | 0.24 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG23 | 13 | 0.24 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG22 | 13 | 0.24 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG21 | 13 | 0.24 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG23 | 13 | 0.24 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD22 | 13 | 0.24 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD21 | 13 | 0.24 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD23 | 13 | 0.24 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD22 | 13 | 0.24 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD21 | 13 | 0.24 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD23 | 13 | 0.24 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD22 | 13 | 0.24 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD21 | 13 | 0.24 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD23 | 13 | 0.24 |
| (1,1492) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:34:GLU:HA | 8 | 0.24 |
| (1,1235) | 1:A:113:VAL:H | 1:A:112:TYR:HB3 | 1 | 0.24 |
| (1,1235) | 1:A:113:VAL:H | 1:A:112:TYR:HB3 | 7 | 0.24 |
| (1,1235) | 1:A:113:VAL:H | 1:A:112:TYR:HB3 | 11 | 0.24 |
| (1,1235) | 1:A:113:VAL:H | 1:A:112:TYR:HB3 | 12 | 0.24 |
| (1,1235) | 1:A:113:VAL:H | 1:A:112:TYR:HB3 | 13 | 0.24 |
| (1,1235) | 1:A:113:VAL:H | 1:A:112:TYR:HB3 | 18 | 0.24 |
| (1,1235) | 1:A:113:VAL:H | 1:A:112:TYR:HB3 | 19 | 0.24 |
| (1,1134) | 1:A:98:VAL:H | 1:A:97:LEU:HG | 13 | 0.24 |
| (1,1060) | 1:A:44:ARG:HB3 | 1:A:44:ARG:H | 14 | 0.24 |
| (2,21) | 1:A:96:ALA:O | 1:A:100:ARG:H | 2 | 0.23 |
| (2,21) | 1:A:96:ALA:O | 1:A:100:ARG:H | 3 | 0.23 |
| (2,21) | 1:A:96:ALA:O | 1:A:100:ARG:H | 15 | 0.23 |
| (1,729) | 1:A:37:TRP:HH2 | 1:A:37:TRP:HB2 | 6 | 0.23 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG12 | 17 | 0.23 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG11 | 17 | 0.23 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG13 | 17 | 0.23 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG12 | 17 | 0.23 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG11 | 17 | 0.23 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG13 | 17 | 0.23 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG12 | 17 | 0.23 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG11 | 17 | 0.23 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG13 | 17 | 0.23 |
| (1,591) | 1:A:99:LYS:HB2 | 1:A:95:GLN:HB2 | 12 | 0.23 |
| (1,591) | 1:A:99:LYS:HB3 | 1:A:95:GLN:HB2 | 12 | 0.23 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,502) | 1:A:97:LEU:HD22 | 1:A:98:VAL:H | 14 | 0.23 |
| (1,502) | 1:A:97:LEU:HD21 | 1:A:98:VAL:H | 14 | 0.23 |
| (1,502) | 1:A:97:LEU:HD23 | 1:A:98:VAL:H | 14 | 0.23 |
| (1,502) | 1:A:97:LEU:HD12 | 1:A:98:VAL:H | 14 | 0.23 |
| (1,502) | 1:A:97:LEU:HD11 | 1:A:98:VAL:H | 14 | 0.23 |
| (1,502) | 1:A:97:LEU:HD13 | 1:A:98:VAL:H | 14 | 0.23 |
| (1,474) | 1:A:44:ARG:HB2 | 1:A:103:PRO:HB2 | 13 | 0.23 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG12 | 1:A:67:ARG:HB2 | 2 | 0.23 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG12 | 1:A:67:ARG:HB3 | 2 | 0.23 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG11 | 1:A:67:ARG:HB2 | 2 | 0.23 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG11 | 1:A:67:ARG:HB3 | 2 | 0.23 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG13 | 1:A:67:ARG:HB2 | 2 | 0.23 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG13 | 1:A:67:ARG:HB3 | 2 | 0.23 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG12 | 1:A:67:ARG:HB2 | 5 | 0.23 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG12 | 1:A:67:ARG:HB3 | 5 | 0.23 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG11 | 1:A:67:ARG:HB2 | 5 | 0.23 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG11 | 1:A:67:ARG:HB3 | 5 | 0.23 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG13 | 1:A:67:ARG:HB2 | 5 | 0.23 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG13 | 1:A:67:ARG:HB3 | 5 | 0.23 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:87:LEU:HB2 | 19 | 0.23 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:87:LEU:HB2 | 19 | 0.23 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:87:LEU:HB2 | 19 | 0.23 |
| (1,2060) | 1:A:72:ARG:H | 1:A:70:LEU:HB3 | 9 | 0.23 |
| (1,2060) | 1:A:72:ARG:H | 1:A:104:LEU:HB2 | 9 | 0.23 |
| (1,2060) | 1:A:72:ARG:H | 1:A:117:VAL:HB | 9 | 0.23 |
| (1,1990) | 1:A:42:SER:H | 1:A:38:ARG:HB2 | 11 | 0.23 |
| (1,1990) | 1:A:42:SER:H | 1:A:40:ARG:HB3 | 11 | 0.23 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD12 | 3 | 0.23 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD11 | 3 | 0.23 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD13 | 3 | 0.23 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD22 | 3 | 0.23 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD21 | 3 | 0.23 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD23 | 3 | 0.23 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD12 | 3 | 0.23 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD11 | 3 | 0.23 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD13 | 3 | 0.23 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD12 | 4 | 0.23 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD11 | 4 | 0.23 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD13 | 4 | 0.23 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD22 | 4 | 0.23 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD21 | 4 | 0.23 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD23 | 4 | 0.23 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD12 | 4 | 0.23 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD11 | 4 | 0.23 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD13 | 4 | 0.23 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD12 | 20 | 0.23 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD11 | 20 | 0.23 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD13 | 20 | 0.23 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD22 | 20 | 0.23 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD21 | 20 | 0.23 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD23 | 20 | 0.23 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD12 | 20 | 0.23 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD11 | 20 | 0.23 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD13 | 20 | 0.23 |
| (1,1904) | 1:A:116:THR:HG21 | 1:A:76:VAL:HG22 | 12 | 0.23 |
| (1,1904) | 1:A:116:THR:HG21 | 1:A:76:VAL:HG21 | 12 | 0.23 |
| (1,1904) | 1:A:116:THR:HG21 | 1:A:76:VAL:HG23 | 12 | 0.23 |
| (1,1904) | 1:A:116:THR:HG22 | 1:A:76:VAL:HG22 | 12 | 0.23 |
| (1,1904) | 1:A:116:THR:HG22 | 1:A:76:VAL:HG21 | 12 | 0.23 |
| (1,1904) | 1:A:116:THR:HG22 | 1:A:76:VAL:HG23 | 12 | 0.23 |
| (1,1904) | 1:A:116:THR:HG23 | 1:A:76:VAL:HG22 | 12 | 0.23 |
| (1,1904) | 1:A:116:THR:HG23 | 1:A:76:VAL:HG21 | 12 | 0.23 |
| (1,1904) | 1:A:116:THR:HG23 | 1:A:76:VAL:HG23 | 12 | 0.23 |
| (1,1904) | 1:A:116:THR:HG21 | 1:A:104:LEU:HD12 | 12 | 0.23 |
| (1,1904) | 1:A:116:THR:HG21 | 1:A:104:LEU:HD11 | 12 | 0.23 |
| (1,1904) | 1:A:116:THR:HG21 | 1:A:104:LEU:HD13 | 12 | 0.23 |
| (1,1904) | 1:A:116:THR:HG22 | 1:A:104:LEU:HD12 | 12 | 0.23 |
| (1,1904) | 1:A:116:THR:HG22 | 1:A:104:LEU:HD11 | 12 | 0.23 |
| (1,1904) | 1:A:116:THR:HG22 | 1:A:104:LEU:HD13 | 12 | 0.23 |
| (1,1904) | 1:A:116:THR:HG23 | 1:A:104:LEU:HD12 | 12 | 0.23 |
| (1,1904) | 1:A:116:THR:HG23 | 1:A:104:LEU:HD11 | 12 | 0.23 |
| (1,1904) | 1:A:116:THR:HG23 | 1:A:104:LEU:HD13 | 12 | 0.23 |
| (1,1418) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:95:GLN:HB3 | 9 | 0.23 |
| (1,1235) | 1:A:113:VAL:H | 1:A:112:TYR:HB3 | 5 | 0.23 |
| (1,1235) | 1:A:113:VAL:H | 1:A:112:TYR:HB3 | 15 | 0.23 |
| (1,1235) | 1:A:113:VAL:H | 1:A:112:TYR:HB3 | 17 | 0.23 |
| (1,1235) | 1:A:113:VAL:H | 1:A:112:TYR:HB3 | 20 | 0.23 |
| (1,1198) | 1:A:95:GLN:H | 1:A:95:GLN:HB3 | 8 | 0.23 |
| (1,1180) | 1:A:45:LEU:H | 1:A:45:LEU:HB3 | 14 | 0.23 |
| (1,1054) | 1:A:47:ARG:HB2 | 1:A:47:ARG:H | 20 | 0.23 |
| (2,21) | 1:A:96:ALA:O | 1:A:100:ARG:H | 4 | 0.22 |
| (2,21) | 1:A:96:ALA:O | 1:A:100:ARG:H | 14 | 0.22 |
| (2,21) | 1:A:96:ALA:O | 1:A:100:ARG:H | 18 | 0.22 |
| (1,920) | 1:A:128:ARG:H | 1:A:128:ARG:HB3 | 12 | 0.22 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,535) | 1:A:108:PRO:HA | 1:A:110:ASP:HA | 18 | 0.22 |
| (1,502) | 1:A:97:LEU:HD22 | 1:A:98:VAL:H | 11 | 0.22 |
| (1,502) | 1:A:97:LEU:HD21 | 1:A:98:VAL:H | 11 | 0.22 |
| (1,502) | 1:A:97:LEU:HD23 | 1:A:98:VAL:H | 11 | 0.22 |
| (1,502) | 1:A:97:LEU:HD12 | 1:A:98:VAL:H | 11 | 0.22 |
| (1,502) | 1:A:97:LEU:HD11 | 1:A:98:VAL:H | 11 | 0.22 |
| (1,502) | 1:A:97:LEU:HD13 | 1:A:98:VAL:H | 11 | 0.22 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG12 | 1:A:67:ARG:HB2 | 18 | 0.22 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG12 | 1:A:67:ARG:HB3 | 18 | 0.22 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG11 | 1:A:67:ARG:HB2 | 18 | 0.22 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG11 | 1:A:67:ARG:HB3 | 18 | 0.22 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG13 | 1:A:67:ARG:HB2 | 18 | 0.22 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG13 | 1:A:67:ARG:HB3 | 18 | 0.22 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:87:LEU:HB2 | 1 | 0.22 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:87:LEU:HB2 | 1 | 0.22 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:87:LEU:HB2 | 1 | 0.22 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:87:LEU:HB2 | 3 | 0.22 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:87:LEU:HB2 | 3 | 0.22 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:87:LEU:HB2 | 3 | 0.22 |
| (1,2037) | 1:A:117:VAL:H | 1:A:68:PHE:HD1 | 16 | 0.22 |
| (1,2037) | 1:A:117:VAL:H | 1:A:68:PHE:HD2 | 16 | 0.22 |
| (1,2037) | 1:A:117:VAL:H | 1:A:114:ASN:HD21 | 16 | 0.22 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD12 | 5 | 0.22 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD11 | 5 | 0.22 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD13 | 5 | 0.22 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD22 | 5 | 0.22 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD21 | 5 | 0.22 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD23 | 5 | 0.22 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD12 | 5 | 0.22 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD11 | 5 | 0.22 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD13 | 5 | 0.22 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD12 | 18 | 0.22 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD11 | 18 | 0.22 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD13 | 18 | 0.22 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD22 | 18 | 0.22 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD21 | 18 | 0.22 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD23 | 18 | 0.22 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD12 | 18 | 0.22 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD11 | 18 | 0.22 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD13 | 18 | 0.22 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB2 | 6 | 0.22 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB1 | 6 | 0.22 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB3 | 6 | 0.22 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG22 | 6 | 0.22 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG21 | 6 | 0.22 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG23 | 6 | 0.22 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:124:ASP:HB2 | 1 | 0.22 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:124:ASP:HB3 | 1 | 0.22 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD21 | 1:A:124:ASP:HB2 | 1 | 0.22 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD21 | 1:A:124:ASP:HB3 | 1 | 0.22 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD23 | 1:A:124:ASP:HB2 | 1 | 0.22 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD23 | 1:A:124:ASP:HB3 | 1 | 0.22 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:95:GLN:HG2 | 1 | 0.22 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD21 | 1:A:95:GLN:HG2 | 1 | 0.22 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD23 | 1:A:95:GLN:HG2 | 1 | 0.22 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:79:VAL:H | 8 | 0.22 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:79:VAL:H | 8 | 0.22 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:79:VAL:H | 8 | 0.22 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:124:ASP:H | 8 | 0.22 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:124:ASP:H | 8 | 0.22 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:124:ASP:H | 8 | 0.22 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:79:VAL:H | 18 | 0.22 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:79:VAL:H | 18 | 0.22 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:79:VAL:H | 18 | 0.22 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:124:ASP:H | 18 | 0.22 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:124:ASP:H | 18 | 0.22 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:124:ASP:H | 18 | 0.22 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:53:LYS:HE2 | 8 | 0.22 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:60:ARG:HD2 | 8 | 0.22 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:60:ARG:HD3 | 8 | 0.22 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:92:ARG:HD2 | 8 | 0.22 |
| (1,1674) | 1:A:97:LEU:HA | 1:A:53:LYS:HE2 | 8 | 0.22 |
| (1,1674) | 1:A:97:LEU:HA | 1:A:60:ARG:HD2 | 8 | 0.22 |
| (1,1674) | 1:A:97:LEU:HA | 1:A:60:ARG:HD3 | 8 | 0.22 |
| (1,153) | 1:A:105:PRO:HG2 | 1:A:40:ARG:HB2 | 4 | 0.22 |
| (1,1381) | 1:A:81:LEU:H | 1:A:67:ARG:H | 13 | 0.22 |
| (1,1235) | 1:A:113:VAL:H | 1:A:112:TYR:HB3 | 8 | 0.22 |
| (1,1235) | 1:A:113:VAL:H | 1:A:112:TYR:HB3 | 16 | 0.22 |
| (1,1198) | 1:A:95:GLN:H | 1:A:95:GLN:HB3 | 1 | 0.22 |
| (1,1198) | 1:A:95:GLN:H | 1:A:95:GLN:HB3 | 13 | 0.22 |
| (1,1134) | 1:A:98:VAL:H | 1:A:97:LEU:HG | 2 | 0.22 |
| (1,1134) | 1:A:98:VAL:H | 1:A:97:LEU:HG | 16 | 0.22 |
| (1,1044) | 1:A:93:GLU:H | 1:A:93:GLU:HB3 | 18 | 0.22 |
| (2,21) | 1:A:96:ALA:O | 1:A:100:ARG:H | 7 | 0.21 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (2,21) | 1:A:96:ALA:O | 1:A:100:ARG:H | 13 | 0.21 |
| (1,970) | 1:A:76:VAL:H | 1:A:102:SER:HA | 13 | 0.21 |
| (1,843) | 1:A:123:ILE:H | 1:A:122:PRO:HG3 | 9 | 0.21 |
| (1,672) | 1:A:41:ILE:HA | 1:A:44:ARG:HD2 | 1 | 0.21 |
| (1,672) | 1:A:41:ILE:HA | 1:A:44:ARG:HD3 | 1 | 0.21 |
| (1,672) | 1:A:41:ILE:HA | 1:A:44:ARG:HD2 | 13 | 0.21 |
| (1,672) | 1:A:41:ILE:HA | 1:A:44:ARG:HD3 | 13 | 0.21 |
| (1,502) | 1:A:97:LEU:HD22 | 1:A:98:VAL:H | 17 | 0.21 |
| (1,502) | 1:A:97:LEU:HD21 | 1:A:98:VAL:H | 17 | 0.21 |
| (1,502) | 1:A:97:LEU:HD23 | 1:A:98:VAL:H | 17 | 0.21 |
| (1,502) | 1:A:97:LEU:HD12 | 1:A:98:VAL:H | 17 | 0.21 |
| (1,502) | 1:A:97:LEU:HD11 | 1:A:98:VAL:H | 17 | 0.21 |
| (1,502) | 1:A:97:LEU:HD13 | 1:A:98:VAL:H | 17 | 0.21 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG12 | 1:A:67:ARG:HB2 | 1 | 0.21 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG12 | 1:A:67:ARG:HB3 | 1 | 0.21 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG11 | 1:A:67:ARG:HB2 | 1 | 0.21 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG11 | 1:A:67:ARG:HB3 | 1 | 0.21 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG13 | 1:A:67:ARG:HB2 | 1 | 0.21 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG13 | 1:A:67:ARG:HB3 | 1 | 0.21 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:87:LEU:HB2 | 6 | 0.21 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:87:LEU:HB2 | 6 | 0.21 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:87:LEU:HB2 | 6 | 0.21 |
| (1,2037) | 1:A:117:VAL:H | 1:A:68:PHE:HD1 | 2 | 0.21 |
| (1,2037) | 1:A:117:VAL:H | 1:A:68:PHE:HD2 | 2 | 0.21 |
| (1,2037) | 1:A:117:VAL:H | 1:A:114:ASN:HD21 | 2 | 0.21 |
| (1,18) | 1:A:119:LEU:HD12 | 1:A:121:LEU:HG | 10 | 0.21 |
| (1,18) | 1:A:119:LEU:HD11 | 1:A:121:LEU:HG | 10 | 0.21 |
| (1,18) | 1:A:119:LEU:HD13 | 1:A:121:LEU:HG | 10 | 0.21 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:79:VAL:H | 7 | 0.21 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:79:VAL:H | 7 | 0.21 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:79:VAL:H | 7 | 0.21 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:124:ASP:H | 7 | 0.21 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:124:ASP:H | 7 | 0.21 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:124:ASP:H | 7 | 0.21 |
| (1,1489) | 1:A:34:GLU:H | 1:A:33:GLY:HA2 | 10 | 0.21 |
| (1,1418) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:95:GLN:HB3 | 3 | 0.21 |
| (1,1418) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:95:GLN:HB3 | 15 | 0.21 |
| (1,1198) | 1:A:95:GLN:H | 1:A:95:GLN:HB3 | 7 | 0.21 |
| (1,1198) | 1:A:95:GLN:H | 1:A:95:GLN:HB3 | 16 | 0.21 |
| (1,1198) | 1:A:95:GLN:H | 1:A:95:GLN:HB3 | 19 | 0.21 |
| (1,1072) | 1:A:132:PHE:HB3 | 1:A:132:PHE:H | 6 | 0.21 |
| (1,1044) | 1:A:93:GLU:H | 1:A:93:GLU:HB3 | 17 | 0.21 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (2,21) | 1:A:96:ALA:O | 1:A:100:ARG:H | 8 | 0.2 |
| (2,21) | 1:A:96:ALA:O | 1:A:100:ARG:H | 9 | 0.2 |
| (2,21) | 1:A:96:ALA:O | 1:A:100:ARG:H | 11 | 0.2 |
| (2,19) | 1:A:94:ILE:O | 1:A:98:VAL:H | 19 | 0.2 |
| (2,18) | 1:A:93:GLU:O | 1:A:97:LEU:H | 7 | 0.2 |
| (1,977) | 1:A:40:ARG:H | 1:A:38:ARG:H | 4 | 0.2 |
| (1,863) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:93:GLU:HB3 | 19 | 0.2 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG12 | 7 | 0.2 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG11 | 7 | 0.2 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG13 | 7 | 0.2 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG12 | 7 | 0.2 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG11 | 7 | 0.2 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG13 | 7 | 0.2 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG12 | 7 | 0.2 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG11 | 7 | 0.2 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG13 | 7 | 0.2 |
| (1,569) | 1:A:56:LEU:HA | 1:A:59:LYS:HG3 | 18 | 0.2 |
| (1,502) | 1:A:97:LEU:HD22 | 1:A:98:VAL:H | 7 | 0.2 |
| (1,502) | 1:A:97:LEU:HD21 | 1:A:98:VAL:H | 7 | 0.2 |
| (1,502) | 1:A:97:LEU:HD23 | 1:A:98:VAL:H | 7 | 0.2 |
| (1,502) | 1:A:97:LEU:HD12 | 1:A:98:VAL:H | 7 | 0.2 |
| (1,502) | 1:A:97:LEU:HD11 | 1:A:98:VAL:H | 7 | 0.2 |
| (1,502) | 1:A:97:LEU:HD13 | 1:A:98:VAL:H | 7 | 0.2 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG12 | 1:A:67:ARG:HB2 | 3 | 0.2 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG12 | 1:A:67:ARG:HB3 | 3 | 0.2 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG11 | 1:A:67:ARG:HB2 | 3 | 0.2 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG11 | 1:A:67:ARG:HB3 | 3 | 0.2 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG13 | 1:A:67:ARG:HB2 | 3 | 0.2 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG13 | 1:A:67:ARG:HB3 | 3 | 0.2 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG12 | 1:A:67:ARG:HB2 | 17 | 0.2 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG12 | 1:A:67:ARG:HB3 | 17 | 0.2 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG11 | 1:A:67:ARG:HB2 | 17 | 0.2 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG11 | 1:A:67:ARG:HB3 | 17 | 0.2 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG13 | 1:A:67:ARG:HB2 | 17 | 0.2 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG13 | 1:A:67:ARG:HB3 | 17 | 0.2 |
| (1,273) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:100:ARG:HD2 | 14 | 0.2 |
| (1,273) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:100:ARG:HD3 | 14 | 0.2 |
| (1,273) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:100:ARG:HD2 | 14 | 0.2 |
| (1,273) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:100:ARG:HD3 | 14 | 0.2 |
| (1,273) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:100:ARG:HD2 | 14 | 0.2 |
| (1,273) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:100:ARG:HD3 | 14 | 0.2 |
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:74:GLY:HA3 | 12 | 0.2 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:74:GLY:HA3 | 12 | 0.2 |
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:74:GLY:HA3 | 12 | 0.2 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:87:LEU:HB2 | 12 | 0.2 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:87:LEU:HB2 | 12 | 0.2 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:87:LEU:HB2 | 12 | 0.2 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:87:LEU:HB2 | 18 | 0.2 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:87:LEU:HB2 | 18 | 0.2 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:87:LEU:HB2 | 18 | 0.2 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB2 | 5 | 0.2 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB1 | 5 | 0.2 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB3 | 5 | 0.2 |
| (1,2043) | 1:A:125:PHE:H | 1:A:123:ILE:HG12 | 5 | 0.2 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB2 | 17 | 0.2 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB1 | 17 | 0.2 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB3 | 17 | 0.2 |
| (1,2043) | 1:A:125:PHE:H | 1:A:123:ILE:HG12 | 17 | 0.2 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB2 | 19 | 0.2 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB1 | 19 | 0.2 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB3 | 19 | 0.2 |
| (1,2043) | 1:A:125:PHE:H | 1:A:123:ILE:HG12 | 19 | 0.2 |
| (1,1990) | 1:A:42:SER:H | 1:A:38:ARG:HB2 | 3 | 0.2 |
| (1,1990) | 1:A:42:SER:H | 1:A:40:ARG:HB3 | 3 | 0.2 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD12 | 6 | 0.2 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD11 | 6 | 0.2 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD13 | 6 | 0.2 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD22 | 6 | 0.2 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD21 | 6 | 0.2 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD23 | 6 | 0.2 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD12 | 6 | 0.2 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD11 | 6 | 0.2 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD13 | 6 | 0.2 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD12 | 19 | 0.2 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD11 | 19 | 0.2 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD13 | 19 | 0.2 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD22 | 19 | 0.2 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD21 | 19 | 0.2 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD23 | 19 | 0.2 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD12 | 19 | 0.2 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD11 | 19 | 0.2 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD13 | 19 | 0.2 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD22 | 1:A:45:LEU:HB2 | 6 | 0.2 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD21 | 1:A:45:LEU:HB2 | 6 | 0.2 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD23 | 1:A:45:LEU:HB2 | 6 | 0.2 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD12 | 1:A:45:LEU:HB2 | 6 | 0.2 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD11 | 1:A:45:LEU:HB2 | 6 | 0.2 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD13 | 1:A:45:LEU:HB2 | 6 | 0.2 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD22 | 1:A:49:LYS:HB2 | 6 | 0.2 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD21 | 1:A:49:LYS:HB2 | 6 | 0.2 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD23 | 1:A:49:LYS:HB2 | 6 | 0.2 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD12 | 1:A:49:LYS:HB2 | 6 | 0.2 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD11 | 1:A:49:LYS:HB2 | 6 | 0.2 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD13 | 1:A:49:LYS:HB2 | 6 | 0.2 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:79:VAL:H | 15 | 0.2 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:79:VAL:H | 15 | 0.2 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:79:VAL:H | 15 | 0.2 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:124:ASP:H | 15 | 0.2 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:124:ASP:H | 15 | 0.2 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:124:ASP:H | 15 | 0.2 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:95:GLN:HB2 | 12 | 0.2 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:95:GLN:HB2 | 12 | 0.2 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:95:GLN:HB2 | 12 | 0.2 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:95:GLN:HG2 | 12 | 0.2 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:95:GLN:HG2 | 12 | 0.2 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:95:GLN:HG2 | 12 | 0.2 |
| (1,1418) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:95:GLN:HB3 | 5 | 0.2 |
| (1,1418) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:95:GLN:HB3 | 16 | 0.2 |
| (1,1233) | 1:A:106:THR:H | 1:A:105:PRO:HG3 | 10 | 0.2 |
| (1,1198) | 1:A:95:GLN:H | 1:A:95:GLN:HB3 | 2 | 0.2 |
| (1,1198) | 1:A:95:GLN:H | 1:A:95:GLN:HB3 | 4 | 0.2 |
| (1,1198) | 1:A:95:GLN:H | 1:A:95:GLN:HB3 | 5 | 0.2 |
| (1,1198) | 1:A:95:GLN:H | 1:A:95:GLN:HB3 | 6 | 0.2 |
| (1,1198) | 1:A:95:GLN:H | 1:A:95:GLN:HB3 | 18 | 0.2 |
| (1,1198) | 1:A:95:GLN:H | 1:A:95:GLN:HB3 | 20 | 0.2 |
| (1,1134) | 1:A:98:VAL:H | 1:A:97:LEU:HG | 15 | 0.2 |
| (1,1044) | 1:A:93:GLU:H | 1:A:93:GLU:HB3 | 7 | 0.2 |
| (1,1044) | 1:A:93:GLU:H | 1:A:93:GLU:HB3 | 8 | 0.2 |
| (2,21) | 1:A:96:ALA:O | 1:A:100:ARG:H | 16 | 0.19 |
| (1,970) | 1:A:76:VAL:H | 1:A:102:SER:HA | 8 | 0.19 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG12 | 8 | 0.19 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG11 | 8 | 0.19 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:66:VAL:HG13 | 8 | 0.19 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG12 | 8 | 0.19 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG11 | 8 | 0.19 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:66:VAL:HG13 | 8 | 0.19 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG12 | 8 | 0.19 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG11 | 8 | 0.19 |
| (1,72) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:66:VAL:HG13 | 8 | 0.19 |
| (1,672) | 1:A:41:ILE:HA | 1:A:44:ARG:HD2 | 6 | 0.19 |
| (1,672) | 1:A:41:ILE:HA | 1:A:44:ARG:HD3 | 6 | 0.19 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD22 | 20 | 0.19 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD21 | 20 | 0.19 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD23 | 20 | 0.19 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD12 | 20 | 0.19 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD11 | 20 | 0.19 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD13 | 20 | 0.19 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD22 | 20 | 0.19 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD21 | 20 | 0.19 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD23 | 20 | 0.19 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD12 | 20 | 0.19 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD11 | 20 | 0.19 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD13 | 20 | 0.19 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD22 | 20 | 0.19 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD21 | 20 | 0.19 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD23 | 20 | 0.19 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD12 | 20 | 0.19 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD11 | 20 | 0.19 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD13 | 20 | 0.19 |
| (1,654) | 1:A:44:ARG:HG2 | 1:A:47:ARG:HD3 | 2 | 0.19 |
| (1,654) | 1:A:44:ARG:HG3 | 1:A:47:ARG:HD3 | 2 | 0.19 |
| (1,574) | 1:A:41:ILE:HA | 1:A:105:PRO:HD3 | 4 | 0.19 |
| (1,535) | 1:A:108:PRO:HA | 1:A:110:ASP:HA | 1 | 0.19 |
| (1,525) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:48:PHE:HE1 | 2 | 0.19 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:87:LEU:HB2 | 17 | 0.19 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:87:LEU:HB2 | 17 | 0.19 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:87:LEU:HB2 | 17 | 0.19 |
| (1,2037) | 1:A:117:VAL:H | 1:A:68:PHE:HD1 | 15 | 0.19 |
| (1,2037) | 1:A:117:VAL:H | 1:A:68:PHE:HD2 | 15 | 0.19 |
| (1,2037) | 1:A:117:VAL:H | 1:A:114:ASN:HD21 | 15 | 0.19 |
| (1,2037) | 1:A:117:VAL:H | 1:A:68:PHE:HD1 | 19 | 0.19 |
| (1,2037) | 1:A:117:VAL:H | 1:A:68:PHE:HD2 | 19 | 0.19 |
| (1,2037) | 1:A:117:VAL:H | 1:A:114:ASN:HD21 | 19 | 0.19 |
| (1,1990) | 1:A:42:SER:H | 1:A:38:ARG:HB2 | 1 | 0.19 |
| (1,1990) | 1:A:42:SER:H | 1:A:40:ARG:HB3 | 1 | 0.19 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:79:VAL:H | 16 | 0.19 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:79:VAL:H | 16 | 0.19 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:79:VAL:H | 16 | 0.19 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:124:ASP:H | 16 | 0.19 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:124:ASP:H | 16 | 0.19 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:124:ASP:H | 16 | 0.19 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD22 | 7 | 0.19 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD21 | 7 | 0.19 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD23 | 7 | 0.19 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD22 | 7 | 0.19 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD21 | 7 | 0.19 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD23 | 7 | 0.19 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD22 | 7 | 0.19 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD21 | 7 | 0.19 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD23 | 7 | 0.19 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD12 | 7 | 0.19 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD11 | 7 | 0.19 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD13 | 7 | 0.19 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD12 | 7 | 0.19 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD11 | 7 | 0.19 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD13 | 7 | 0.19 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD12 | 7 | 0.19 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD11 | 7 | 0.19 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD13 | 7 | 0.19 |
| (1,17) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:53:LYS:HA | 9 | 0.19 |
| (1,17) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:53:LYS:HA | 9 | 0.19 |
| (1,17) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:53:LYS:HA | 9 | 0.19 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:53:LYS:HE2 | 19 | 0.19 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:60:ARG:HD2 | 19 | 0.19 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:60:ARG:HD3 | 19 | 0.19 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:92:ARG:HD2 | 19 | 0.19 |
| (1,1674) | 1:A:97:LEU:HA | 1:A:53:LYS:HE2 | 19 | 0.19 |
| (1,1674) | 1:A:97:LEU:HA | 1:A:60:ARG:HD2 | 19 | 0.19 |
| (1,1674) | 1:A:97:LEU:HA | 1:A:60:ARG:HD3 | 19 | 0.19 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:53:LYS:HE2 | 20 | 0.19 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:60:ARG:HD2 | 20 | 0.19 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:60:ARG:HD3 | 20 | 0.19 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:92:ARG:HD2 | 20 | 0.19 |
| (1,1674) | 1:A:97:LEU:HA | 1:A:53:LYS:HE2 | 20 | 0.19 |
| (1,1674) | 1:A:97:LEU:HA | 1:A:60:ARG:HD2 | 20 | 0.19 |
| (1,1674) | 1:A:97:LEU:HA | 1:A:60:ARG:HD3 | 20 | 0.19 |
| (1,1575) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:67:ARG:H | 4 | 0.19 |
| (1,1575) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:67:ARG:H | 4 | 0.19 |
| (1,1575) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:67:ARG:H | 4 | 0.19 |
| (1,1575) | 1:A:119:LEU:HD12 | 1:A:66:VAL:H | 4 | 0.19 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1575) | 1:A:119:LEU:HD11 | 1:A:66:VAL:H | 4 | 0.19 |
| (1,1575) | 1:A:119:LEU:HD13 | 1:A:66:VAL:H | 4 | 0.19 |
| (1,1575) | 1:A:119:LEU:HD12 | 1:A:67:ARG:H | 4 | 0.19 |
| (1,1575) | 1:A:119:LEU:HD11 | 1:A:67:ARG:H | 4 | 0.19 |
| (1,1575) | 1:A:119:LEU:HD13 | 1:A:67:ARG:H | 4 | 0.19 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG22 | 9 | 0.19 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG21 | 9 | 0.19 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG23 | 9 | 0.19 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG22 | 9 | 0.19 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG21 | 9 | 0.19 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG23 | 9 | 0.19 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG22 | 9 | 0.19 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG21 | 9 | 0.19 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG23 | 9 | 0.19 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD22 | 9 | 0.19 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD21 | 9 | 0.19 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD23 | 9 | 0.19 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD22 | 9 | 0.19 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD21 | 9 | 0.19 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD23 | 9 | 0.19 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD22 | 9 | 0.19 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD21 | 9 | 0.19 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD23 | 9 | 0.19 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:73:GLN:HA | 15 | 0.19 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:73:GLN:HA | 15 | 0.19 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:73:GLN:HA | 15 | 0.19 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:77:LEU:HA | 15 | 0.19 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:77:LEU:HA | 15 | 0.19 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:77:LEU:HA | 15 | 0.19 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HB2 | 18 | 0.19 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HB2 | 18 | 0.19 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HB2 | 18 | 0.19 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:128:ARG:HB3 | 18 | 0.19 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:128:ARG:HB3 | 18 | 0.19 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:128:ARG:HB3 | 18 | 0.19 |
| (1,1489) | 1:A:34:GLU:H | 1:A:33:GLY:HA2 | 20 | 0.19 |
| (1,1418) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:95:GLN:HB3 | 4 | 0.19 |
| (1,1418) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:95:GLN:HB3 | 6 | 0.19 |
| (1,1418) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:95:GLN:HB3 | 12 | 0.19 |
| (1,1233) | 1:A:106:THR:H | 1:A:105:PRO:HG3 | 3 | 0.19 |
| (1,1198) | 1:A:95:GLN:H | 1:A:95:GLN:HB3 | 3 | 0.19 |
| (1,1198) | 1:A:95:GLN:H | 1:A:95:GLN:HB3 | 10 | 0.19 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1060) | 1:A:44:ARG:HB3 | 1:A:44:ARG:H | 5 | 0.19 |
| (1,1054) | 1:A:47:ARG:HB2 | 1:A:47:ARG:H | 5 | 0.19 |
| (1,1044) | 1:A:93:GLU:H | 1:A:93:GLU:HB3 | 14 | 0.19 |
| (2,21) | 1:A:96:ALA:O | 1:A:100:ARG:H | 17 | 0.18 |
| (1,977) | 1:A:40:ARG:H | 1:A:38:ARG:H | 9 | 0.18 |
| (1,920) | 1:A:128:ARG:H | 1:A:128:ARG:HB3 | 13 | 0.18 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:111:ALA:HB2 | 11 | 0.18 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:111:ALA:HB1 | 11 | 0.18 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:111:ALA:HB3 | 11 | 0.18 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE2 | 1:A:111:ALA:HB2 | 11 | 0.18 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE2 | 1:A:111:ALA:HB1 | 11 | 0.18 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE2 | 1:A:111:ALA:HB3 | 11 | 0.18 |
| (1,672) | 1:A:41:ILE:HA | 1:A:44:ARG:HD2 | 3 | 0.18 |
| (1,672) | 1:A:41:ILE:HA | 1:A:44:ARG:HD3 | 3 | 0.18 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD22 | 9 | 0.18 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD21 | 9 | 0.18 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD23 | 9 | 0.18 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD12 | 9 | 0.18 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD11 | 9 | 0.18 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD13 | 9 | 0.18 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD22 | 9 | 0.18 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD21 | 9 | 0.18 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD23 | 9 | 0.18 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD12 | 9 | 0.18 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD11 | 9 | 0.18 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD13 | 9 | 0.18 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD22 | 9 | 0.18 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD21 | 9 | 0.18 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD23 | 9 | 0.18 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD12 | 9 | 0.18 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD11 | 9 | 0.18 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD13 | 9 | 0.18 |
| (1,62) | 1:A:111:ALA:HB2 | 1:A:30:ALA:HB2 | 10 | 0.18 |
| (1,62) | 1:A:111:ALA:HB2 | 1:A:30:ALA:HB1 | 10 | 0.18 |
| (1,62) | 1:A:111:ALA:HB2 | 1:A:30:ALA:HB3 | 10 | 0.18 |
| (1,62) | 1:A:111:ALA:HB1 | 1:A:30:ALA:HB2 | 10 | 0.18 |
| (1,62) | 1:A:111:ALA:HB1 | 1:A:30:ALA:HB1 | 10 | 0.18 |
| (1,62) | 1:A:111:ALA:HB1 | 1:A:30:ALA:HB3 | 10 | 0.18 |
| (1,62) | 1:A:111:ALA:HB3 | 1:A:30:ALA:HB2 | 10 | 0.18 |
| (1,62) | 1:A:111:ALA:HB3 | 1:A:30:ALA:HB1 | 10 | 0.18 |
| (1,62) | 1:A:111:ALA:HB3 | 1:A:30:ALA:HB3 | 10 | 0.18 |
| (1,616) | 1:A:39:SER:HB3 | 1:A:38:ARG:HD2 | 16 | 0.18 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,574) | 1:A:41:ILE:HA | 1:A:105:PRO:HD3 | 9 | 0.18 |
| (1,574) | 1:A:41:ILE:HA | 1:A:105:PRO:HD3 | 15 | 0.18 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:104:LEU:HD12 | 15 | 0.18 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:104:LEU:HD11 | 15 | 0.18 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:104:LEU:HD13 | 15 | 0.18 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:104:LEU:HD12 | 15 | 0.18 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:104:LEU:HD11 | 15 | 0.18 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:104:LEU:HD13 | 15 | 0.18 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:104:LEU:HD12 | 15 | 0.18 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:104:LEU:HD11 | 15 | 0.18 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:104:LEU:HD13 | 15 | 0.18 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:104:LEU:HD12 | 18 | 0.18 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:104:LEU:HD11 | 18 | 0.18 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:104:LEU:HD13 | 18 | 0.18 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:104:LEU:HD12 | 18 | 0.18 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:104:LEU:HD11 | 18 | 0.18 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:104:LEU:HD13 | 18 | 0.18 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:104:LEU:HD12 | 18 | 0.18 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:104:LEU:HD11 | 18 | 0.18 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:104:LEU:HD13 | 18 | 0.18 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG12 | 1:A:67:ARG:HB2 | 8 | 0.18 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG12 | 1:A:67:ARG:HB3 | 8 | 0.18 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG11 | 1:A:67:ARG:HB2 | 8 | 0.18 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG11 | 1:A:67:ARG:HB3 | 8 | 0.18 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG13 | 1:A:67:ARG:HB2 | 8 | 0.18 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG13 | 1:A:67:ARG:HB3 | 8 | 0.18 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:87:LEU:HB2 | 11 | 0.18 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:87:LEU:HB2 | 11 | 0.18 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:87:LEU:HB2 | 11 | 0.18 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:87:LEU:HB2 | 14 | 0.18 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:87:LEU:HB2 | 14 | 0.18 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:87:LEU:HB2 | 14 | 0.18 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB2 | 8 | 0.18 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB1 | 8 | 0.18 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB3 | 8 | 0.18 |
| (1,2043) | 1:A:125:PHE:H | 1:A:123:ILE:HG12 | 8 | 0.18 |
| (1,2037) | 1:A:117:VAL:H | 1:A:68:PHE:HD1 | 4 | 0.18 |
| (1,2037) | 1:A:117:VAL:H | 1:A:68:PHE:HD2 | 4 | 0.18 |
| (1,2037) | 1:A:117:VAL:H | 1:A:114:ASN:HD21 | 4 | 0.18 |
| (1,2009) | 1:A:83:SER:H | 1:A:67:ARG:HG2 | 17 | 0.18 |
| (1,2009) | 1:A:83:SER:H | 1:A:67:ARG:HG3 | 17 | 0.18 |
| (1,2009) | 1:A:83:SER:H | 1:A:123:ILE:HG12 | 17 | 0.18 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2009) | 1:A:114:ASN:HD22 | 1:A:30:ALA:HB2 | 17 | 0.18 |
| (1,2009) | 1:A:114:ASN:HD22 | 1:A:30:ALA:HB1 | 17 | 0.18 |
| (1,2009) | 1:A:114:ASN:HD22 | 1:A:30:ALA:HB3 | 17 | 0.18 |
| (1,2009) | 1:A:114:ASN:HD22 | 1:A:109:ALA:HB2 | 17 | 0.18 |
| (1,2009) | 1:A:114:ASN:HD22 | 1:A:109:ALA:HB1 | 17 | 0.18 |
| (1,2009) | 1:A:114:ASN:HD22 | 1:A:109:ALA:HB3 | 17 | 0.18 |
| (1,1990) | 1:A:42:SER:H | 1:A:38:ARG:HB2 | 5 | 0.18 |
| (1,1990) | 1:A:42:SER:H | 1:A:40:ARG:HB3 | 5 | 0.18 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB2 | 7 | 0.18 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB1 | 7 | 0.18 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB3 | 7 | 0.18 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG22 | 7 | 0.18 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG21 | 7 | 0.18 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG23 | 7 | 0.18 |
| (1,1887) | 1:A:63:VAL:HG22 | 1:A:64:GLY:H | 7 | 0.18 |
| (1,1887) | 1:A:63:VAL:HG21 | 1:A:64:GLY:H | 7 | 0.18 |
| (1,1887) | 1:A:63:VAL:HG23 | 1:A:64:GLY:H | 7 | 0.18 |
| (1,1887) | 1:A:63:VAL:HG12 | 1:A:64:GLY:H | 7 | 0.18 |
| (1,1887) | 1:A:63:VAL:HG11 | 1:A:64:GLY:H | 7 | 0.18 |
| (1,1887) | 1:A:63:VAL:HG13 | 1:A:64:GLY:H | 7 | 0.18 |
| (1,1887) | 1:A:3:VAL:HG22 | 1:A:4:GLN:H | 7 | 0.18 |
| (1,1887) | 1:A:3:VAL:HG21 | 1:A:4:GLN:H | 7 | 0.18 |
| (1,1887) | 1:A:3:VAL:HG23 | 1:A:4:GLN:H | 7 | 0.18 |
| (1,1887) | 1:A:3:VAL:HG12 | 1:A:4:GLN:H | 7 | 0.18 |
| (1,1887) | 1:A:3:VAL:HG11 | 1:A:4:GLN:H | 7 | 0.18 |
| (1,1887) | 1:A:3:VAL:HG13 | 1:A:4:GLN:H | 7 | 0.18 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:79:VAL:H | 1 | 0.18 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:79:VAL:H | 1 | 0.18 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:79:VAL:H | 1 | 0.18 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:124:ASP:H | 1 | 0.18 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:124:ASP:H | 1 | 0.18 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:124:ASP:H | 1 | 0.18 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD22 | 3 | 0.18 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD21 | 3 | 0.18 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD23 | 3 | 0.18 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD22 | 3 | 0.18 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD21 | 3 | 0.18 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD23 | 3 | 0.18 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD22 | 3 | 0.18 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD21 | 3 | 0.18 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD23 | 3 | 0.18 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD12 | 3 | 0.18 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD11 | 3 | 0.18 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD13 | 3 | 0.18 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD12 | 3 | 0.18 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD11 | 3 | 0.18 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD13 | 3 | 0.18 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD12 | 3 | 0.18 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD11 | 3 | 0.18 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD13 | 3 | 0.18 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD22 | 17 | 0.18 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD21 | 17 | 0.18 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD23 | 17 | 0.18 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD22 | 17 | 0.18 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD21 | 17 | 0.18 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD23 | 17 | 0.18 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD22 | 17 | 0.18 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD21 | 17 | 0.18 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD23 | 17 | 0.18 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD12 | 17 | 0.18 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD11 | 17 | 0.18 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD13 | 17 | 0.18 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD12 | 17 | 0.18 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD11 | 17 | 0.18 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD13 | 17 | 0.18 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD12 | 17 | 0.18 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD11 | 17 | 0.18 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD13 | 17 | 0.18 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:95:GLN:HB2 | 4 | 0.18 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:95:GLN:HB2 | 4 | 0.18 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:95:GLN:HB2 | 4 | 0.18 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:95:GLN:HG2 | 4 | 0.18 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:95:GLN:HG2 | 4 | 0.18 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:95:GLN:HG2 | 4 | 0.18 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:95:GLN:HB2 | 8 | 0.18 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:95:GLN:HB2 | 8 | 0.18 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:95:GLN:HB2 | 8 | 0.18 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:95:GLN:HG2 | 8 | 0.18 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:95:GLN:HG2 | 8 | 0.18 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:95:GLN:HG2 | 8 | 0.18 |
| (1,1575) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:67:ARG:H | 11 | 0.18 |
| (1,1575) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:67:ARG:H | 11 | 0.18 |
| (1,1575) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:67:ARG:H | 11 | 0.18 |
| (1,1575) | 1:A:119:LEU:HD12 | 1:A:66:VAL:H | 11 | 0.18 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1575) | 1:A:119:LEU:HD11 | 1:A:66:VAL:H | 11 | 0.18 |
| (1,1575) | 1:A:119:LEU:HD13 | 1:A:66:VAL:H | 11 | 0.18 |
| (1,1575) | 1:A:119:LEU:HD12 | 1:A:67:ARG:H | 11 | 0.18 |
| (1,1575) | 1:A:119:LEU:HD11 | 1:A:67:ARG:H | 11 | 0.18 |
| (1,1575) | 1:A:119:LEU:HD13 | 1:A:67:ARG:H | 11 | 0.18 |
| (1,153) | 1:A:105:PRO:HG2 | 1:A:40:ARG:HB2 | 18 | 0.18 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG22 | 14 | 0.18 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG21 | 14 | 0.18 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG23 | 14 | 0.18 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG22 | 14 | 0.18 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG21 | 14 | 0.18 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG23 | 14 | 0.18 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG22 | 14 | 0.18 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG21 | 14 | 0.18 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG23 | 14 | 0.18 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD22 | 14 | 0.18 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD21 | 14 | 0.18 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD23 | 14 | 0.18 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD22 | 14 | 0.18 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD21 | 14 | 0.18 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD23 | 14 | 0.18 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD22 | 14 | 0.18 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD21 | 14 | 0.18 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD23 | 14 | 0.18 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HB2 | 4 | 0.18 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HB2 | 4 | 0.18 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HB2 | 4 | 0.18 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:128:ARG:HB3 | 4 | 0.18 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:128:ARG:HB3 | 4 | 0.18 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:128:ARG:HB3 | 4 | 0.18 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HB2 | 6 | 0.18 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HB2 | 6 | 0.18 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HB2 | 6 | 0.18 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:128:ARG:HB3 | 6 | 0.18 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:128:ARG:HB3 | 6 | 0.18 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:128:ARG:HB3 | 6 | 0.18 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HB2 | 13 | 0.18 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HB2 | 13 | 0.18 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HB2 | 13 | 0.18 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:128:ARG:HB3 | 13 | 0.18 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:128:ARG:HB3 | 13 | 0.18 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:128:ARG:HB3 | 13 | 0.18 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1418) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:95:GLN:HB3 | 18 | 0.18 |
| (1,132) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:81:LEU:HG | 13 | 0.18 |
| (1,132) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:81:LEU:HG | 13 | 0.18 |
| (1,132) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:81:LEU:HG | 13 | 0.18 |
| (1,1233) | 1:A:106:THR:H | 1:A:105:PRO:HG3 | 15 | 0.18 |
| (1,1233) | 1:A:106:THR:H | 1:A:105:PRO:HG3 | 20 | 0.18 |
| (1,1198) | 1:A:95:GLN:H | 1:A:95:GLN:HB3 | 9 | 0.18 |
| (1,1198) | 1:A:95:GLN:H | 1:A:95:GLN:HB3 | 12 | 0.18 |
| (1,1198) | 1:A:95:GLN:H | 1:A:95:GLN:HB3 | 15 | 0.18 |
| (1,1198) | 1:A:95:GLN:H | 1:A:95:GLN:HB3 | 17 | 0.18 |
| (1,1120) | 1:A:49:LYS:HB2 | 1:A:49:LYS:H | 1 | 0.18 |
| (1,1054) | 1:A:47:ARG:HB2 | 1:A:47:ARG:H | 16 | 0.18 |
| (1,977) | 1:A:40:ARG:H | 1:A:38:ARG:H | 14 | 0.17 |
| (1,970) | 1:A:76:VAL:H | 1:A:102:SER:HA | 7 | 0.17 |
| (1,970) | 1:A:76:VAL:H | 1:A:102:SER:HA | 16 | 0.17 |
| (1,920) | 1:A:128:ARG:H | 1:A:128:ARG:HB3 | 11 | 0.17 |
| (1,920) | 1:A:128:ARG:H | 1:A:128:ARG:HB3 | 17 | 0.17 |
| (1,729) | 1:A:37:TRP:HH2 | 1:A:37:TRP:HB2 | 4 | 0.17 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:111:ALA:HB2 | 12 | 0.17 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:111:ALA:HB1 | 12 | 0.17 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:111:ALA:HB3 | 12 | 0.17 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE2 | 1:A:111:ALA:HB2 | 12 | 0.17 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE2 | 1:A:111:ALA:HB1 | 12 | 0.17 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE2 | 1:A:111:ALA:HB3 | 12 | 0.17 |
| (1,654) | 1:A:44:ARG:HG2 | 1:A:47:ARG:HD3 | 5 | 0.17 |
| (1,654) | 1:A:44:ARG:HG3 | 1:A:47:ARG:HD3 | 5 | 0.17 |
| (1,618) | 1:A:44:ARG:HB3 | 1:A:103:PRO:HB2 | 16 | 0.17 |
| (1,574) | 1:A:41:ILE:HA | 1:A:105:PRO:HD3 | 6 | 0.17 |
| (1,574) | 1:A:41:ILE:HA | 1:A:105:PRO:HD3 | 18 | 0.17 |
| (1,535) | 1:A:108:PRO:HA | 1:A:110:ASP:HA | 9 | 0.17 |
| (1,417) | 1:A:66:VAL:HG12 | 1:A:95:GLN:HG2 | 15 | 0.17 |
| (1,417) | 1:A:66:VAL:HG11 | 1:A:95:GLN:HG2 | 15 | 0.17 |
| (1,417) | 1:A:66:VAL:HG13 | 1:A:95:GLN:HG2 | 15 | 0.17 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG12 | 1:A:67:ARG:HB2 | 20 | 0.17 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG12 | 1:A:67:ARG:HB3 | 20 | 0.17 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG11 | 1:A:67:ARG:HB2 | 20 | 0.17 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG11 | 1:A:67:ARG:HB3 | 20 | 0.17 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG13 | 1:A:67:ARG:HB2 | 20 | 0.17 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG13 | 1:A:67:ARG:HB3 | 20 | 0.17 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:87:LEU:HB2 | 4 | 0.17 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:87:LEU:HB2 | 4 | 0.17 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:87:LEU:HB2 | 4 | 0.17 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:87:LEU:HB2 | 13 | 0.17 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:87:LEU:HB2 | 13 | 0.17 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:87:LEU:HB2 | 13 | 0.17 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB2 | 9 | 0.17 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB1 | 9 | 0.17 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB3 | 9 | 0.17 |
| (1,2043) | 1:A:125:PHE:H | 1:A:123:ILE:HG12 | 9 | 0.17 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB2 | 10 | 0.17 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB1 | 10 | 0.17 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB3 | 10 | 0.17 |
| (1,2043) | 1:A:125:PHE:H | 1:A:123:ILE:HG12 | 10 | 0.17 |
| (1,2037) | 1:A:117:VAL:H | 1:A:68:PHE:HD1 | 1 | 0.17 |
| (1,2037) | 1:A:117:VAL:H | 1:A:68:PHE:HD2 | 1 | 0.17 |
| (1,2037) | 1:A:117:VAL:H | 1:A:114:ASN:HD21 | 1 | 0.17 |
| (1,2037) | 1:A:117:VAL:H | 1:A:68:PHE:HD1 | 18 | 0.17 |
| (1,2037) | 1:A:117:VAL:H | 1:A:68:PHE:HD2 | 18 | 0.17 |
| (1,2037) | 1:A:117:VAL:H | 1:A:114:ASN:HD21 | 18 | 0.17 |
| (1,1990) | 1:A:42:SER:H | 1:A:38:ARG:HB2 | 8 | 0.17 |
| (1,1990) | 1:A:42:SER:H | 1:A:40:ARG:HB3 | 8 | 0.17 |
| (1,1990) | 1:A:42:SER:H | 1:A:38:ARG:HB2 | 16 | 0.17 |
| (1,1990) | 1:A:42:SER:H | 1:A:40:ARG:HB3 | 16 | 0.17 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD12 | 2 | 0.17 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD11 | 2 | 0.17 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD13 | 2 | 0.17 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD22 | 2 | 0.17 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD21 | 2 | 0.17 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD23 | 2 | 0.17 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD12 | 2 | 0.17 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD11 | 2 | 0.17 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD13 | 2 | 0.17 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB2 | 17 | 0.17 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB1 | 17 | 0.17 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB3 | 17 | 0.17 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG22 | 17 | 0.17 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG21 | 17 | 0.17 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG23 | 17 | 0.17 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:79:VAL:H | 3 | 0.17 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:79:VAL:H | 3 | 0.17 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:79:VAL:H | 3 | 0.17 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:124:ASP:H | 3 | 0.17 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:124:ASP:H | 3 | 0.17 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:124:ASP:H | 3 | 0.17 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:79:VAL:H | 4 | 0.17 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:79:VAL:H | 4 | 0.17 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:79:VAL:H | 4 | 0.17 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:124:ASP:H | 4 | 0.17 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:124:ASP:H | 4 | 0.17 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:124:ASP:H | 4 | 0.17 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:79:VAL:H | 20 | 0.17 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:79:VAL:H | 20 | 0.17 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:79:VAL:H | 20 | 0.17 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:124:ASP:H | 20 | 0.17 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:124:ASP:H | 20 | 0.17 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:124:ASP:H | 20 | 0.17 |
| (1,1744) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:37:TRP:HB2 | 4 | 0.17 |
| (1,1744) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:37:TRP:HB2 | 4 | 0.17 |
| (1,1744) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:37:TRP:HB2 | 4 | 0.17 |
| (1,1744) | 1:A:103:PRO:HD3 | 1:A:104:LEU:HD12 | 4 | 0.17 |
| (1,1744) | 1:A:103:PRO:HD3 | 1:A:104:LEU:HD11 | 4 | 0.17 |
| (1,1744) | 1:A:103:PRO:HD3 | 1:A:104:LEU:HD13 | 4 | 0.17 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD22 | 8 | 0.17 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD21 | 8 | 0.17 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD23 | 8 | 0.17 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD22 | 8 | 0.17 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD21 | 8 | 0.17 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD23 | 8 | 0.17 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD22 | 8 | 0.17 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD21 | 8 | 0.17 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD23 | 8 | 0.17 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD12 | 8 | 0.17 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD11 | 8 | 0.17 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD13 | 8 | 0.17 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD12 | 8 | 0.17 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD11 | 8 | 0.17 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD13 | 8 | 0.17 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD12 | 8 | 0.17 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD11 | 8 | 0.17 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD13 | 8 | 0.17 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD22 | 20 | 0.17 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD21 | 20 | 0.17 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD23 | 20 | 0.17 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD22 | 20 | 0.17 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD21 | 20 | 0.17 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD23 | 20 | 0.17 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD22 | 20 | 0.17 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD21 | 20 | 0.17 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD23 | 20 | 0.17 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD12 | 20 | 0.17 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD11 | 20 | 0.17 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD13 | 20 | 0.17 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD12 | 20 | 0.17 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD11 | 20 | 0.17 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD13 | 20 | 0.17 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD12 | 20 | 0.17 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD11 | 20 | 0.17 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD13 | 20 | 0.17 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD22 | 18 | 0.17 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD21 | 18 | 0.17 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD23 | 18 | 0.17 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD12 | 18 | 0.17 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD11 | 18 | 0.17 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD13 | 18 | 0.17 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:53:LYS:HE2 | 1 | 0.17 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:60:ARG:HD2 | 1 | 0.17 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:60:ARG:HD3 | 1 | 0.17 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:92:ARG:HD2 | 1 | 0.17 |
| (1,1674) | 1:A:97:LEU:HA | 1:A:53:LYS:HE2 | 1 | 0.17 |
| (1,1674) | 1:A:97:LEU:HA | 1:A:60:ARG:HD2 | 1 | 0.17 |
| (1,1674) | 1:A:97:LEU:HA | 1:A:60:ARG:HD3 | 1 | 0.17 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:53:LYS:HE2 | 2 | 0.17 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:60:ARG:HD2 | 2 | 0.17 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:60:ARG:HD3 | 2 | 0.17 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:92:ARG:HD2 | 2 | 0.17 |
| (1,1674) | 1:A:97:LEU:HA | 1:A:53:LYS:HE2 | 2 | 0.17 |
| (1,1674) | 1:A:97:LEU:HA | 1:A:60:ARG:HD2 | 2 | 0.17 |
| (1,1674) | 1:A:97:LEU:HA | 1:A:60:ARG:HD3 | 2 | 0.17 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:95:GLN:HB2 | 2 | 0.17 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:95:GLN:HB2 | 2 | 0.17 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:95:GLN:HB2 | 2 | 0.17 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:95:GLN:HG2 | 2 | 0.17 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:95:GLN:HG2 | 2 | 0.17 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:95:GLN:HG2 | 2 | 0.17 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:95:GLN:HB2 | 5 | 0.17 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:95:GLN:HB2 | 5 | 0.17 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:95:GLN:HB2 | 5 | 0.17 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:95:GLN:HG2 | 5 | 0.17 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:95:GLN:HG2 | 5 | 0.17 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:95:GLN:HG2 | 5 | 0.17 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:95:GLN:HB2 | 20 | 0.17 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:95:GLN:HB2 | 20 | 0.17 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:95:GLN:HB2 | 20 | 0.17 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:95:GLN:HG2 | 20 | 0.17 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:95:GLN:HG2 | 20 | 0.17 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:95:GLN:HG2 | 20 | 0.17 |
| (1,153) | 1:A:105:PRO:HG2 | 1:A:40:ARG:HB2 | 1 | 0.17 |
| (1,153) | 1:A:105:PRO:HG2 | 1:A:40:ARG:HB2 | 11 | 0.17 |
| (1,153) | 1:A:105:PRO:HG2 | 1:A:40:ARG:HB2 | 12 | 0.17 |
| (1,1513) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:60:ARG:HB2 | 15 | 0.17 |
| (1,1513) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:60:ARG:HB3 | 15 | 0.17 |
| (1,1513) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:60:ARG:HB2 | 15 | 0.17 |
| (1,1513) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:60:ARG:HB3 | 15 | 0.17 |
| (1,1513) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:60:ARG:HB2 | 15 | 0.17 |
| (1,1513) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:60:ARG:HB3 | 15 | 0.17 |
| (1,1513) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:90:LEU:HB2 | 15 | 0.17 |
| (1,1513) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:90:LEU:HB2 | 15 | 0.17 |
| (1,1513) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:90:LEU:HB2 | 15 | 0.17 |
| (1,1498) | 1:A:87:LEU:HD22 | 1:A:123:ILE:HG12 | 10 | 0.17 |
| (1,1498) | 1:A:87:LEU:HD21 | 1:A:123:ILE:HG12 | 10 | 0.17 |
| (1,1498) | 1:A:87:LEU:HD23 | 1:A:123:ILE:HG12 | 10 | 0.17 |
| (1,1498) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:130:ALA:HB2 | 10 | 0.17 |
| (1,1498) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:130:ALA:HB1 | 10 | 0.17 |
| (1,1498) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:130:ALA:HB3 | 10 | 0.17 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HB2 | 11 | 0.17 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HB2 | 11 | 0.17 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HB2 | 11 | 0.17 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:128:ARG:HB3 | 11 | 0.17 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:128:ARG:HB3 | 11 | 0.17 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:128:ARG:HB3 | 11 | 0.17 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HB2 | 15 | 0.17 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HB2 | 15 | 0.17 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HB2 | 15 | 0.17 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:128:ARG:HB3 | 15 | 0.17 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:128:ARG:HB3 | 15 | 0.17 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:128:ARG:HB3 | 15 | 0.17 |
| (1,1489) | 1:A:34:GLU:H | 1:A:33:GLY:HA2 | 17 | 0.17 |
| (1,1418) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:95:GLN:HB3 | 1 | 0.17 |
| (1,1418) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:95:GLN:HB3 | 2 | 0.17 |
| (1,1418) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:95:GLN:HB3 | 10 | 0.17 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1418) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:95:GLN:HB3 | 13 | 0.17 |
| (1,1402) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:72:ARG:H | 12 | 0.17 |
| (1,1402) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:72:ARG:H | 12 | 0.17 |
| (1,1402) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:72:ARG:H | 12 | 0.17 |
| (1,1238) | 1:A:116:THR:H | 1:A:113:VAL:H | 16 | 0.17 |
| (1,1198) | 1:A:95:GLN:H | 1:A:95:GLN:HB3 | 11 | 0.17 |
| (1,1198) | 1:A:95:GLN:H | 1:A:95:GLN:HB3 | 14 | 0.17 |
| (1,1180) | 1:A:45:LEU:H | 1:A:45:LEU:HB3 | 1 | 0.17 |
| (1,1134) | 1:A:98:VAL:H | 1:A:97:LEU:HG | 4 | 0.17 |
| (1,1060) | 1:A:44:ARG:HB3 | 1:A:44:ARG:H | 16 | 0.17 |
| (1,1054) | 1:A:47:ARG:HB2 | 1:A:47:ARG:H | 15 | 0.17 |
| (1,1047) | 1:A:83:SER:H | 1:A:82:VAL:HB | 13 | 0.17 |
| (1,970) | 1:A:76:VAL:H | 1:A:102:SER:HA | 2 | 0.16 |
| (1,920) | 1:A:128:ARG:H | 1:A:128:ARG:HB3 | 3 | 0.16 |
| (1,920) | 1:A:128:ARG:H | 1:A:128:ARG:HB3 | 15 | 0.16 |
| (1,920) | 1:A:128:ARG:H | 1:A:128:ARG:HB3 | 19 | 0.16 |
| (1,902) | 1:A:65:GLN:H | 1:A:84:SER:HB2 | 13 | 0.16 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:111:ALA:HB2 | 8 | 0.16 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:111:ALA:HB1 | 8 | 0.16 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:111:ALA:HB3 | 8 | 0.16 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE2 | 1:A:111:ALA:HB2 | 8 | 0.16 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE2 | 1:A:111:ALA:HB1 | 8 | 0.16 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE2 | 1:A:111:ALA:HB3 | 8 | 0.16 |
| (1,62) | 1:A:111:ALA:HB2 | 1:A:30:ALA:HB2 | 8 | 0.16 |
| (1,62) | 1:A:111:ALA:HB2 | 1:A:30:ALA:HB1 | 8 | 0.16 |
| (1,62) | 1:A:111:ALA:HB2 | 1:A:30:ALA:HB3 | 8 | 0.16 |
| (1,62) | 1:A:111:ALA:HB1 | 1:A:30:ALA:HB2 | 8 | 0.16 |
| (1,62) | 1:A:111:ALA:HB1 | 1:A:30:ALA:HB1 | 8 | 0.16 |
| (1,62) | 1:A:111:ALA:HB1 | 1:A:30:ALA:HB3 | 8 | 0.16 |
| (1,62) | 1:A:111:ALA:HB3 | 1:A:30:ALA:HB2 | 8 | 0.16 |
| (1,62) | 1:A:111:ALA:HB3 | 1:A:30:ALA:HB1 | 8 | 0.16 |
| (1,62) | 1:A:111:ALA:HB3 | 1:A:30:ALA:HB3 | 8 | 0.16 |
| (1,574) | 1:A:41:ILE:HA | 1:A:105:PRO:HD3 | 12 | 0.16 |
| (1,569) | 1:A:56:LEU:HA | 1:A:59:LYS:HG3 | 1 | 0.16 |
| (1,569) | 1:A:56:LEU:HA | 1:A:59:LYS:HG3 | 6 | 0.16 |
| (1,565) | 1:A:48:PHE:HA | 1:A:46:ASN:H | 14 | 0.16 |
| (1,493) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:118:GLU:HG2 | 4 | 0.16 |
| (1,493) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:118:GLU:HG3 | 4 | 0.16 |
| (1,493) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:118:GLU:HG2 | 4 | 0.16 |
| (1,493) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:118:GLU:HG3 | 4 | 0.16 |
| (1,493) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:118:GLU:HG2 | 4 | 0.16 |
| (1,493) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:118:GLU:HG3 | 4 | 0.16 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,49) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:45:LEU:HG | 2 | 0.16 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:104:LEU:HD12 | 2 | 0.16 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:104:LEU:HD11 | 2 | 0.16 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:104:LEU:HD13 | 2 | 0.16 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:104:LEU:HD12 | 2 | 0.16 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:104:LEU:HD11 | 2 | 0.16 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:104:LEU:HD13 | 2 | 0.16 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:104:LEU:HD12 | 2 | 0.16 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:104:LEU:HD11 | 2 | 0.16 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:104:LEU:HD13 | 2 | 0.16 |
| (1,449) | 1:A:119:LEU:HD22 | 1:A:37:TRP:HB3 | 7 | 0.16 |
| (1,449) | 1:A:119:LEU:HD21 | 1:A:37:TRP:HB3 | 7 | 0.16 |
| (1,449) | 1:A:119:LEU:HD23 | 1:A:37:TRP:HB3 | 7 | 0.16 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG12 | 1:A:67:ARG:HB2 | 6 | 0.16 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG12 | 1:A:67:ARG:HB3 | 6 | 0.16 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG11 | 1:A:67:ARG:HB2 | 6 | 0.16 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG11 | 1:A:67:ARG:HB3 | 6 | 0.16 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG13 | 1:A:67:ARG:HB2 | 6 | 0.16 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG13 | 1:A:67:ARG:HB3 | 6 | 0.16 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG12 | 1:A:67:ARG:HB2 | 11 | 0.16 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG12 | 1:A:67:ARG:HB3 | 11 | 0.16 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG11 | 1:A:67:ARG:HB2 | 11 | 0.16 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG11 | 1:A:67:ARG:HB3 | 11 | 0.16 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG13 | 1:A:67:ARG:HB2 | 11 | 0.16 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG13 | 1:A:67:ARG:HB3 | 11 | 0.16 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG12 | 1:A:67:ARG:HB2 | 12 | 0.16 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG12 | 1:A:67:ARG:HB3 | 12 | 0.16 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG11 | 1:A:67:ARG:HB2 | 12 | 0.16 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG11 | 1:A:67:ARG:HB3 | 12 | 0.16 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG13 | 1:A:67:ARG:HB2 | 12 | 0.16 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG13 | 1:A:67:ARG:HB3 | 12 | 0.16 |
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:74:GLY:HA3 | 10 | 0.16 |
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:74:GLY:HA3 | 10 | 0.16 |
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:74:GLY:HA3 | 10 | 0.16 |
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:74:GLY:HA3 | 17 | 0.16 |
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:74:GLY:HA3 | 17 | 0.16 |
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:74:GLY:HA3 | 17 | 0.16 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:87:LEU:HB2 | 20 | 0.16 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:87:LEU:HB2 | 20 | 0.16 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:87:LEU:HB2 | 20 | 0.16 |
| (1,214) | 1:A:90:LEU:HD22 | 1:A:95:GLN:HE21 | 15 | 0.16 |
| (1,214) | 1:A:90:LEU:HD21 | 1:A:95:GLN:HE21 | 15 | 0.16 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,214) | 1:A:90:LEU:HD23 | 1:A:95:GLN:HE21 | 15 | 0.16 |
| (1,2060) | 1:A:72:ARG:H | 1:A:70:LEU:HB3 | 15 | 0.16 |
| (1,2060) | 1:A:72:ARG:H | 1:A:104:LEU:HB2 | 15 | 0.16 |
| (1,2060) | 1:A:72:ARG:H | 1:A:117:VAL:HB | 15 | 0.16 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB2 | 2 | 0.16 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB1 | 2 | 0.16 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB3 | 2 | 0.16 |
| (1,2043) | 1:A:125:PHE:H | 1:A:123:ILE:HG12 | 2 | 0.16 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB2 | 6 | 0.16 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB1 | 6 | 0.16 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB3 | 6 | 0.16 |
| (1,2043) | 1:A:125:PHE:H | 1:A:123:ILE:HG12 | 6 | 0.16 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB2 | 13 | 0.16 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB1 | 13 | 0.16 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB3 | 13 | 0.16 |
| (1,2043) | 1:A:125:PHE:H | 1:A:123:ILE:HG12 | 13 | 0.16 |
| (1,1990) | 1:A:42:SER:H | 1:A:38:ARG:HB2 | 12 | 0.16 |
| (1,1990) | 1:A:42:SER:H | 1:A:40:ARG:HB3 | 12 | 0.16 |
| (1,1990) | 1:A:42:SER:H | 1:A:38:ARG:HB2 | 20 | 0.16 |
| (1,1990) | 1:A:42:SER:H | 1:A:40:ARG:HB3 | 20 | 0.16 |
| (1,1979) | 1:A:64:GLY:H | 1:A:94:ILE:HG22 | 8 | 0.16 |
| (1,1979) | 1:A:64:GLY:H | 1:A:94:ILE:HG21 | 8 | 0.16 |
| (1,1979) | 1:A:64:GLY:H | 1:A:94:ILE:HG23 | 8 | 0.16 |
| (1,1979) | 1:A:64:GLY:H | 1:A:94:ILE:HG12 | 8 | 0.16 |
| (1,1979) | 1:A:64:GLY:H | 1:A:94:ILE:HG13 | 8 | 0.16 |
| (1,1979) | 1:A:64:GLY:H | 1:A:66:VAL:HG22 | 8 | 0.16 |
| (1,1979) | 1:A:64:GLY:H | 1:A:66:VAL:HG21 | 8 | 0.16 |
| (1,1979) | 1:A:64:GLY:H | 1:A:66:VAL:HG23 | 8 | 0.16 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD12 | 15 | 0.16 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD11 | 15 | 0.16 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD13 | 15 | 0.16 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD22 | 15 | 0.16 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD21 | 15 | 0.16 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD23 | 15 | 0.16 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD12 | 15 | 0.16 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD11 | 15 | 0.16 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD13 | 15 | 0.16 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB2 | 1 | 0.16 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB1 | 1 | 0.16 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB3 | 1 | 0.16 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG22 | 1 | 0.16 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG21 | 1 | 0.16 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG23 | 1 | 0.16 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB2 | 5 | 0.16 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB1 | 5 | 0.16 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB3 | 5 | 0.16 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG22 | 5 | 0.16 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG21 | 5 | 0.16 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG23 | 5 | 0.16 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB2 | 9 | 0.16 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB1 | 9 | 0.16 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB3 | 9 | 0.16 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG22 | 9 | 0.16 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG21 | 9 | 0.16 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG23 | 9 | 0.16 |
| (1,1860) | 1:A:121:LEU:HG | 1:A:123:ILE:HD12 | 13 | 0.16 |
| (1,1860) | 1:A:121:LEU:HG | 1:A:123:ILE:HD11 | 13 | 0.16 |
| (1,1860) | 1:A:121:LEU:HG | 1:A:123:ILE:HD13 | 13 | 0.16 |
| (1,1860) | 1:A:121:LEU:HG | 1:A:45:LEU:HD12 | 13 | 0.16 |
| (1,1860) | 1:A:121:LEU:HG | 1:A:45:LEU:HD11 | 13 | 0.16 |
| (1,1860) | 1:A:121:LEU:HG | 1:A:45:LEU:HD13 | 13 | 0.16 |
| (1,1860) | 1:A:121:LEU:HG | 1:A:104:LEU:HD12 | 13 | 0.16 |
| (1,1860) | 1:A:121:LEU:HG | 1:A:104:LEU:HD11 | 13 | 0.16 |
| (1,1860) | 1:A:121:LEU:HG | 1:A:104:LEU:HD13 | 13 | 0.16 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD22 | 1:A:45:LEU:HB2 | 3 | 0.16 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD21 | 1:A:45:LEU:HB2 | 3 | 0.16 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD23 | 1:A:45:LEU:HB2 | 3 | 0.16 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD12 | 1:A:45:LEU:HB2 | 3 | 0.16 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD11 | 1:A:45:LEU:HB2 | 3 | 0.16 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD13 | 1:A:45:LEU:HB2 | 3 | 0.16 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD22 | 1:A:49:LYS:HB2 | 3 | 0.16 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD21 | 1:A:49:LYS:HB2 | 3 | 0.16 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD23 | 1:A:49:LYS:HB2 | 3 | 0.16 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD12 | 1:A:49:LYS:HB2 | 3 | 0.16 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD11 | 1:A:49:LYS:HB2 | 3 | 0.16 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD13 | 1:A:49:LYS:HB2 | 3 | 0.16 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:79:VAL:H | 6 | 0.16 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:79:VAL:H | 6 | 0.16 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:79:VAL:H | 6 | 0.16 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:124:ASP:H | 6 | 0.16 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:124:ASP:H | 6 | 0.16 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:124:ASP:H | 6 | 0.16 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:79:VAL:H | 11 | 0.16 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:79:VAL:H | 11 | 0.16 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:79:VAL:H | 11 | 0.16 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:124:ASP:H | 11 | 0.16 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:124:ASP:H | 11 | 0.16 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:124:ASP:H | 11 | 0.16 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:79:VAL:H | 17 | 0.16 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:79:VAL:H | 17 | 0.16 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:79:VAL:H | 17 | 0.16 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:124:ASP:H | 17 | 0.16 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:124:ASP:H | 17 | 0.16 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:124:ASP:H | 17 | 0.16 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD22 | 5 | 0.16 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD21 | 5 | 0.16 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD23 | 5 | 0.16 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD12 | 5 | 0.16 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD11 | 5 | 0.16 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD13 | 5 | 0.16 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD22 | 11 | 0.16 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD21 | 11 | 0.16 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD23 | 11 | 0.16 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD12 | 11 | 0.16 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD11 | 11 | 0.16 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD13 | 11 | 0.16 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD22 | 20 | 0.16 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD21 | 20 | 0.16 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD23 | 20 | 0.16 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD12 | 20 | 0.16 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD11 | 20 | 0.16 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD13 | 20 | 0.16 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:87:LEU:HD12 | 3 | 0.16 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:87:LEU:HD11 | 3 | 0.16 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:87:LEU:HD13 | 3 | 0.16 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:87:LEU:HD12 | 3 | 0.16 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:87:LEU:HD11 | 3 | 0.16 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:87:LEU:HD13 | 3 | 0.16 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:97:LEU:HD22 | 3 | 0.16 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:97:LEU:HD21 | 3 | 0.16 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:97:LEU:HD23 | 3 | 0.16 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:97:LEU:HD12 | 3 | 0.16 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:97:LEU:HD11 | 3 | 0.16 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:97:LEU:HD13 | 3 | 0.16 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:97:LEU:HD22 | 3 | 0.16 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:97:LEU:HD21 | 3 | 0.16 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:97:LEU:HD23 | 3 | 0.16 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:97:LEU:HD12 | 3 | 0.16 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:97:LEU:HD11 | 3 | 0.16 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:97:LEU:HD13 | 3 | 0.16 |
| (1,16) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:55:ALA:HA | 5 | 0.16 |
| (1,16) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:55:ALA:HA | 5 | 0.16 |
| (1,16) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:55:ALA:HA | 5 | 0.16 |
| (1,1565) | 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:59:LYS:HA | 7 | 0.16 |
| (1,1565) | 1:A:127:LEU:HD21 | 1:A:59:LYS:HA | 7 | 0.16 |
| (1,1565) | 1:A:127:LEU:HD23 | 1:A:59:LYS:HA | 7 | 0.16 |
| (1,1565) | 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:86:GLY:HA3 | 7 | 0.16 |
| (1,1565) | 1:A:127:LEU:HD21 | 1:A:86:GLY:HA3 | 7 | 0.16 |
| (1,1565) | 1:A:127:LEU:HD23 | 1:A:86:GLY:HA3 | 7 | 0.16 |
| (1,1565) | 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:59:LYS:HA | 19 | 0.16 |
| (1,1565) | 1:A:127:LEU:HD21 | 1:A:59:LYS:HA | 19 | 0.16 |
| (1,1565) | 1:A:127:LEU:HD23 | 1:A:59:LYS:HA | 19 | 0.16 |
| (1,1565) | 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:86:GLY:HA3 | 19 | 0.16 |
| (1,1565) | 1:A:127:LEU:HD21 | 1:A:86:GLY:HA3 | 19 | 0.16 |
| (1,1565) | 1:A:127:LEU:HD23 | 1:A:86:GLY:HA3 | 19 | 0.16 |
| (1,155) | 1:A:41:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD12 | 10 | 0.16 |
| (1,155) | 1:A:41:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD11 | 10 | 0.16 |
| (1,155) | 1:A:41:ILE:HD12 | 1:A:121:LEU:HD13 | 10 | 0.16 |
| (1,155) | 1:A:41:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD12 | 10 | 0.16 |
| (1,155) | 1:A:41:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD11 | 10 | 0.16 |
| (1,155) | 1:A:41:ILE:HD11 | 1:A:121:LEU:HD13 | 10 | 0.16 |
| (1,155) | 1:A:41:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD12 | 10 | 0.16 |
| (1,155) | 1:A:41:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD11 | 10 | 0.16 |
| (1,155) | 1:A:41:ILE:HD13 | 1:A:121:LEU:HD13 | 10 | 0.16 |
| (1,153) | 1:A:105:PRO:HG2 | 1:A:40:ARG:HB2 | 8 | 0.16 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG22 | 16 | 0.16 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG21 | 16 | 0.16 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG23 | 16 | 0.16 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG22 | 16 | 0.16 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG21 | 16 | 0.16 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG23 | 16 | 0.16 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG22 | 16 | 0.16 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG21 | 16 | 0.16 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG23 | 16 | 0.16 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD22 | 16 | 0.16 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD21 | 16 | 0.16 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD23 | 16 | 0.16 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD22 | 16 | 0.16 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD21 | 16 | 0.16 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD23 | 16 | 0.16 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD22 | 16 | 0.16 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD21 | 16 | 0.16 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD23 | 16 | 0.16 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:73:GLN:HA | 6 | 0.16 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:73:GLN:HA | 6 | 0.16 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:73:GLN:HA | 6 | 0.16 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:77:LEU:HA | 6 | 0.16 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:77:LEU:HA | 6 | 0.16 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:77:LEU:HA | 6 | 0.16 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:73:GLN:HA | 19 | 0.16 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:73:GLN:HA | 19 | 0.16 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:73:GLN:HA | 19 | 0.16 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:77:LEU:HA | 19 | 0.16 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:77:LEU:HA | 19 | 0.16 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:77:LEU:HA | 19 | 0.16 |
| (1,146) | 1:A:45:LEU:HD12 | 1:A:41:ILE:HG22 | 20 | 0.16 |
| (1,146) | 1:A:45:LEU:HD12 | 1:A:41:ILE:HG21 | 20 | 0.16 |
| (1,146) | 1:A:45:LEU:HD12 | 1:A:41:ILE:HG23 | 20 | 0.16 |
| (1,146) | 1:A:45:LEU:HD11 | 1:A:41:ILE:HG22 | 20 | 0.16 |
| (1,146) | 1:A:45:LEU:HD11 | 1:A:41:ILE:HG21 | 20 | 0.16 |
| (1,146) | 1:A:45:LEU:HD11 | 1:A:41:ILE:HG23 | 20 | 0.16 |
| (1,146) | 1:A:45:LEU:HD13 | 1:A:41:ILE:HG22 | 20 | 0.16 |
| (1,146) | 1:A:45:LEU:HD13 | 1:A:41:ILE:HG21 | 20 | 0.16 |
| (1,146) | 1:A:45:LEU:HD13 | 1:A:41:ILE:HG23 | 20 | 0.16 |
| (1,1418) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:95:GLN:HB3 | 20 | 0.16 |
| (1,132) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:81:LEU:HG | 7 | 0.16 |
| (1,132) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:81:LEU:HG | 7 | 0.16 |
| (1,132) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:81:LEU:HG | 7 | 0.16 |
| (1,132) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:81:LEU:HG | 12 | 0.16 |
| (1,132) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:81:LEU:HG | 12 | 0.16 |
| (1,132) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:81:LEU:HG | 12 | 0.16 |
| (1,1238) | 1:A:116:THR:H | 1:A:113:VAL:H | 8 | 0.16 |
| (1,1238) | 1:A:116:THR:H | 1:A:113:VAL:H | 20 | 0.16 |
| (1,1180) | 1:A:45:LEU:H | 1:A:45:LEU:HB3 | 9 | 0.16 |
| (1,1134) | 1:A:98:VAL:H | 1:A:97:LEU:HG | 12 | 0.16 |
| (1,1054) | 1:A:47:ARG:HB2 | 1:A:47:ARG:H | 18 | 0.16 |
| (1,977) | 1:A:40:ARG:H | 1:A:38:ARG:H | 6 | 0.15 |
| (1,977) | 1:A:40:ARG:H | 1:A:38:ARG:H | 16 | 0.15 |
| (1,970) | 1:A:76:VAL:H | 1:A:102:SER:HA | 14 | 0.15 |
| (1,920) | 1:A:128:ARG:H | 1:A:128:ARG:HB3 | 14 | 0.15 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,818) | 1:A:104:LEU:H | 1:A:74:GLY:HA3 | 13 | 0.15 |
| (1,816) | 1:A:104:LEU:H | 1:A:74:GLY:HA2 | 16 | 0.15 |
| (1,781) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HD22 | 7 | 0.15 |
| (1,781) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HD21 | 7 | 0.15 |
| (1,781) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HD23 | 7 | 0.15 |
| (1,781) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HD12 | 7 | 0.15 |
| (1,781) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HD11 | 7 | 0.15 |
| (1,781) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HD13 | 7 | 0.15 |
| (1,781) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HD22 | 17 | 0.15 |
| (1,781) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HD21 | 17 | 0.15 |
| (1,781) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HD23 | 17 | 0.15 |
| (1,781) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HD12 | 17 | 0.15 |
| (1,781) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HD11 | 17 | 0.15 |
| (1,781) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HD13 | 17 | 0.15 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:111:ALA:HB2 | 5 | 0.15 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:111:ALA:HB1 | 5 | 0.15 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:111:ALA:HB3 | 5 | 0.15 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE2 | 1:A:111:ALA:HB2 | 5 | 0.15 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE2 | 1:A:111:ALA:HB1 | 5 | 0.15 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE2 | 1:A:111:ALA:HB3 | 5 | 0.15 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:111:ALA:HB2 | 16 | 0.15 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:111:ALA:HB1 | 16 | 0.15 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:111:ALA:HB3 | 16 | 0.15 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE2 | 1:A:111:ALA:HB2 | 16 | 0.15 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE2 | 1:A:111:ALA:HB1 | 16 | 0.15 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE2 | 1:A:111:ALA:HB3 | 16 | 0.15 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:111:ALA:HB2 | 17 | 0.15 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:111:ALA:HB1 | 17 | 0.15 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:111:ALA:HB3 | 17 | 0.15 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE2 | 1:A:111:ALA:HB2 | 17 | 0.15 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE2 | 1:A:111:ALA:HB1 | 17 | 0.15 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE2 | 1:A:111:ALA:HB3 | 17 | 0.15 |
| (1,7) | 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:61:GLN:HB3 | 8 | 0.15 |
| (1,7) | 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:61:GLN:HB3 | 8 | 0.15 |
| (1,7) | 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:61:GLN:HB3 | 8 | 0.15 |
| (1,672) | 1:A:41:ILE:HA | 1:A:44:ARG:HD2 | 8 | 0.15 |
| (1,672) | 1:A:41:ILE:HA | 1:A:44:ARG:HD3 | 8 | 0.15 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD22 | 6 | 0.15 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD21 | 6 | 0.15 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD23 | 6 | 0.15 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD12 | 6 | 0.15 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD11 | 6 | 0.15 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD13 | 6 | 0.15 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD22 | 6 | 0.15 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD21 | 6 | 0.15 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD23 | 6 | 0.15 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD12 | 6 | 0.15 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD11 | 6 | 0.15 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD13 | 6 | 0.15 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD22 | 6 | 0.15 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD21 | 6 | 0.15 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD23 | 6 | 0.15 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD12 | 6 | 0.15 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD11 | 6 | 0.15 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD13 | 6 | 0.15 |
| (1,632) | 1:A:97:LEU:HD22 | 1:A:45:LEU:HD22 | 10 | 0.15 |
| (1,574) | 1:A:41:ILE:HA | 1:A:105:PRO:HD3 | 1 | 0.15 |
| (1,569) | 1:A:56:LEU:HA | 1:A:59:LYS:HG3 | 10 | 0.15 |
| (1,565) | 1:A:48:PHE:HA | 1:A:46:ASN:H | 1 | 0.15 |
| (1,535) | 1:A:108:PRO:HA | 1:A:110:ASP:HA | 15 | 0.15 |
| (1,486) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:119:LEU:HG | 6 | 0.15 |
| (1,486) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:119:LEU:HG | 6 | 0.15 |
| (1,486) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:119:LEU:HG | 6 | 0.15 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:104:LEU:HD12 | 11 | 0.15 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:104:LEU:HD11 | 11 | 0.15 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:104:LEU:HD13 | 11 | 0.15 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:104:LEU:HD12 | 11 | 0.15 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:104:LEU:HD11 | 11 | 0.15 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:104:LEU:HD13 | 11 | 0.15 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:104:LEU:HD12 | 11 | 0.15 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:104:LEU:HD11 | 11 | 0.15 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:104:LEU:HD13 | 11 | 0.15 |
| (1,463) | 1:A:50:ARG:HD3 | 1:A:45:LEU:HB2 | 2 | 0.15 |
| (1,422) | 1:A:66:VAL:HG12 | 1:A:98:VAL:HG12 | 8 | 0.15 |
| (1,422) | 1:A:66:VAL:HG12 | 1:A:98:VAL:HG11 | 8 | 0.15 |
| (1,422) | 1:A:66:VAL:HG12 | 1:A:98:VAL:HG13 | 8 | 0.15 |
| (1,422) | 1:A:66:VAL:HG11 | 1:A:98:VAL:HG12 | 8 | 0.15 |
| (1,422) | 1:A:66:VAL:HG11 | 1:A:98:VAL:HG11 | 8 | 0.15 |
| (1,422) | 1:A:66:VAL:HG11 | 1:A:98:VAL:HG13 | 8 | 0.15 |
| (1,422) | 1:A:66:VAL:HG13 | 1:A:98:VAL:HG12 | 8 | 0.15 |
| (1,422) | 1:A:66:VAL:HG13 | 1:A:98:VAL:HG11 | 8 | 0.15 |
| (1,422) | 1:A:66:VAL:HG13 | 1:A:98:VAL:HG13 | 8 | 0.15 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG12 | 1:A:67:ARG:HB2 | 4 | 0.15 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG12 | 1:A:67:ARG:HB3 | 4 | 0.15 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG11 | 1:A:67:ARG:HB2 | 4 | 0.15 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG11 | 1:A:67:ARG:HB3 | 4 | 0.15 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG13 | 1:A:67:ARG:HB2 | 4 | 0.15 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG13 | 1:A:67:ARG:HB3 | 4 | 0.15 |
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:74:GLY:HA3 | 8 | 0.15 |
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:74:GLY:HA3 | 8 | 0.15 |
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:74:GLY:HA3 | 8 | 0.15 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:87:LEU:HB2 | 7 | 0.15 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:87:LEU:HB2 | 7 | 0.15 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:87:LEU:HB2 | 7 | 0.15 |
| (1,225) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:119:LEU:HG | 10 | 0.15 |
| (1,225) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:119:LEU:HG | 10 | 0.15 |
| (1,225) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:119:LEU:HG | 10 | 0.15 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB2 | 11 | 0.15 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB1 | 11 | 0.15 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB3 | 11 | 0.15 |
| (1,2043) | 1:A:125:PHE:H | 1:A:123:ILE:HG12 | 11 | 0.15 |
| (1,2037) | 1:A:117:VAL:H | 1:A:68:PHE:HD1 | 11 | 0.15 |
| (1,2037) | 1:A:117:VAL:H | 1:A:68:PHE:HD2 | 11 | 0.15 |
| (1,2037) | 1:A:117:VAL:H | 1:A:114:ASN:HD21 | 11 | 0.15 |
| (1,2037) | 1:A:117:VAL:H | 1:A:68:PHE:HD1 | 20 | 0.15 |
| (1,2037) | 1:A:117:VAL:H | 1:A:68:PHE:HD2 | 20 | 0.15 |
| (1,2037) | 1:A:117:VAL:H | 1:A:114:ASN:HD21 | 20 | 0.15 |
| (1,1990) | 1:A:42:SER:H | 1:A:38:ARG:HB2 | 7 | 0.15 |
| (1,1990) | 1:A:42:SER:H | 1:A:40:ARG:HB3 | 7 | 0.15 |
| (1,1990) | 1:A:42:SER:H | 1:A:38:ARG:HB2 | 15 | 0.15 |
| (1,1990) | 1:A:42:SER:H | 1:A:40:ARG:HB3 | 15 | 0.15 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB2 | 4 | 0.15 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB1 | 4 | 0.15 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB3 | 4 | 0.15 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG22 | 4 | 0.15 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG21 | 4 | 0.15 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG23 | 4 | 0.15 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB2 | 8 | 0.15 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB1 | 8 | 0.15 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB3 | 8 | 0.15 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG22 | 8 | 0.15 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG21 | 8 | 0.15 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG23 | 8 | 0.15 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD22 | 1:A:45:LEU:HB2 | 7 | 0.15 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD21 | 1:A:45:LEU:HB2 | 7 | 0.15 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD23 | 1:A:45:LEU:HB2 | 7 | 0.15 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD12 | 1:A:45:LEU:HB2 | 7 | 0.15 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD11 | 1:A:45:LEU:HB2 | 7 | 0.15 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD13 | 1:A:45:LEU:HB2 | 7 | 0.15 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD22 | 1:A:49:LYS:HB2 | 7 | 0.15 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD21 | 1:A:49:LYS:HB2 | 7 | 0.15 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD23 | 1:A:49:LYS:HB2 | 7 | 0.15 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD12 | 1:A:49:LYS:HB2 | 7 | 0.15 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD11 | 1:A:49:LYS:HB2 | 7 | 0.15 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD13 | 1:A:49:LYS:HB2 | 7 | 0.15 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:79:VAL:H | 13 | 0.15 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:79:VAL:H | 13 | 0.15 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:79:VAL:H | 13 | 0.15 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:124:ASP:H | 13 | 0.15 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:124:ASP:H | 13 | 0.15 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:124:ASP:H | 13 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD22 | 1 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD21 | 1 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD23 | 1 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD22 | 1 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD21 | 1 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD23 | 1 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD22 | 1 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD21 | 1 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD23 | 1 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD12 | 1 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD11 | 1 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD13 | 1 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD12 | 1 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD11 | 1 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD13 | 1 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD12 | 1 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD11 | 1 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD13 | 1 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD22 | 4 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD21 | 4 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD23 | 4 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD22 | 4 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD21 | 4 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD23 | 4 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD22 | 4 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD21 | 4 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD23 | 4 | 0.15 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD12 | 4 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD11 | 4 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD13 | 4 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD12 | 4 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD11 | 4 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD13 | 4 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD12 | 4 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD11 | 4 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD13 | 4 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD22 | 12 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD21 | 12 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD23 | 12 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD22 | 12 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD21 | 12 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD23 | 12 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD22 | 12 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD21 | 12 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD23 | 12 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD12 | 12 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD11 | 12 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD13 | 12 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD12 | 12 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD11 | 12 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD13 | 12 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD12 | 12 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD11 | 12 | 0.15 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD13 | 12 | 0.15 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD22 | 3 | 0.15 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD21 | 3 | 0.15 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD23 | 3 | 0.15 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD12 | 3 | 0.15 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD11 | 3 | 0.15 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD13 | 3 | 0.15 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD22 | 17 | 0.15 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD21 | 17 | 0.15 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD23 | 17 | 0.15 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD12 | 17 | 0.15 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD11 | 17 | 0.15 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD13 | 17 | 0.15 |
| (1,17) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:53:LYS:HA | 1 | 0.15 |
| (1,17) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:53:LYS:HA | 1 | 0.15 |
| (1,17) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:53:LYS:HA | 1 | 0.15 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1690) | 1:A:50:ARG:HD2 | 1:A:38:ARG:HA | 13 | 0.15 |
| (1,1690) | 1:A:50:ARG:HD2 | 1:A:51:TYR:HA | 13 | 0.15 |
| (1,1690) | 1:A:50:ARG:HD2 | 1:A:101:ALA:HA | 13 | 0.15 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:53:LYS:HE2 | 17 | 0.15 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:60:ARG:HD2 | 17 | 0.15 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:60:ARG:HD3 | 17 | 0.15 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:92:ARG:HD2 | 17 | 0.15 |
| (1,1674) | 1:A:97:LEU:HA | 1:A:53:LYS:HE2 | 17 | 0.15 |
| (1,1674) | 1:A:97:LEU:HA | 1:A:60:ARG:HD2 | 17 | 0.15 |
| (1,1674) | 1:A:97:LEU:HA | 1:A:60:ARG:HD3 | 17 | 0.15 |
| (1,1590) | 1:A:99:LYS:HE2 | 1:A:66:VAL:HG22 | 7 | 0.15 |
| (1,1590) | 1:A:99:LYS:HE2 | 1:A:66:VAL:HG21 | 7 | 0.15 |
| (1,1590) | 1:A:99:LYS:HE2 | 1:A:66:VAL:HG23 | 7 | 0.15 |
| (1,1590) | 1:A:99:LYS:HE3 | 1:A:66:VAL:HG22 | 7 | 0.15 |
| (1,1590) | 1:A:99:LYS:HE3 | 1:A:66:VAL:HG21 | 7 | 0.15 |
| (1,1590) | 1:A:99:LYS:HE3 | 1:A:66:VAL:HG23 | 7 | 0.15 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:95:GLN:HB2 | 1 | 0.15 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:95:GLN:HB2 | 1 | 0.15 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:95:GLN:HB2 | 1 | 0.15 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:95:GLN:HG2 | 1 | 0.15 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:95:GLN:HG2 | 1 | 0.15 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:95:GLN:HG2 | 1 | 0.15 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:95:GLN:HB2 | 6 | 0.15 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:95:GLN:HB2 | 6 | 0.15 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:95:GLN:HB2 | 6 | 0.15 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:95:GLN:HG2 | 6 | 0.15 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:95:GLN:HG2 | 6 | 0.15 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:95:GLN:HG2 | 6 | 0.15 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:95:GLN:HB2 | 16 | 0.15 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:95:GLN:HB2 | 16 | 0.15 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:95:GLN:HB2 | 16 | 0.15 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:95:GLN:HG2 | 16 | 0.15 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:95:GLN:HG2 | 16 | 0.15 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:95:GLN:HG2 | 16 | 0.15 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:95:GLN:HB2 | 17 | 0.15 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:95:GLN:HB2 | 17 | 0.15 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:95:GLN:HB2 | 17 | 0.15 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:95:GLN:HG2 | 17 | 0.15 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:95:GLN:HG2 | 17 | 0.15 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:95:GLN:HG2 | 17 | 0.15 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG22 | 2 | 0.15 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG21 | 2 | 0.15 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG23 | 2 | 0.15 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG22 | 2 | 0.15 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG21 | 2 | 0.15 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG23 | 2 | 0.15 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG22 | 2 | 0.15 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG21 | 2 | 0.15 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG23 | 2 | 0.15 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD22 | 2 | 0.15 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD21 | 2 | 0.15 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD23 | 2 | 0.15 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD22 | 2 | 0.15 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD21 | 2 | 0.15 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD23 | 2 | 0.15 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD22 | 2 | 0.15 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD21 | 2 | 0.15 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD23 | 2 | 0.15 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG22 | 6 | 0.15 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG21 | 6 | 0.15 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG23 | 6 | 0.15 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG22 | 6 | 0.15 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG21 | 6 | 0.15 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG23 | 6 | 0.15 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG22 | 6 | 0.15 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG21 | 6 | 0.15 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG23 | 6 | 0.15 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD22 | 6 | 0.15 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD21 | 6 | 0.15 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD23 | 6 | 0.15 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD22 | 6 | 0.15 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD21 | 6 | 0.15 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD23 | 6 | 0.15 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD22 | 6 | 0.15 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD21 | 6 | 0.15 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD23 | 6 | 0.15 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:73:GLN:HA | 2 | 0.15 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:73:GLN:HA | 2 | 0.15 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:73:GLN:HA | 2 | 0.15 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:77:LEU:HA | 2 | 0.15 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:77:LEU:HA | 2 | 0.15 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:77:LEU:HA | 2 | 0.15 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HB2 | 20 | 0.15 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HB2 | 20 | 0.15 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HB2 | 20 | 0.15 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:128:ARG:HB3 | 20 | 0.15 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:128:ARG:HB3 | 20 | 0.15 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:128:ARG:HB3 | 20 | 0.15 |
| (1,1466) | 1:A:25:ARG:H | 1:A:23:GLN:HA | 11 | 0.15 |
| (1,1464) | 1:A:25:ARG:H | 1:A:23:GLN:HB2 | 13 | 0.15 |
| (1,1459) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:20:ALA:HA | 9 | 0.15 |
| (1,1238) | 1:A:116:THR:H | 1:A:113:VAL:H | 12 | 0.15 |
| (1,1172) | 1:A:125:PHE:HB2 | 1:A:62:GLY:H | 2 | 0.15 |
| (1,1172) | 1:A:125:PHE:HB2 | 1:A:62:GLY:H | 8 | 0.15 |
| (1,1134) | 1:A:98:VAL:H | 1:A:97:LEU:HG | 19 | 0.15 |
| (1,1054) | 1:A:47:ARG:HB2 | 1:A:47:ARG:H | 7 | 0.15 |
| (1,1054) | 1:A:47:ARG:HB2 | 1:A:47:ARG:H | 17 | 0.15 |
| (2,18) | 1:A:93:GLU:O | 1:A:97:LEU:H | 17 | 0.14 |
| (1,970) | 1:A:76:VAL:H | 1:A:102:SER:HA | 10 | 0.14 |
| (1,970) | 1:A:76:VAL:H | 1:A:102:SER:HA | 11 | 0.14 |
| (1,949) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:45:LEU:HG | 1 | 0.14 |
| (1,949) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:45:LEU:HG | 12 | 0.14 |
| (1,920) | 1:A:128:ARG:H | 1:A:128:ARG:HB3 | 1 | 0.14 |
| (1,920) | 1:A:128:ARG:H | 1:A:128:ARG:HB3 | 5 | 0.14 |
| (1,920) | 1:A:128:ARG:H | 1:A:128:ARG:HB3 | 6 | 0.14 |
| (1,863) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:93:GLU:HB3 | 8 | 0.14 |
| (1,863) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:93:GLU:HB3 | 18 | 0.14 |
| (1,781) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HD22 | 11 | 0.14 |
| (1,781) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HD21 | 11 | 0.14 |
| (1,781) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HD23 | 11 | 0.14 |
| (1,781) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HD12 | 11 | 0.14 |
| (1,781) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HD11 | 11 | 0.14 |
| (1,781) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HD13 | 11 | 0.14 |
| (1,729) | 1:A:37:TRP:HH2 | 1:A:37:TRP:HB2 | 5 | 0.14 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:111:ALA:HB2 | 2 | 0.14 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:111:ALA:HB1 | 2 | 0.14 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:111:ALA:HB3 | 2 | 0.14 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE2 | 1:A:111:ALA:HB2 | 2 | 0.14 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE2 | 1:A:111:ALA:HB1 | 2 | 0.14 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE2 | 1:A:111:ALA:HB3 | 2 | 0.14 |
| (1,672) | 1:A:41:ILE:HA | 1:A:44:ARG:HD2 | 15 | 0.14 |
| (1,672) | 1:A:41:ILE:HA | 1:A:44:ARG:HD3 | 15 | 0.14 |
| (1,672) | 1:A:41:ILE:HA | 1:A:44:ARG:HD2 | 19 | 0.14 |
| (1,672) | 1:A:41:ILE:HA | 1:A:44:ARG:HD3 | 19 | 0.14 |
| (1,669) | 1:A:92:ARG:HD2 | 1:A:90:LEU:HA | 17 | 0.14 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD22 | 18 | 0.14 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD21 | 18 | 0.14 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD23 | 18 | 0.14 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD12 | 18 | 0.14 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD11 | 18 | 0.14 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD13 | 18 | 0.14 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD22 | 18 | 0.14 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD21 | 18 | 0.14 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD23 | 18 | 0.14 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD12 | 18 | 0.14 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD11 | 18 | 0.14 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD13 | 18 | 0.14 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD22 | 18 | 0.14 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD21 | 18 | 0.14 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD23 | 18 | 0.14 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD12 | 18 | 0.14 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD11 | 18 | 0.14 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD13 | 18 | 0.14 |
| (1,632) | 1:A:97:LEU:HD22 | 1:A:45:LEU:HD22 | 1 | 0.14 |
| (1,632) | 1:A:97:LEU:HD22 | 1:A:45:LEU:HD22 | 18 | 0.14 |
| (1,623) | 1:A:99:LYS:HE3 | 1:A:95:GLN:HB2 | 7 | 0.14 |
| (1,574) | 1:A:41:ILE:HA | 1:A:105:PRO:HD3 | 10 | 0.14 |
| (1,565) | 1:A:48:PHE:HA | 1:A:46:ASN:H | 9 | 0.14 |
| (1,535) | 1:A:108:PRO:HA | 1:A:110:ASP:HA | 5 | 0.14 |
| (1,515) | 1:A:132:PHE:HB3 | 1:A:127:LEU:HD22 | 10 | 0.14 |
| (1,515) | 1:A:132:PHE:HB3 | 1:A:127:LEU:HD21 | 10 | 0.14 |
| (1,515) | 1:A:132:PHE:HB3 | 1:A:127:LEU:HD23 | 10 | 0.14 |
| (1,493) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:118:GLU:HG2 | 3 | 0.14 |
| (1,493) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:118:GLU:HG3 | 3 | 0.14 |
| (1,493) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:118:GLU:HG2 | 3 | 0.14 |
| (1,493) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:118:GLU:HG3 | 3 | 0.14 |
| (1,493) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:118:GLU:HG2 | 3 | 0.14 |
| (1,493) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:118:GLU:HG3 | 3 | 0.14 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:104:LEU:HD12 | 8 | 0.14 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:104:LEU:HD11 | 8 | 0.14 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:104:LEU:HD13 | 8 | 0.14 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:104:LEU:HD12 | 8 | 0.14 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:104:LEU:HD11 | 8 | 0.14 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:104:LEU:HD13 | 8 | 0.14 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:104:LEU:HD12 | 8 | 0.14 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:104:LEU:HD11 | 8 | 0.14 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:104:LEU:HD13 | 8 | 0.14 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:104:LEU:HD12 | 14 | 0.14 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:104:LEU:HD11 | 14 | 0.14 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:104:LEU:HD13 | 14 | 0.14 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:104:LEU:HD12 | 14 | 0.14 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:104:LEU:HD11 | 14 | 0.14 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:104:LEU:HD13 | 14 | 0.14 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:104:LEU:HD12 | 14 | 0.14 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:104:LEU:HD11 | 14 | 0.14 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:104:LEU:HD13 | 14 | 0.14 |
| (1,459) | 1:A:69:THR:HG21 | 1:A:108:PRO:HG3 | 18 | 0.14 |
| (1,459) | 1:A:69:THR:HG22 | 1:A:108:PRO:HG3 | 18 | 0.14 |
| (1,459) | 1:A:69:THR:HG23 | 1:A:108:PRO:HG3 | 18 | 0.14 |
| (1,459) | 1:A:69:THR:HG21 | 1:A:108:PRO:HG3 | 19 | 0.14 |
| (1,459) | 1:A:69:THR:HG22 | 1:A:108:PRO:HG3 | 19 | 0.14 |
| (1,459) | 1:A:69:THR:HG23 | 1:A:108:PRO:HG3 | 19 | 0.14 |
| (1,422) | 1:A:66:VAL:HG12 | 1:A:98:VAL:HG12 | 7 | 0.14 |
| (1,422) | 1:A:66:VAL:HG12 | 1:A:98:VAL:HG11 | 7 | 0.14 |
| (1,422) | 1:A:66:VAL:HG12 | 1:A:98:VAL:HG13 | 7 | 0.14 |
| (1,422) | 1:A:66:VAL:HG11 | 1:A:98:VAL:HG12 | 7 | 0.14 |
| (1,422) | 1:A:66:VAL:HG11 | 1:A:98:VAL:HG11 | 7 | 0.14 |
| (1,422) | 1:A:66:VAL:HG11 | 1:A:98:VAL:HG13 | 7 | 0.14 |
| (1,422) | 1:A:66:VAL:HG13 | 1:A:98:VAL:HG12 | 7 | 0.14 |
| (1,422) | 1:A:66:VAL:HG13 | 1:A:98:VAL:HG11 | 7 | 0.14 |
| (1,422) | 1:A:66:VAL:HG13 | 1:A:98:VAL:HG13 | 7 | 0.14 |
| (1,417) | 1:A:66:VAL:HG12 | 1:A:95:GLN:HG2 | 9 | 0.14 |
| (1,417) | 1:A:66:VAL:HG11 | 1:A:95:GLN:HG2 | 9 | 0.14 |
| (1,417) | 1:A:66:VAL:HG13 | 1:A:95:GLN:HG2 | 9 | 0.14 |
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:74:GLY:HA3 | 1 | 0.14 |
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:74:GLY:HA3 | 1 | 0.14 |
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:74:GLY:HA3 | 1 | 0.14 |
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:74:GLY:HA3 | 5 | 0.14 |
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:74:GLY:HA3 | 5 | 0.14 |
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:74:GLY:HA3 | 5 | 0.14 |
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:74:GLY:HA3 | 6 | 0.14 |
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:74:GLY:HA3 | 6 | 0.14 |
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:74:GLY:HA3 | 6 | 0.14 |
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:74:GLY:HA3 | 11 | 0.14 |
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:74:GLY:HA3 | 11 | 0.14 |
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:74:GLY:HA3 | 11 | 0.14 |
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:74:GLY:HA3 | 14 | 0.14 |
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:74:GLY:HA3 | 14 | 0.14 |
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:74:GLY:HA3 | 14 | 0.14 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:87:LEU:HB2 | 16 | 0.14 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:87:LEU:HB2 | 16 | 0.14 |
| (1,23) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:87:LEU:HB2 | 16 | 0.14 |
| (1,225) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:119:LEU:HG | 13 | 0.14 |
| (1,225) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:119:LEU:HG | 13 | 0.14 |
| (1,225) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:119:LEU:HG | 13 | 0.14 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB2 | 12 | 0.14 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB1 | 12 | 0.14 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB3 | 12 | 0.14 |
| (1,2043) | 1:A:125:PHE:H | 1:A:123:ILE:HG12 | 12 | 0.14 |
| (1,2020) | 1:A:49:LYS:H | 1:A:49:LYS:HD2 | 1 | 0.14 |
| (1,2020) | 1:A:49:LYS:H | 1:A:49:LYS:HD3 | 1 | 0.14 |
| (1,2020) | 1:A:49:LYS:H | 1:A:50:ARG:HB2 | 1 | 0.14 |
| (1,2020) | 1:A:49:LYS:H | 1:A:50:ARG:HB3 | 1 | 0.14 |
| (1,2009) | 1:A:83:SER:H | 1:A:67:ARG:HG2 | 2 | 0.14 |
| (1,2009) | 1:A:83:SER:H | 1:A:67:ARG:HG3 | 2 | 0.14 |
| (1,2009) | 1:A:83:SER:H | 1:A:123:ILE:HG12 | 2 | 0.14 |
| (1,2009) | 1:A:114:ASN:HD22 | 1:A:30:ALA:HB2 | 2 | 0.14 |
| (1,2009) | 1:A:114:ASN:HD22 | 1:A:30:ALA:HB1 | 2 | 0.14 |
| (1,2009) | 1:A:114:ASN:HD22 | 1:A:30:ALA:HB3 | 2 | 0.14 |
| (1,2009) | 1:A:114:ASN:HD22 | 1:A:109:ALA:HB2 | 2 | 0.14 |
| (1,2009) | 1:A:114:ASN:HD22 | 1:A:109:ALA:HB1 | 2 | 0.14 |
| (1,2009) | 1:A:114:ASN:HD22 | 1:A:109:ALA:HB3 | 2 | 0.14 |
| (1,1997) | 1:A:57:ARG:H | 1:A:53:LYS:HG2 | 5 | 0.14 |
| (1,1997) | 1:A:57:ARG:H | 1:A:53:LYS:HG3 | 5 | 0.14 |
| (1,1997) | 1:A:57:ARG:H | 1:A:56:LEU:HG | 5 | 0.14 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD12 | 13 | 0.14 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD11 | 13 | 0.14 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD13 | 13 | 0.14 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD22 | 13 | 0.14 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD21 | 13 | 0.14 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD23 | 13 | 0.14 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD12 | 13 | 0.14 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD11 | 13 | 0.14 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD13 | 13 | 0.14 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD22 | 15 | 0.14 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD21 | 15 | 0.14 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD23 | 15 | 0.14 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD22 | 15 | 0.14 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD21 | 15 | 0.14 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD23 | 15 | 0.14 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD22 | 15 | 0.14 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD21 | 15 | 0.14 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD23 | 15 | 0.14 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD12 | 15 | 0.14 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD11 | 15 | 0.14 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD13 | 15 | 0.14 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD12 | 15 | 0.14 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD11 | 15 | 0.14 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD13 | 15 | 0.14 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD12 | 15 | 0.14 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD11 | 15 | 0.14 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD13 | 15 | 0.14 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD22 | 16 | 0.14 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD21 | 16 | 0.14 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD23 | 16 | 0.14 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD22 | 16 | 0.14 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD21 | 16 | 0.14 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD23 | 16 | 0.14 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD22 | 16 | 0.14 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD21 | 16 | 0.14 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD23 | 16 | 0.14 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD12 | 16 | 0.14 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD11 | 16 | 0.14 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD13 | 16 | 0.14 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD12 | 16 | 0.14 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD11 | 16 | 0.14 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD13 | 16 | 0.14 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD12 | 16 | 0.14 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD11 | 16 | 0.14 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD13 | 16 | 0.14 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD22 | 6 | 0.14 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD21 | 6 | 0.14 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD23 | 6 | 0.14 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD12 | 6 | 0.14 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD11 | 6 | 0.14 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD13 | 6 | 0.14 |
| (1,17) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:53:LYS:HA | 14 | 0.14 |
| (1,17) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:53:LYS:HA | 14 | 0.14 |
| (1,17) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:53:LYS:HA | 14 | 0.14 |
| (1,1630) | 1:A:98:VAL:HG22 | 1:A:50:ARG:HG2 | 15 | 0.14 |
| (1,1630) | 1:A:98:VAL:HG22 | 1:A:50:ARG:HG3 | 15 | 0.14 |
| (1,1630) | 1:A:98:VAL:HG21 | 1:A:50:ARG:HG2 | 15 | 0.14 |
| (1,1630) | 1:A:98:VAL:HG21 | 1:A:50:ARG:HG3 | 15 | 0.14 |
| (1,1630) | 1:A:98:VAL:HG23 | 1:A:50:ARG:HG2 | 15 | 0.14 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1630) | 1:A:98:VAL:HG23 | 1:A:50:ARG:HG3 | 15 | 0.14 |
| (1,1630) | 1:A:98:VAL:HG22 | 1:A:53:LYS:HG2 | 15 | 0.14 |
| (1,1630) | 1:A:98:VAL:HG22 | 1:A:53:LYS:HG3 | 15 | 0.14 |
| (1,1630) | 1:A:98:VAL:HG21 | 1:A:53:LYS:HG2 | 15 | 0.14 |
| (1,1630) | 1:A:98:VAL:HG21 | 1:A:53:LYS:HG3 | 15 | 0.14 |
| (1,1630) | 1:A:98:VAL:HG23 | 1:A:53:LYS:HG2 | 15 | 0.14 |
| (1,1630) | 1:A:98:VAL:HG23 | 1:A:53:LYS:HG3 | 15 | 0.14 |
| (1,163) | 1:A:53:LYS:HE3 | 1:A:97:LEU:HD22 | 15 | 0.14 |
| (1,163) | 1:A:53:LYS:HE3 | 1:A:97:LEU:HD21 | 15 | 0.14 |
| (1,163) | 1:A:53:LYS:HE3 | 1:A:97:LEU:HD23 | 15 | 0.14 |
| (1,163) | 1:A:53:LYS:HE3 | 1:A:97:LEU:HD12 | 15 | 0.14 |
| (1,163) | 1:A:53:LYS:HE3 | 1:A:97:LEU:HD11 | 15 | 0.14 |
| (1,163) | 1:A:53:LYS:HE3 | 1:A:97:LEU:HD13 | 15 | 0.14 |
| (1,1600) | 1:A:59:LYS:HB2 | 1:A:60:ARG:H | 2 | 0.14 |
| (1,1600) | 1:A:59:LYS:HB3 | 1:A:60:ARG:H | 2 | 0.14 |
| (1,1600) | 1:A:72:ARG:HB2 | 1:A:72:ARG:H | 2 | 0.14 |
| (1,1600) | 1:A:72:ARG:HB3 | 1:A:72:ARG:H | 2 | 0.14 |
| (1,1590) | 1:A:99:LYS:HE2 | 1:A:66:VAL:HG22 | 8 | 0.14 |
| (1,1590) | 1:A:99:LYS:HE2 | 1:A:66:VAL:HG21 | 8 | 0.14 |
| (1,1590) | 1:A:99:LYS:HE2 | 1:A:66:VAL:HG23 | 8 | 0.14 |
| (1,1590) | 1:A:99:LYS:HE3 | 1:A:66:VAL:HG22 | 8 | 0.14 |
| (1,1590) | 1:A:99:LYS:HE3 | 1:A:66:VAL:HG21 | 8 | 0.14 |
| (1,1590) | 1:A:99:LYS:HE3 | 1:A:66:VAL:HG23 | 8 | 0.14 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:95:GLN:HB2 | 18 | 0.14 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:95:GLN:HB2 | 18 | 0.14 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:95:GLN:HB2 | 18 | 0.14 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:95:GLN:HG2 | 18 | 0.14 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:95:GLN:HG2 | 18 | 0.14 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:95:GLN:HG2 | 18 | 0.14 |
| (1,153) | 1:A:105:PRO:HG2 | 1:A:40:ARG:HB2 | 6 | 0.14 |
| (1,153) | 1:A:105:PRO:HG2 | 1:A:40:ARG:HB2 | 17 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG22 | 7 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG21 | 7 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG23 | 7 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG22 | 7 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG21 | 7 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG23 | 7 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG22 | 7 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG21 | 7 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG23 | 7 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD22 | 7 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD21 | 7 | 0.14 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD23 | 7 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD22 | 7 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD21 | 7 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD23 | 7 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD22 | 7 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD21 | 7 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD23 | 7 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG22 | 15 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG21 | 15 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG23 | 15 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG22 | 15 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG21 | 15 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG23 | 15 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG22 | 15 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG21 | 15 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG23 | 15 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD22 | 15 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD21 | 15 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD23 | 15 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD22 | 15 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD21 | 15 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD23 | 15 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD22 | 15 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD21 | 15 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD23 | 15 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG22 | 18 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG21 | 18 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG23 | 18 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG22 | 18 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG21 | 18 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG23 | 18 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG22 | 18 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG21 | 18 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG23 | 18 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD22 | 18 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD21 | 18 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD23 | 18 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD22 | 18 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD21 | 18 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD23 | 18 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD22 | 18 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD21 | 18 | 0.14 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD23 | 18 | 0.14 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:73:GLN:HA | 1 | 0.14 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:73:GLN:HA | 1 | 0.14 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:73:GLN:HA | 1 | 0.14 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:77:LEU:HA | 1 | 0.14 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:77:LEU:HA | 1 | 0.14 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:77:LEU:HA | 1 | 0.14 |
| (1,1501) | 1:A:119:LEU:HD12 | 1:A:121:LEU:HD22 | 10 | 0.14 |
| (1,1501) | 1:A:119:LEU:HD12 | 1:A:121:LEU:HD21 | 10 | 0.14 |
| (1,1501) | 1:A:119:LEU:HD12 | 1:A:121:LEU:HD23 | 10 | 0.14 |
| (1,1501) | 1:A:119:LEU:HD11 | 1:A:121:LEU:HD22 | 10 | 0.14 |
| (1,1501) | 1:A:119:LEU:HD11 | 1:A:121:LEU:HD21 | 10 | 0.14 |
| (1,1501) | 1:A:119:LEU:HD11 | 1:A:121:LEU:HD23 | 10 | 0.14 |
| (1,1501) | 1:A:119:LEU:HD13 | 1:A:121:LEU:HD22 | 10 | 0.14 |
| (1,1501) | 1:A:119:LEU:HD13 | 1:A:121:LEU:HD21 | 10 | 0.14 |
| (1,1501) | 1:A:119:LEU:HD13 | 1:A:121:LEU:HD23 | 10 | 0.14 |
| (1,1501) | 1:A:119:LEU:HD12 | 1:A:121:LEU:HD12 | 10 | 0.14 |
| (1,1501) | 1:A:119:LEU:HD12 | 1:A:121:LEU:HD11 | 10 | 0.14 |
| (1,1501) | 1:A:119:LEU:HD12 | 1:A:121:LEU:HD13 | 10 | 0.14 |
| (1,1501) | 1:A:119:LEU:HD11 | 1:A:121:LEU:HD12 | 10 | 0.14 |
| (1,1501) | 1:A:119:LEU:HD11 | 1:A:121:LEU:HD11 | 10 | 0.14 |
| (1,1501) | 1:A:119:LEU:HD11 | 1:A:121:LEU:HD13 | 10 | 0.14 |
| (1,1501) | 1:A:119:LEU:HD13 | 1:A:121:LEU:HD12 | 10 | 0.14 |
| (1,1501) | 1:A:119:LEU:HD13 | 1:A:121:LEU:HD11 | 10 | 0.14 |
| (1,1501) | 1:A:119:LEU:HD13 | 1:A:121:LEU:HD13 | 10 | 0.14 |
| (1,1459) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:20:ALA:HA | 18 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:81:LEU:HG | 2 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:81:LEU:HG | 2 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:81:LEU:HG | 2 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:81:LEU:HG | 3 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:81:LEU:HG | 3 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:81:LEU:HG | 3 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:81:LEU:HG | 4 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:81:LEU:HG | 4 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:81:LEU:HG | 4 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:81:LEU:HG | 9 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:81:LEU:HG | 9 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:81:LEU:HG | 9 | 0.14 |
| (1,1250) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:92:ARG:HD3 | 3 | 0.14 |
| (1,1238) | 1:A:116:THR:H | 1:A:113:VAL:H | 15 | 0.14 |
| (1,1233) | 1:A:106:THR:H | 1:A:105:PRO:HG3 | 6 | 0.14 |
| (1,1172) | 1:A:125:PHE:HB2 | 1:A:62:GLY:H | 5 | 0.14 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1134) | 1:A:98:VAL:H | 1:A:97:LEU:HG | 20 | 0.14 |
| (1,1054) | 1:A:47:ARG:HB2 | 1:A:47:ARG:H | 10 | 0.14 |
| (1,999) | 1:A:73:GLN:H | 1:A:73:GLN:HG3 | 5 | 0.13 |
| (1,999) | 1:A:73:GLN:H | 1:A:73:GLN:HG3 | 6 | 0.13 |
| (1,999) | 1:A:73:GLN:H | 1:A:73:GLN:HG3 | 17 | 0.13 |
| (1,981) | 1:A:40:ARG:H | 1:A:40:ARG:HG2 | 11 | 0.13 |
| (1,981) | 1:A:40:ARG:H | 1:A:40:ARG:HG3 | 11 | 0.13 |
| (1,977) | 1:A:40:ARG:H | 1:A:38:ARG:H | 12 | 0.13 |
| (1,977) | 1:A:40:ARG:H | 1:A:38:ARG:H | 18 | 0.13 |
| (1,970) | 1:A:76:VAL:H | 1:A:102:SER:HA | 6 | 0.13 |
| (1,970) | 1:A:76:VAL:H | 1:A:102:SER:HA | 19 | 0.13 |
| (1,949) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:45:LEU:HG | 15 | 0.13 |
| (1,949) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:45:LEU:HG | 17 | 0.13 |
| (1,781) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HD22 | 14 | 0.13 |
| (1,781) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HD21 | 14 | 0.13 |
| (1,781) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HD23 | 14 | 0.13 |
| (1,781) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HD12 | 14 | 0.13 |
| (1,781) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HD11 | 14 | 0.13 |
| (1,781) | 1:A:97:LEU:H | 1:A:97:LEU:HD13 | 14 | 0.13 |
| (1,718) | 1:A:51:TYR:HE1 | 1:A:51:TYR:H | 2 | 0.13 |
| (1,718) | 1:A:51:TYR:HE2 | 1:A:51:TYR:H | 2 | 0.13 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:111:ALA:HB2 | 7 | 0.13 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:111:ALA:HB1 | 7 | 0.13 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:111:ALA:HB3 | 7 | 0.13 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE2 | 1:A:111:ALA:HB2 | 7 | 0.13 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE2 | 1:A:111:ALA:HB1 | 7 | 0.13 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE2 | 1:A:111:ALA:HB3 | 7 | 0.13 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:111:ALA:HB2 | 20 | 0.13 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:111:ALA:HB1 | 20 | 0.13 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:111:ALA:HB3 | 20 | 0.13 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE2 | 1:A:111:ALA:HB2 | 20 | 0.13 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE2 | 1:A:111:ALA:HB1 | 20 | 0.13 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE2 | 1:A:111:ALA:HB3 | 20 | 0.13 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD22 | 7 | 0.13 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD21 | 7 | 0.13 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD23 | 7 | 0.13 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD12 | 7 | 0.13 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD11 | 7 | 0.13 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD13 | 7 | 0.13 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD22 | 7 | 0.13 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD21 | 7 | 0.13 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD23 | 7 | 0.13 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD12 | 7 | 0.13 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD11 | 7 | 0.13 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD13 | 7 | 0.13 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD22 | 7 | 0.13 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD21 | 7 | 0.13 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD23 | 7 | 0.13 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD12 | 7 | 0.13 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD11 | 7 | 0.13 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD13 | 7 | 0.13 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD22 | 15 | 0.13 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD21 | 15 | 0.13 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD23 | 15 | 0.13 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD12 | 15 | 0.13 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD11 | 15 | 0.13 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD13 | 15 | 0.13 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD22 | 15 | 0.13 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD21 | 15 | 0.13 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD23 | 15 | 0.13 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD12 | 15 | 0.13 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD11 | 15 | 0.13 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD13 | 15 | 0.13 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD22 | 15 | 0.13 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD21 | 15 | 0.13 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD23 | 15 | 0.13 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD12 | 15 | 0.13 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD11 | 15 | 0.13 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD13 | 15 | 0.13 |
| (1,645) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:127:LEU:HD22 | 8 | 0.13 |
| (1,645) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:127:LEU:HD21 | 8 | 0.13 |
| (1,645) | 1:A:90:LEU:HD12 | 1:A:127:LEU:HD23 | 8 | 0.13 |
| (1,645) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:127:LEU:HD22 | 8 | 0.13 |
| (1,645) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:127:LEU:HD21 | 8 | 0.13 |
| (1,645) | 1:A:90:LEU:HD11 | 1:A:127:LEU:HD23 | 8 | 0.13 |
| (1,645) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:127:LEU:HD22 | 8 | 0.13 |
| (1,645) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:127:LEU:HD21 | 8 | 0.13 |
| (1,645) | 1:A:90:LEU:HD13 | 1:A:127:LEU:HD23 | 8 | 0.13 |
| (1,632) | 1:A:97:LEU:HD22 | 1:A:45:LEU:HD22 | 3 | 0.13 |
| (1,632) | 1:A:97:LEU:HD22 | 1:A:45:LEU:HD22 | 6 | 0.13 |
| (1,574) | 1:A:41:ILE:HA | 1:A:105:PRO:HD3 | 5 | 0.13 |
| (1,574) | 1:A:41:ILE:HA | 1:A:105:PRO:HD3 | 20 | 0.13 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:104:LEU:HD12 | 4 | 0.13 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:104:LEU:HD11 | 4 | 0.13 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:104:LEU:HD13 | 4 | 0.13 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:104:LEU:HD12 | 4 | 0.13 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:104:LEU:HD11 | 4 | 0.13 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:104:LEU:HD13 | 4 | 0.13 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:104:LEU:HD12 | 4 | 0.13 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:104:LEU:HD11 | 4 | 0.13 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:104:LEU:HD13 | 4 | 0.13 |
| (1,417) | 1:A:66:VAL:HG12 | 1:A:95:GLN:HG2 | 19 | 0.13 |
| (1,417) | 1:A:66:VAL:HG11 | 1:A:95:GLN:HG2 | 19 | 0.13 |
| (1,417) | 1:A:66:VAL:HG13 | 1:A:95:GLN:HG2 | 19 | 0.13 |
| (1,273) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:100:ARG:HD2 | 5 | 0.13 |
| (1,273) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:100:ARG:HD3 | 5 | 0.13 |
| (1,273) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:100:ARG:HD2 | 5 | 0.13 |
| (1,273) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:100:ARG:HD3 | 5 | 0.13 |
| (1,273) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:100:ARG:HD2 | 5 | 0.13 |
| (1,273) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:100:ARG:HD3 | 5 | 0.13 |
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:74:GLY:HA3 | 20 | 0.13 |
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:74:GLY:HA3 | 20 | 0.13 |
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:74:GLY:HA3 | 20 | 0.13 |
| (1,225) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:119:LEU:HG | 2 | 0.13 |
| (1,225) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:119:LEU:HG | 2 | 0.13 |
| (1,225) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:119:LEU:HG | 2 | 0.13 |
| (1,225) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:119:LEU:HG | 8 | 0.13 |
| (1,225) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:119:LEU:HG | 8 | 0.13 |
| (1,225) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:119:LEU:HG | 8 | 0.13 |
| (1,225) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:119:LEU:HG | 14 | 0.13 |
| (1,225) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:119:LEU:HG | 14 | 0.13 |
| (1,225) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:119:LEU:HG | 14 | 0.13 |
| (1,225) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:119:LEU:HG | 19 | 0.13 |
| (1,225) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:119:LEU:HG | 19 | 0.13 |
| (1,225) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:119:LEU:HG | 19 | 0.13 |
| (1,2094) | 1:A:43:GLY:H | 1:A:40:ARG:HD2 | 3 | 0.13 |
| (1,2094) | 1:A:43:GLY:H | 1:A:105:PRO:HD3 | 3 | 0.13 |
| (1,2094) | 1:A:43:GLY:H | 1:A:40:ARG:HD2 | 7 | 0.13 |
| (1,2094) | 1:A:43:GLY:H | 1:A:105:PRO:HD3 | 7 | 0.13 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB2 | 16 | 0.13 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB1 | 16 | 0.13 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB3 | 16 | 0.13 |
| (1,2043) | 1:A:125:PHE:H | 1:A:123:ILE:HG12 | 16 | 0.13 |
| (1,2037) | 1:A:117:VAL:H | 1:A:68:PHE:HD1 | 3 | 0.13 |
| (1,2037) | 1:A:117:VAL:H | 1:A:68:PHE:HD2 | 3 | 0.13 |
| (1,2037) | 1:A:117:VAL:H | 1:A:114:ASN:HD21 | 3 | 0.13 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1990) | 1:A:42:SER:H | 1:A:38:ARG:HB2 | 6 | 0.13 |
| (1,1990) | 1:A:42:SER:H | 1:A:40:ARG:HB3 | 6 | 0.13 |
| (1,1990) | 1:A:42:SER:H | 1:A:38:ARG:HB2 | 10 | 0.13 |
| (1,1990) | 1:A:42:SER:H | 1:A:40:ARG:HB3 | 10 | 0.13 |
| (1,1979) | 1:A:64:GLY:H | 1:A:94:ILE:HG22 | 15 | 0.13 |
| (1,1979) | 1:A:64:GLY:H | 1:A:94:ILE:HG21 | 15 | 0.13 |
| (1,1979) | 1:A:64:GLY:H | 1:A:94:ILE:HG23 | 15 | 0.13 |
| (1,1979) | 1:A:64:GLY:H | 1:A:94:ILE:HG12 | 15 | 0.13 |
| (1,1979) | 1:A:64:GLY:H | 1:A:94:ILE:HG13 | 15 | 0.13 |
| (1,1979) | 1:A:64:GLY:H | 1:A:66:VAL:HG22 | 15 | 0.13 |
| (1,1979) | 1:A:64:GLY:H | 1:A:66:VAL:HG21 | 15 | 0.13 |
| (1,1979) | 1:A:64:GLY:H | 1:A:66:VAL:HG23 | 15 | 0.13 |
| (1,195) | 1:A:45:LEU:HD22 | 1:A:101:ALA:HB2 | 18 | 0.13 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB2 | 11 | 0.13 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB1 | 11 | 0.13 |
| (1,1906) | 1:A:47:ARG:HG2 | 1:A:101:ALA:HB3 | 11 | 0.13 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG22 | 11 | 0.13 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG21 | 11 | 0.13 |
| (1,1906) | 1:A:57:ARG:HG2 | 1:A:94:ILE:HG23 | 11 | 0.13 |
| (1,1863) | 1:A:108:PRO:HB3 | 1:A:105:PRO:HD2 | 18 | 0.13 |
| (1,1863) | 1:A:106:THR:HA | 1:A:108:PRO:HB3 | 18 | 0.13 |
| (1,1816) | 1:A:83:SER:HB2 | 1:A:67:ARG:HG2 | 6 | 0.13 |
| (1,1816) | 1:A:83:SER:HB2 | 1:A:67:ARG:HG3 | 6 | 0.13 |
| (1,1816) | 1:A:83:SER:HB2 | 1:A:99:LYS:HG3 | 6 | 0.13 |
| (1,1816) | 1:A:83:SER:HB2 | 1:A:121:LEU:HG | 6 | 0.13 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD22 | 11 | 0.13 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD21 | 11 | 0.13 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD23 | 11 | 0.13 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD22 | 11 | 0.13 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD21 | 11 | 0.13 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD23 | 11 | 0.13 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD22 | 11 | 0.13 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD21 | 11 | 0.13 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD23 | 11 | 0.13 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD12 | 11 | 0.13 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD11 | 11 | 0.13 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD13 | 11 | 0.13 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD12 | 11 | 0.13 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD11 | 11 | 0.13 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD13 | 11 | 0.13 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD12 | 11 | 0.13 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD11 | 11 | 0.13 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD13 | 11 | 0.13 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD22 | 12 | 0.13 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD21 | 12 | 0.13 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD23 | 12 | 0.13 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD12 | 12 | 0.13 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD11 | 12 | 0.13 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD13 | 12 | 0.13 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD22 | 13 | 0.13 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD21 | 13 | 0.13 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD23 | 13 | 0.13 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD12 | 13 | 0.13 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD11 | 13 | 0.13 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD13 | 13 | 0.13 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD22 | 16 | 0.13 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD21 | 16 | 0.13 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD23 | 16 | 0.13 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD12 | 16 | 0.13 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD11 | 16 | 0.13 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD13 | 16 | 0.13 |
| (1,17) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:53:LYS:HA | 11 | 0.13 |
| (1,17) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:53:LYS:HA | 11 | 0.13 |
| (1,17) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:53:LYS:HA | 11 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:87:LEU:HD12 | 13 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:87:LEU:HD11 | 13 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:87:LEU:HD13 | 13 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:87:LEU:HD12 | 13 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:87:LEU:HD11 | 13 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:87:LEU:HD13 | 13 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:97:LEU:HD22 | 13 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:97:LEU:HD21 | 13 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:97:LEU:HD23 | 13 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:97:LEU:HD12 | 13 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:97:LEU:HD11 | 13 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:97:LEU:HD13 | 13 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:97:LEU:HD22 | 13 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:97:LEU:HD21 | 13 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:97:LEU:HD23 | 13 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:97:LEU:HD12 | 13 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:97:LEU:HD11 | 13 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:97:LEU:HD13 | 13 | 0.13 |
| (1,1600) | 1:A:59:LYS:HB2 | 1:A:60:ARG:H | 3 | 0.13 |
| (1,1600) | 1:A:59:LYS:HB3 | 1:A:60:ARG:H | 3 | 0.13 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1600) | 1:A:72:ARG:HB2 | 1:A:72:ARG:H | 3 | 0.13 |
| (1,1600) | 1:A:72:ARG:HB3 | 1:A:72:ARG:H | 3 | 0.13 |
| (1,1600) | 1:A:59:LYS:HB2 | 1:A:60:ARG:H | 8 | 0.13 |
| (1,1600) | 1:A:59:LYS:HB3 | 1:A:60:ARG:H | 8 | 0.13 |
| (1,1600) | 1:A:72:ARG:HB2 | 1:A:72:ARG:H | 8 | 0.13 |
| (1,1600) | 1:A:72:ARG:HB3 | 1:A:72:ARG:H | 8 | 0.13 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:95:GLN:HB2 | 3 | 0.13 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:95:GLN:HB2 | 3 | 0.13 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:95:GLN:HB2 | 3 | 0.13 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:95:GLN:HG2 | 3 | 0.13 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:95:GLN:HG2 | 3 | 0.13 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:95:GLN:HG2 | 3 | 0.13 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:95:GLN:HB2 | 9 | 0.13 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:95:GLN:HB2 | 9 | 0.13 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:95:GLN:HB2 | 9 | 0.13 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:95:GLN:HG2 | 9 | 0.13 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:95:GLN:HG2 | 9 | 0.13 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:95:GLN:HG2 | 9 | 0.13 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:95:GLN:HB2 | 15 | 0.13 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:95:GLN:HB2 | 15 | 0.13 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:95:GLN:HB2 | 15 | 0.13 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:95:GLN:HG2 | 15 | 0.13 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:95:GLN:HG2 | 15 | 0.13 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:95:GLN:HG2 | 15 | 0.13 |
| (1,1573) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:67:ARG:HD2 | 4 | 0.13 |
| (1,1573) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:67:ARG:HD3 | 4 | 0.13 |
| (1,1573) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:67:ARG:HD2 | 4 | 0.13 |
| (1,1573) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:67:ARG:HD3 | 4 | 0.13 |
| (1,1573) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:67:ARG:HD2 | 4 | 0.13 |
| (1,1573) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:67:ARG:HD3 | 4 | 0.13 |
| (1,1573) | 1:A:119:LEU:HD12 | 1:A:67:ARG:HD2 | 4 | 0.13 |
| (1,1573) | 1:A:119:LEU:HD12 | 1:A:67:ARG:HD3 | 4 | 0.13 |
| (1,1573) | 1:A:119:LEU:HD11 | 1:A:67:ARG:HD2 | 4 | 0.13 |
| (1,1573) | 1:A:119:LEU:HD11 | 1:A:67:ARG:HD3 | 4 | 0.13 |
| (1,1573) | 1:A:119:LEU:HD13 | 1:A:67:ARG:HD2 | 4 | 0.13 |
| (1,1573) | 1:A:119:LEU:HD13 | 1:A:67:ARG:HD3 | 4 | 0.13 |
| (1,1573) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:67:ARG:HD2 | 12 | 0.13 |
| (1,1573) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:67:ARG:HD3 | 12 | 0.13 |
| (1,1573) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:67:ARG:HD2 | 12 | 0.13 |
| (1,1573) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:67:ARG:HD3 | 12 | 0.13 |
| (1,1573) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:67:ARG:HD2 | 12 | 0.13 |
| (1,1573) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:67:ARG:HD3 | 12 | 0.13 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1573) | 1:A:119:LEU:HD12 | 1:A:67:ARG:HD2 | 12 | 0.13 |
| (1,1573) | 1:A:119:LEU:HD12 | 1:A:67:ARG:HD3 | 12 | 0.13 |
| (1,1573) | 1:A:119:LEU:HD11 | 1:A:67:ARG:HD2 | 12 | 0.13 |
| (1,1573) | 1:A:119:LEU:HD11 | 1:A:67:ARG:HD3 | 12 | 0.13 |
| (1,1573) | 1:A:119:LEU:HD13 | 1:A:67:ARG:HD2 | 12 | 0.13 |
| (1,1573) | 1:A:119:LEU:HD13 | 1:A:67:ARG:HD3 | 12 | 0.13 |
| (1,1565) | 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:59:LYS:HA | 18 | 0.13 |
| (1,1565) | 1:A:127:LEU:HD21 | 1:A:59:LYS:HA | 18 | 0.13 |
| (1,1565) | 1:A:127:LEU:HD23 | 1:A:59:LYS:HA | 18 | 0.13 |
| (1,1565) | 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:86:GLY:HA3 | 18 | 0.13 |
| (1,1565) | 1:A:127:LEU:HD21 | 1:A:86:GLY:HA3 | 18 | 0.13 |
| (1,1565) | 1:A:127:LEU:HD23 | 1:A:86:GLY:HA3 | 18 | 0.13 |
| (1,1550) | 1:A:45:LEU:HD12 | 1:A:50:ARG:HG2 | 11 | 0.13 |
| (1,1550) | 1:A:45:LEU:HD12 | 1:A:50:ARG:HG3 | 11 | 0.13 |
| (1,1550) | 1:A:45:LEU:HD11 | 1:A:50:ARG:HG2 | 11 | 0.13 |
| (1,1550) | 1:A:45:LEU:HD11 | 1:A:50:ARG:HG3 | 11 | 0.13 |
| (1,1550) | 1:A:45:LEU:HD13 | 1:A:50:ARG:HG2 | 11 | 0.13 |
| (1,1550) | 1:A:45:LEU:HD13 | 1:A:50:ARG:HG3 | 11 | 0.13 |
| (1,1550) | 1:A:45:LEU:HD12 | 1:A:103:PRO:HB3 | 11 | 0.13 |
| (1,1550) | 1:A:45:LEU:HD11 | 1:A:103:PRO:HB3 | 11 | 0.13 |
| (1,1550) | 1:A:45:LEU:HD13 | 1:A:103:PRO:HB3 | 11 | 0.13 |
| (1,153) | 1:A:105:PRO:HG2 | 1:A:40:ARG:HB2 | 2 | 0.13 |
| (1,153) | 1:A:105:PRO:HG2 | 1:A:40:ARG:HB2 | 15 | 0.13 |
| (1,153) | 1:A:105:PRO:HG2 | 1:A:40:ARG:HB2 | 19 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG22 | 3 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG21 | 3 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG23 | 3 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG22 | 3 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG21 | 3 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG23 | 3 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG22 | 3 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG21 | 3 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG23 | 3 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD22 | 3 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD21 | 3 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD23 | 3 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD22 | 3 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD21 | 3 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD23 | 3 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD22 | 3 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD21 | 3 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD23 | 3 | 0.13 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG22 | 5 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG21 | 5 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG23 | 5 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG22 | 5 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG21 | 5 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG23 | 5 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG22 | 5 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG21 | 5 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG23 | 5 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD22 | 5 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD21 | 5 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD23 | 5 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD22 | 5 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD21 | 5 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD23 | 5 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD22 | 5 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD21 | 5 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD23 | 5 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG22 | 17 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG21 | 17 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG23 | 17 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG22 | 17 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG21 | 17 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG23 | 17 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG22 | 17 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG21 | 17 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG23 | 17 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD22 | 17 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD21 | 17 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD23 | 17 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD22 | 17 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD21 | 17 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD23 | 17 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD22 | 17 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD21 | 17 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD23 | 17 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG22 | 19 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG21 | 19 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG23 | 19 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG22 | 19 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG21 | 19 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG23 | 19 | 0.13 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG22 | 19 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG21 | 19 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG23 | 19 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD22 | 19 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD21 | 19 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD23 | 19 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD22 | 19 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD21 | 19 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD23 | 19 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD22 | 19 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD21 | 19 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD23 | 19 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG22 | 20 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG21 | 20 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG23 | 20 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG22 | 20 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG21 | 20 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG23 | 20 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG22 | 20 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG21 | 20 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG23 | 20 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD22 | 20 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD21 | 20 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD23 | 20 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD22 | 20 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD21 | 20 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD23 | 20 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD22 | 20 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD21 | 20 | 0.13 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD23 | 20 | 0.13 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:73:GLN:HA | 11 | 0.13 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:73:GLN:HA | 11 | 0.13 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:73:GLN:HA | 11 | 0.13 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:77:LEU:HA | 11 | 0.13 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:77:LEU:HA | 11 | 0.13 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:77:LEU:HA | 11 | 0.13 |
| (1,1498) | 1:A:87:LEU:HD22 | 1:A:123:ILE:HG12 | 14 | 0.13 |
| (1,1498) | 1:A:87:LEU:HD21 | 1:A:123:ILE:HG12 | 14 | 0.13 |
| (1,1498) | 1:A:87:LEU:HD23 | 1:A:123:ILE:HG12 | 14 | 0.13 |
| (1,1498) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:130:ALA:HB2 | 14 | 0.13 |
| (1,1498) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:130:ALA:HB1 | 14 | 0.13 |
| (1,1498) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:130:ALA:HB3 | 14 | 0.13 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HB2 | 1 | 0.13 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HB2 | 1 | 0.13 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HB2 | 1 | 0.13 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:128:ARG:HB3 | 1 | 0.13 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:128:ARG:HB3 | 1 | 0.13 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:128:ARG:HB3 | 1 | 0.13 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HB2 | 19 | 0.13 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HB2 | 19 | 0.13 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HB2 | 19 | 0.13 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:128:ARG:HB3 | 19 | 0.13 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:128:ARG:HB3 | 19 | 0.13 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:128:ARG:HB3 | 19 | 0.13 |
| (1,1471) | 1:A:27:THR:H | 1:A:27:THR:HG21 | 17 | 0.13 |
| (1,146) | 1:A:45:LEU:HD12 | 1:A:41:ILE:HG22 | 8 | 0.13 |
| (1,146) | 1:A:45:LEU:HD12 | 1:A:41:ILE:HG21 | 8 | 0.13 |
| (1,146) | 1:A:45:LEU:HD12 | 1:A:41:ILE:HG23 | 8 | 0.13 |
| (1,146) | 1:A:45:LEU:HD11 | 1:A:41:ILE:HG22 | 8 | 0.13 |
| (1,146) | 1:A:45:LEU:HD11 | 1:A:41:ILE:HG21 | 8 | 0.13 |
| (1,146) | 1:A:45:LEU:HD11 | 1:A:41:ILE:HG23 | 8 | 0.13 |
| (1,146) | 1:A:45:LEU:HD13 | 1:A:41:ILE:HG22 | 8 | 0.13 |
| (1,146) | 1:A:45:LEU:HD13 | 1:A:41:ILE:HG21 | 8 | 0.13 |
| (1,146) | 1:A:45:LEU:HD13 | 1:A:41:ILE:HG23 | 8 | 0.13 |
| (1,132) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:81:LEU:HG | 14 | 0.13 |
| (1,132) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:81:LEU:HG | 14 | 0.13 |
| (1,132) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:81:LEU:HG | 14 | 0.13 |
| (1,1260) | 1:A:65:GLN:H | 1:A:123:ILE:HG12 | 19 | 0.13 |
| (1,126) | 1:A:51:TYR:HB3 | 1:A:53:LYS:HE2 | 20 | 0.13 |
| (1,1239) | 1:A:127:LEU:H | 1:A:61:GLN:HB2 | 11 | 0.13 |
| (1,1180) | 1:A:45:LEU:H | 1:A:45:LEU:HB3 | 12 | 0.13 |
| (1,1172) | 1:A:125:PHE:HB2 | 1:A:62:GLY:H | 7 | 0.13 |
| (1,1172) | 1:A:125:PHE:HB2 | 1:A:62:GLY:H | 14 | 0.13 |
| (1,1172) | 1:A:125:PHE:HB2 | 1:A:62:GLY:H | 20 | 0.13 |
| (1,1054) | 1:A:47:ARG:HB2 | 1:A:47:ARG:H | 19 | 0.13 |
| (2,14) | 1:A:43:GLY:O | 1:A:47:ARG:H | 13 | 0.12 |
| (2,10) | 1:A:39:SER:O | 1:A:43:GLY:H | 13 | 0.12 |
| (1,977) | 1:A:40:ARG:H | 1:A:38:ARG:H | 5 | 0.12 |
| (1,977) | 1:A:40:ARG:H | 1:A:38:ARG:H | 20 | 0.12 |
| (1,970) | 1:A:76:VAL:H | 1:A:102:SER:HA | 1 | 0.12 |
| (1,970) | 1:A:76:VAL:H | 1:A:102:SER:HA | 4 | 0.12 |
| (1,970) | 1:A:76:VAL:H | 1:A:102:SER:HA | 5 | 0.12 |
| (1,970) | 1:A:76:VAL:H | 1:A:102:SER:HA | 20 | 0.12 |
| (1,949) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:45:LEU:HG | 11 | 0.12 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,949) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:45:LEU:HG | 13 | 0.12 |
| (1,949) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:45:LEU:HG | 20 | 0.12 |
| (1,920) | 1:A:128:ARG:H | 1:A:128:ARG:HB3 | 10 | 0.12 |
| (1,718) | 1:A:51:TYR:HE1 | 1:A:51:TYR:H | 13 | 0.12 |
| (1,718) | 1:A:51:TYR:HE2 | 1:A:51:TYR:H | 13 | 0.12 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:111:ALA:HB2 | 13 | 0.12 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:111:ALA:HB1 | 13 | 0.12 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:111:ALA:HB3 | 13 | 0.12 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE2 | 1:A:111:ALA:HB2 | 13 | 0.12 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE2 | 1:A:111:ALA:HB1 | 13 | 0.12 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE2 | 1:A:111:ALA:HB3 | 13 | 0.12 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:111:ALA:HB2 | 15 | 0.12 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:111:ALA:HB1 | 15 | 0.12 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:111:ALA:HB3 | 15 | 0.12 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE2 | 1:A:111:ALA:HB2 | 15 | 0.12 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE2 | 1:A:111:ALA:HB1 | 15 | 0.12 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE2 | 1:A:111:ALA:HB3 | 15 | 0.12 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:111:ALA:HB2 | 19 | 0.12 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:111:ALA:HB1 | 19 | 0.12 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE1 | 1:A:111:ALA:HB3 | 19 | 0.12 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE2 | 1:A:111:ALA:HB2 | 19 | 0.12 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE2 | 1:A:111:ALA:HB1 | 19 | 0.12 |
| (1,708) | 1:A:112:TYR:HE2 | 1:A:111:ALA:HB3 | 19 | 0.12 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD22 | 5 | 0.12 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD21 | 5 | 0.12 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD23 | 5 | 0.12 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD12 | 5 | 0.12 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD11 | 5 | 0.12 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:97:LEU:HD13 | 5 | 0.12 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD22 | 5 | 0.12 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD21 | 5 | 0.12 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD23 | 5 | 0.12 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD12 | 5 | 0.12 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD11 | 5 | 0.12 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:97:LEU:HD13 | 5 | 0.12 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD22 | 5 | 0.12 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD21 | 5 | 0.12 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD23 | 5 | 0.12 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD12 | 5 | 0.12 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD11 | 5 | 0.12 |
| (1,656) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:97:LEU:HD13 | 5 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD22 | 1:A:45:LEU:HD12 | 8 | 0.12 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD22 | 1:A:45:LEU:HD11 | 8 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD22 | 1:A:45:LEU:HD13 | 8 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD21 | 1:A:45:LEU:HD12 | 8 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD21 | 1:A:45:LEU:HD11 | 8 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD21 | 1:A:45:LEU:HD13 | 8 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD23 | 1:A:45:LEU:HD12 | 8 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD23 | 1:A:45:LEU:HD11 | 8 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD23 | 1:A:45:LEU:HD13 | 8 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD12 | 1:A:45:LEU:HD12 | 8 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD12 | 1:A:45:LEU:HD11 | 8 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD12 | 1:A:45:LEU:HD13 | 8 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD11 | 1:A:45:LEU:HD12 | 8 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD11 | 1:A:45:LEU:HD11 | 8 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD11 | 1:A:45:LEU:HD13 | 8 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD13 | 1:A:45:LEU:HD12 | 8 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD13 | 1:A:45:LEU:HD11 | 8 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD13 | 1:A:45:LEU:HD13 | 8 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD22 | 1:A:45:LEU:HD12 | 15 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD22 | 1:A:45:LEU:HD11 | 15 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD22 | 1:A:45:LEU:HD13 | 15 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD21 | 1:A:45:LEU:HD12 | 15 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD21 | 1:A:45:LEU:HD11 | 15 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD21 | 1:A:45:LEU:HD13 | 15 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD23 | 1:A:45:LEU:HD12 | 15 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD23 | 1:A:45:LEU:HD11 | 15 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD23 | 1:A:45:LEU:HD13 | 15 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD12 | 1:A:45:LEU:HD12 | 15 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD12 | 1:A:45:LEU:HD11 | 15 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD12 | 1:A:45:LEU:HD13 | 15 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD11 | 1:A:45:LEU:HD12 | 15 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD11 | 1:A:45:LEU:HD11 | 15 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD11 | 1:A:45:LEU:HD13 | 15 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD13 | 1:A:45:LEU:HD12 | 15 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD13 | 1:A:45:LEU:HD11 | 15 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD13 | 1:A:45:LEU:HD13 | 15 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD22 | 1:A:45:LEU:HD12 | 20 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD22 | 1:A:45:LEU:HD11 | 20 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD22 | 1:A:45:LEU:HD13 | 20 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD21 | 1:A:45:LEU:HD12 | 20 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD21 | 1:A:45:LEU:HD11 | 20 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD21 | 1:A:45:LEU:HD13 | 20 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD23 | 1:A:45:LEU:HD12 | 20 | 0.12 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD23 | 1:A:45:LEU:HD11 | 20 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD23 | 1:A:45:LEU:HD13 | 20 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD12 | 1:A:45:LEU:HD12 | 20 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD12 | 1:A:45:LEU:HD11 | 20 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD12 | 1:A:45:LEU:HD13 | 20 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD11 | 1:A:45:LEU:HD12 | 20 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD11 | 1:A:45:LEU:HD11 | 20 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD11 | 1:A:45:LEU:HD13 | 20 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD13 | 1:A:45:LEU:HD12 | 20 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD13 | 1:A:45:LEU:HD11 | 20 | 0.12 |
| (1,650) | 1:A:97:LEU:HD13 | 1:A:45:LEU:HD13 | 20 | 0.12 |
| (1,632) | 1:A:97:LEU:HD22 | 1:A:45:LEU:HD22 | 5 | 0.12 |
| (1,623) | 1:A:99:LYS:HE3 | 1:A:95:GLN:HB2 | 8 | 0.12 |
| (1,574) | 1:A:41:ILE:HA | 1:A:105:PRO:HD3 | 13 | 0.12 |
| (1,569) | 1:A:56:LEU:HA | 1:A:59:LYS:HG3 | 12 | 0.12 |
| (1,535) | 1:A:108:PRO:HA | 1:A:110:ASP:HA | 2 | 0.12 |
| (1,534) | 1:A:72:ARG:HA | 1:A:77:LEU:HD12 | 7 | 0.12 |
| (1,534) | 1:A:72:ARG:HA | 1:A:77:LEU:HD11 | 7 | 0.12 |
| (1,534) | 1:A:72:ARG:HA | 1:A:77:LEU:HD13 | 7 | 0.12 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:70:LEU:HD12 | 5 | 0.12 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:70:LEU:HD11 | 5 | 0.12 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:70:LEU:HD13 | 5 | 0.12 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:70:LEU:HD12 | 5 | 0.12 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:70:LEU:HD11 | 5 | 0.12 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:70:LEU:HD13 | 5 | 0.12 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:70:LEU:HD12 | 5 | 0.12 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:70:LEU:HD11 | 5 | 0.12 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:70:LEU:HD13 | 5 | 0.12 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:70:LEU:HD12 | 8 | 0.12 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:70:LEU:HD11 | 8 | 0.12 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:70:LEU:HD13 | 8 | 0.12 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:70:LEU:HD12 | 8 | 0.12 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:70:LEU:HD11 | 8 | 0.12 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:70:LEU:HD13 | 8 | 0.12 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:70:LEU:HD12 | 8 | 0.12 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:70:LEU:HD11 | 8 | 0.12 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:70:LEU:HD13 | 8 | 0.12 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:70:LEU:HD12 | 10 | 0.12 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:70:LEU:HD11 | 10 | 0.12 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:70:LEU:HD13 | 10 | 0.12 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:70:LEU:HD12 | 10 | 0.12 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:70:LEU:HD11 | 10 | 0.12 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:70:LEU:HD13 | 10 | 0.12 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:70:LEU:HD12 | 10 | 0.12 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:70:LEU:HD11 | 10 | 0.12 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:70:LEU:HD13 | 10 | 0.12 |
| (1,493) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:118:GLU:HG2 | 6 | 0.12 |
| (1,493) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:118:GLU:HG3 | 6 | 0.12 |
| (1,493) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:118:GLU:HG2 | 6 | 0.12 |
| (1,493) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:118:GLU:HG3 | 6 | 0.12 |
| (1,493) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:118:GLU:HG2 | 6 | 0.12 |
| (1,493) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:118:GLU:HG3 | 6 | 0.12 |
| (1,486) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:119:LEU:HG | 19 | 0.12 |
| (1,486) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:119:LEU:HG | 19 | 0.12 |
| (1,486) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:119:LEU:HG | 19 | 0.12 |
| (1,485) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:121:LEU:HG | 2 | 0.12 |
| (1,485) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:121:LEU:HG | 2 | 0.12 |
| (1,485) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:121:LEU:HG | 2 | 0.12 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:104:LEU:HD12 | 1 | 0.12 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:104:LEU:HD11 | 1 | 0.12 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:104:LEU:HD13 | 1 | 0.12 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:104:LEU:HD12 | 1 | 0.12 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:104:LEU:HD11 | 1 | 0.12 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:104:LEU:HD13 | 1 | 0.12 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:104:LEU:HD12 | 1 | 0.12 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:104:LEU:HD11 | 1 | 0.12 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:104:LEU:HD13 | 1 | 0.12 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:104:LEU:HD12 | 6 | 0.12 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:104:LEU:HD11 | 6 | 0.12 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:104:LEU:HD13 | 6 | 0.12 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:104:LEU:HD12 | 6 | 0.12 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:104:LEU:HD11 | 6 | 0.12 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:104:LEU:HD13 | 6 | 0.12 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:104:LEU:HD12 | 6 | 0.12 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:104:LEU:HD11 | 6 | 0.12 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:104:LEU:HD13 | 6 | 0.12 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:104:LEU:HD12 | 13 | 0.12 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:104:LEU:HD11 | 13 | 0.12 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:104:LEU:HD13 | 13 | 0.12 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:104:LEU:HD12 | 13 | 0.12 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:104:LEU:HD11 | 13 | 0.12 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:104:LEU:HD13 | 13 | 0.12 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:104:LEU:HD12 | 13 | 0.12 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:104:LEU:HD11 | 13 | 0.12 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:104:LEU:HD13 | 13 | 0.12 |
| (1,35) | 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:87:LEU:HD12 | 3 | 0.12 |
| (1,35) | 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:87:LEU:HD11 | 3 | 0.12 |
| (1,35) | 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:87:LEU:HD13 | 3 | 0.12 |
| (1,35) | 1:A:127:LEU:HD21 | 1:A:87:LEU:HD12 | 3 | 0.12 |
| (1,35) | 1:A:127:LEU:HD21 | 1:A:87:LEU:HD11 | 3 | 0.12 |
| (1,35) | 1:A:127:LEU:HD21 | 1:A:87:LEU:HD13 | 3 | 0.12 |
| (1,35) | 1:A:127:LEU:HD23 | 1:A:87:LEU:HD12 | 3 | 0.12 |
| (1,35) | 1:A:127:LEU:HD23 | 1:A:87:LEU:HD11 | 3 | 0.12 |
| (1,35) | 1:A:127:LEU:HD23 | 1:A:87:LEU:HD13 | 3 | 0.12 |
| (1,329) | 1:A:102:SER:HB2 | 1:A:76:VAL:HB | 8 | 0.12 |
| (1,329) | 1:A:102:SER:HB3 | 1:A:76:VAL:HB | 8 | 0.12 |
| (1,225) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:119:LEU:HG | 4 | 0.12 |
| (1,225) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:119:LEU:HG | 4 | 0.12 |
| (1,225) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:119:LEU:HG | 4 | 0.12 |
| (1,206) | 1:A:56:LEU:HD22 | 1:A:51:TYR:HB3 | 20 | 0.12 |
| (1,206) | 1:A:56:LEU:HD21 | 1:A:51:TYR:HB3 | 20 | 0.12 |
| (1,206) | 1:A:56:LEU:HD23 | 1:A:51:TYR:HB3 | 20 | 0.12 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB2 | 7 | 0.12 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB1 | 7 | 0.12 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB3 | 7 | 0.12 |
| (1,2043) | 1:A:125:PHE:H | 1:A:123:ILE:HG12 | 7 | 0.12 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB2 | 15 | 0.12 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB1 | 15 | 0.12 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB3 | 15 | 0.12 |
| (1,2043) | 1:A:125:PHE:H | 1:A:123:ILE:HG12 | 15 | 0.12 |
| (1,2037) | 1:A:117:VAL:H | 1:A:68:PHE:HD1 | 9 | 0.12 |
| (1,2037) | 1:A:117:VAL:H | 1:A:68:PHE:HD2 | 9 | 0.12 |
| (1,2037) | 1:A:117:VAL:H | 1:A:114:ASN:HD21 | 9 | 0.12 |
| (1,2034) | 1:A:65:GLN:HE21 | 1:A:65:GLN:HB2 | 14 | 0.12 |
| (1,2034) | 1:A:65:GLN:HE21 | 1:A:65:GLN:HB3 | 14 | 0.12 |
| (1,2034) | 1:A:65:GLN:HE21 | 1:A:122:PRO:HB2 | 14 | 0.12 |
| (1,1997) | 1:A:57:ARG:H | 1:A:53:LYS:HG2 | 2 | 0.12 |
| (1,1997) | 1:A:57:ARG:H | 1:A:53:LYS:HG3 | 2 | 0.12 |
| (1,1997) | 1:A:57:ARG:H | 1:A:56:LEU:HG | 2 | 0.12 |
| (1,1990) | 1:A:42:SER:H | 1:A:38:ARG:HB2 | 19 | 0.12 |
| (1,1990) | 1:A:42:SER:H | 1:A:40:ARG:HB3 | 19 | 0.12 |
| (1,1934) | 1:A:125:PHE:HD1 | 1:A:53:LYS:HE3 | 14 | 0.12 |
| (1,1934) | 1:A:125:PHE:HD2 | 1:A:53:LYS:HE3 | 14 | 0.12 |
| (1,1934) | 1:A:125:PHE:HD1 | 1:A:95:GLN:HG2 | 14 | 0.12 |
| (1,1934) | 1:A:125:PHE:HD2 | 1:A:95:GLN:HG2 | 14 | 0.12 |
| (1,1816) | 1:A:83:SER:HB2 | 1:A:67:ARG:HG2 | 11 | 0.12 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1816) | 1:A:83:SER:HB2 | 1:A:67:ARG:HG3 | 11 | 0.12 |
| (1,1816) | 1:A:83:SER:HB2 | 1:A:99:LYS:HG3 | 11 | 0.12 |
| (1,1816) | 1:A:83:SER:HB2 | 1:A:121:LEU:HG | 11 | 0.12 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:124:ASP:HB2 | 14 | 0.12 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:124:ASP:HB3 | 14 | 0.12 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD21 | 1:A:124:ASP:HB2 | 14 | 0.12 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD21 | 1:A:124:ASP:HB3 | 14 | 0.12 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD23 | 1:A:124:ASP:HB2 | 14 | 0.12 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD23 | 1:A:124:ASP:HB3 | 14 | 0.12 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:95:GLN:HG2 | 14 | 0.12 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD21 | 1:A:95:GLN:HG2 | 14 | 0.12 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD23 | 1:A:95:GLN:HG2 | 14 | 0.12 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:79:VAL:H | 5 | 0.12 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:79:VAL:H | 5 | 0.12 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:79:VAL:H | 5 | 0.12 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:124:ASP:H | 5 | 0.12 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:124:ASP:H | 5 | 0.12 |
| (1,1752) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:124:ASP:H | 5 | 0.12 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD22 | 9 | 0.12 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD21 | 9 | 0.12 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD23 | 9 | 0.12 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD22 | 9 | 0.12 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD21 | 9 | 0.12 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD23 | 9 | 0.12 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD22 | 9 | 0.12 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD21 | 9 | 0.12 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD23 | 9 | 0.12 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD12 | 9 | 0.12 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD11 | 9 | 0.12 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD13 | 9 | 0.12 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD12 | 9 | 0.12 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD11 | 9 | 0.12 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD13 | 9 | 0.12 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD12 | 9 | 0.12 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD11 | 9 | 0.12 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD13 | 9 | 0.12 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD22 | 4 | 0.12 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD21 | 4 | 0.12 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD23 | 4 | 0.12 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD12 | 4 | 0.12 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD11 | 4 | 0.12 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD13 | 4 | 0.12 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1713) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:117:VAL:HG12 | 18 | 0.12 |
| (1,1713) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:117:VAL:HG11 | 18 | 0.12 |
| (1,1713) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:117:VAL:HG13 | 18 | 0.12 |
| (1,1713) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:117:VAL:HG12 | 18 | 0.12 |
| (1,1713) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:117:VAL:HG11 | 18 | 0.12 |
| (1,1713) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:117:VAL:HG13 | 18 | 0.12 |
| (1,1713) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:117:VAL:HG12 | 18 | 0.12 |
| (1,1713) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:117:VAL:HG11 | 18 | 0.12 |
| (1,1713) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:117:VAL:HG13 | 18 | 0.12 |
| (1,1713) | 1:A:109:ALA:HB2 | 1:A:117:VAL:HG12 | 18 | 0.12 |
| (1,1713) | 1:A:109:ALA:HB2 | 1:A:117:VAL:HG11 | 18 | 0.12 |
| (1,1713) | 1:A:109:ALA:HB2 | 1:A:117:VAL:HG13 | 18 | 0.12 |
| (1,1713) | 1:A:109:ALA:HB1 | 1:A:117:VAL:HG12 | 18 | 0.12 |
| (1,1713) | 1:A:109:ALA:HB1 | 1:A:117:VAL:HG11 | 18 | 0.12 |
| (1,1713) | 1:A:109:ALA:HB1 | 1:A:117:VAL:HG13 | 18 | 0.12 |
| (1,1713) | 1:A:109:ALA:HB3 | 1:A:117:VAL:HG12 | 18 | 0.12 |
| (1,1713) | 1:A:109:ALA:HB3 | 1:A:117:VAL:HG11 | 18 | 0.12 |
| (1,1713) | 1:A:109:ALA:HB3 | 1:A:117:VAL:HG13 | 18 | 0.12 |
| (1,17) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:53:LYS:HA | 15 | 0.12 |
| (1,17) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:53:LYS:HA | 15 | 0.12 |
| (1,17) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:53:LYS:HA | 15 | 0.12 |
| (1,17) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:53:LYS:HA | 18 | 0.12 |
| (1,17) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:53:LYS:HA | 18 | 0.12 |
| (1,17) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:53:LYS:HA | 18 | 0.12 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:53:LYS:HE2 | 6 | 0.12 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:60:ARG:HD2 | 6 | 0.12 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:60:ARG:HD3 | 6 | 0.12 |
| (1,1674) | 1:A:95:GLN:HA | 1:A:92:ARG:HD2 | 6 | 0.12 |
| (1,1674) | 1:A:97:LEU:HA | 1:A:53:LYS:HE2 | 6 | 0.12 |
| (1,1674) | 1:A:97:LEU:HA | 1:A:60:ARG:HD2 | 6 | 0.12 |
| (1,1674) | 1:A:97:LEU:HA | 1:A:60:ARG:HD3 | 6 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:87:LEU:HD12 | 11 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:87:LEU:HD11 | 11 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:87:LEU:HD13 | 11 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:87:LEU:HD12 | 11 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:87:LEU:HD11 | 11 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:87:LEU:HD13 | 11 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:97:LEU:HD22 | 11 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:97:LEU:HD21 | 11 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:97:LEU:HD23 | 11 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:97:LEU:HD12 | 11 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:97:LEU:HD11 | 11 | 0.12 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:97:LEU:HD13 | 11 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:97:LEU:HD22 | 11 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:97:LEU:HD21 | 11 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:97:LEU:HD23 | 11 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:97:LEU:HD12 | 11 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:97:LEU:HD11 | 11 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:97:LEU:HD13 | 11 | 0.12 |
| (1,1616) | 1:A:87:LEU:HD22 | 1:A:87:LEU:H | 16 | 0.12 |
| (1,1616) | 1:A:87:LEU:HD21 | 1:A:87:LEU:H | 16 | 0.12 |
| (1,1616) | 1:A:87:LEU:HD23 | 1:A:87:LEU:H | 16 | 0.12 |
| (1,1616) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:90:LEU:H | 16 | 0.12 |
| (1,1600) | 1:A:59:LYS:HB2 | 1:A:60:ARG:H | 11 | 0.12 |
| (1,1600) | 1:A:59:LYS:HB3 | 1:A:60:ARG:H | 11 | 0.12 |
| (1,1600) | 1:A:72:ARG:HB2 | 1:A:72:ARG:H | 11 | 0.12 |
| (1,1600) | 1:A:72:ARG:HB3 | 1:A:72:ARG:H | 11 | 0.12 |
| (1,1595) | 1:A:44:ARG:HB3 | 1:A:102:SER:HA | 16 | 0.12 |
| (1,1595) | 1:A:47:ARG:HB2 | 1:A:49:LYS:HA | 16 | 0.12 |
| (1,1565) | 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:59:LYS:HA | 6 | 0.12 |
| (1,1565) | 1:A:127:LEU:HD21 | 1:A:59:LYS:HA | 6 | 0.12 |
| (1,1565) | 1:A:127:LEU:HD23 | 1:A:59:LYS:HA | 6 | 0.12 |
| (1,1565) | 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:86:GLY:HA3 | 6 | 0.12 |
| (1,1565) | 1:A:127:LEU:HD21 | 1:A:86:GLY:HA3 | 6 | 0.12 |
| (1,1565) | 1:A:127:LEU:HD23 | 1:A:86:GLY:HA3 | 6 | 0.12 |
| (1,1562) | 1:A:121:LEU:HG | 1:A:41:ILE:HD12 | 8 | 0.12 |
| (1,1562) | 1:A:121:LEU:HG | 1:A:41:ILE:HD11 | 8 | 0.12 |
| (1,1562) | 1:A:121:LEU:HG | 1:A:41:ILE:HD13 | 8 | 0.12 |
| (1,1562) | 1:A:121:LEU:HG | 1:A:119:LEU:HG | 8 | 0.12 |
| (1,153) | 1:A:105:PRO:HG2 | 1:A:40:ARG:HB2 | 5 | 0.12 |
| (1,153) | 1:A:105:PRO:HG2 | 1:A:40:ARG:HB2 | 7 | 0.12 |
| (1,153) | 1:A:105:PRO:HG2 | 1:A:40:ARG:HB2 | 14 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG22 | 1 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG21 | 1 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG23 | 1 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG22 | 1 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG21 | 1 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG23 | 1 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG22 | 1 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG21 | 1 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG23 | 1 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD22 | 1 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD21 | 1 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD23 | 1 | 0.12 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD22 | 1 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD21 | 1 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD23 | 1 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD22 | 1 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD21 | 1 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD23 | 1 | 0.12 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:73:GLN:HA | 10 | 0.12 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:73:GLN:HA | 10 | 0.12 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:73:GLN:HA | 10 | 0.12 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:77:LEU:HA | 10 | 0.12 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:77:LEU:HA | 10 | 0.12 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:77:LEU:HA | 10 | 0.12 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:73:GLN:HA | 12 | 0.12 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:73:GLN:HA | 12 | 0.12 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:73:GLN:HA | 12 | 0.12 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:77:LEU:HA | 12 | 0.12 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:77:LEU:HA | 12 | 0.12 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:77:LEU:HA | 12 | 0.12 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:73:GLN:HA | 16 | 0.12 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:73:GLN:HA | 16 | 0.12 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:73:GLN:HA | 16 | 0.12 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:77:LEU:HA | 16 | 0.12 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:77:LEU:HA | 16 | 0.12 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:77:LEU:HA | 16 | 0.12 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:73:GLN:HA | 18 | 0.12 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:73:GLN:HA | 18 | 0.12 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:73:GLN:HA | 18 | 0.12 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:77:LEU:HA | 18 | 0.12 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:77:LEU:HA | 18 | 0.12 |
| (1,1503) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:77:LEU:HA | 18 | 0.12 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HB2 | 8 | 0.12 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HB2 | 8 | 0.12 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HB2 | 8 | 0.12 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:128:ARG:HB3 | 8 | 0.12 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:128:ARG:HB3 | 8 | 0.12 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:128:ARG:HB3 | 8 | 0.12 |
| (1,1481) | 1:A:30:ALA:H | 1:A:29:TYR:HA | 4 | 0.12 |
| (1,1471) | 1:A:27:THR:H | 1:A:27:THR:HG21 | 14 | 0.12 |
| (1,1462) | 1:A:24:THR:H | 1:A:20:ALA:HA | 3 | 0.12 |
| (1,1462) | 1:A:24:THR:H | 1:A:20:ALA:HA | 5 | 0.12 |
| (1,146) | 1:A:45:LEU:HD12 | 1:A:41:ILE:HG22 | 15 | 0.12 |
| (1,146) | 1:A:45:LEU:HD12 | 1:A:41:ILE:HG21 | 15 | 0.12 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,146) | 1:A:45:LEU:HD12 | 1:A:41:ILE:HG23 | 15 | 0.12 |
| (1,146) | 1:A:45:LEU:HD11 | 1:A:41:ILE:HG22 | 15 | 0.12 |
| (1,146) | 1:A:45:LEU:HD11 | 1:A:41:ILE:HG21 | 15 | 0.12 |
| (1,146) | 1:A:45:LEU:HD11 | 1:A:41:ILE:HG23 | 15 | 0.12 |
| (1,146) | 1:A:45:LEU:HD13 | 1:A:41:ILE:HG22 | 15 | 0.12 |
| (1,146) | 1:A:45:LEU:HD13 | 1:A:41:ILE:HG21 | 15 | 0.12 |
| (1,146) | 1:A:45:LEU:HD13 | 1:A:41:ILE:HG23 | 15 | 0.12 |
| (1,1459) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:20:ALA:HA | 15 | 0.12 |
| (1,132) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:81:LEU:HG | 6 | 0.12 |
| (1,132) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:81:LEU:HG | 6 | 0.12 |
| (1,132) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:81:LEU:HG | 6 | 0.12 |
| (1,132) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:81:LEU:HG | 16 | 0.12 |
| (1,132) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:81:LEU:HG | 16 | 0.12 |
| (1,132) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:81:LEU:HG | 16 | 0.12 |
| (1,1286) | 1:A:76:VAL:H | 1:A:71:ASP:HB2 | 8 | 0.12 |
| (1,126) | 1:A:51:TYR:HB3 | 1:A:53:LYS:HE2 | 14 | 0.12 |
| (1,126) | 1:A:51:TYR:HB3 | 1:A:53:LYS:HE2 | 16 | 0.12 |
| (1,1238) | 1:A:116:THR:H | 1:A:113:VAL:H | 5 | 0.12 |
| (1,1238) | 1:A:116:THR:H | 1:A:113:VAL:H | 17 | 0.12 |
| (1,1233) | 1:A:106:THR:H | 1:A:105:PRO:HG3 | 16 | 0.12 |
| (1,1174) | 1:A:62:GLY:H | 1:A:61:GLN:HG2 | 13 | 0.12 |
| (1,1174) | 1:A:62:GLY:H | 1:A:61:GLN:HG3 | 13 | 0.12 |
| (1,1172) | 1:A:125:PHE:HB2 | 1:A:62:GLY:H | 18 | 0.12 |
| (1,1141) | 1:A:87:LEU:H | 1:A:84:SER:HB2 | 13 | 0.12 |
| (1,1054) | 1:A:47:ARG:HB2 | 1:A:47:ARG:H | 3 | 0.12 |
| (1,1054) | 1:A:47:ARG:HB2 | 1:A:47:ARG:H | 12 | 0.12 |
| (1,1047) | 1:A:83:SER:H | 1:A:82:VAL:HB | 8 | 0.12 |
| (2,17) | 1:A:92:ARG:O | 1:A:96:ALA:H | 17 | 0.11 |
| (2,10) | 1:A:39:SER:O | 1:A:43:GLY:H | 3 | 0.11 |
| (1,977) | 1:A:40:ARG:H | 1:A:38:ARG:H | 2 | 0.11 |
| (1,970) | 1:A:76:VAL:H | 1:A:102:SER:HA | 12 | 0.11 |
| (1,949) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:45:LEU:HG | 3 | 0.11 |
| (1,949) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:45:LEU:HG | 4 | 0.11 |
| (1,949) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:45:LEU:HG | 19 | 0.11 |
| (1,920) | 1:A:128:ARG:H | 1:A:128:ARG:HB3 | 20 | 0.11 |
| (1,863) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:93:GLU:HB3 | 7 | 0.11 |
| (1,718) | 1:A:51:TYR:HE1 | 1:A:51:TYR:H | 4 | 0.11 |
| (1,718) | 1:A:51:TYR:HE2 | 1:A:51:TYR:H | 4 | 0.11 |
| (1,685) | 1:A:44:ARG:HB2 | 1:A:47:ARG:HD3 | 17 | 0.11 |
| (1,672) | 1:A:41:ILE:HA | 1:A:44:ARG:HD2 | 10 | 0.11 |
| (1,672) | 1:A:41:ILE:HA | 1:A:44:ARG:HD3 | 10 | 0.11 |
| (1,632) | 1:A:97:LEU:HD22 | 1:A:45:LEU:HD22 | 4 | 0.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,618) | 1:A:44:ARG:HB3 | 1:A:103:PRO:HB2 | 20 | 0.11 |
| (1,569) | 1:A:56:LEU:HA | 1:A:59:LYS:HG3 | 7 | 0.11 |
| (1,569) | 1:A:56:LEU:HA | 1:A:59:LYS:HG3 | 9 | 0.11 |
| (1,535) | 1:A:108:PRO:HA | 1:A:110:ASP:HA | 3 | 0.11 |
| (1,534) | 1:A:72:ARG:HA | 1:A:77:LEU:HD12 | 16 | 0.11 |
| (1,534) | 1:A:72:ARG:HA | 1:A:77:LEU:HD11 | 16 | 0.11 |
| (1,534) | 1:A:72:ARG:HA | 1:A:77:LEU:HD13 | 16 | 0.11 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:70:LEU:HD12 | 7 | 0.11 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:70:LEU:HD11 | 7 | 0.11 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:70:LEU:HD13 | 7 | 0.11 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:70:LEU:HD12 | 7 | 0.11 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:70:LEU:HD11 | 7 | 0.11 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:70:LEU:HD13 | 7 | 0.11 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:70:LEU:HD12 | 7 | 0.11 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:70:LEU:HD11 | 7 | 0.11 |
| (1,53) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:70:LEU:HD13 | 7 | 0.11 |
| (1,493) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:118:GLU:HG2 | 8 | 0.11 |
| (1,493) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:118:GLU:HG3 | 8 | 0.11 |
| (1,493) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:118:GLU:HG2 | 8 | 0.11 |
| (1,493) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:118:GLU:HG3 | 8 | 0.11 |
| (1,493) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:118:GLU:HG2 | 8 | 0.11 |
| (1,493) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:118:GLU:HG3 | 8 | 0.11 |
| (1,482) | 1:A:87:LEU:HG | 1:A:64:GLY:H | 1 | 0.11 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:104:LEU:HD12 | 7 | 0.11 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:104:LEU:HD11 | 7 | 0.11 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG12 | 1:A:104:LEU:HD13 | 7 | 0.11 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:104:LEU:HD12 | 7 | 0.11 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:104:LEU:HD11 | 7 | 0.11 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG11 | 1:A:104:LEU:HD13 | 7 | 0.11 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:104:LEU:HD12 | 7 | 0.11 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:104:LEU:HD11 | 7 | 0.11 |
| (1,47) | 1:A:117:VAL:HG13 | 1:A:104:LEU:HD13 | 7 | 0.11 |
| (1,459) | 1:A:69:THR:HG21 | 1:A:108:PRO:HG3 | 1 | 0.11 |
| (1,459) | 1:A:69:THR:HG22 | 1:A:108:PRO:HG3 | 1 | 0.11 |
| (1,459) | 1:A:69:THR:HG23 | 1:A:108:PRO:HG3 | 1 | 0.11 |
| (1,459) | 1:A:69:THR:HG21 | 1:A:108:PRO:HG3 | 2 | 0.11 |
| (1,459) | 1:A:69:THR:HG22 | 1:A:108:PRO:HG3 | 2 | 0.11 |
| (1,459) | 1:A:69:THR:HG23 | 1:A:108:PRO:HG3 | 2 | 0.11 |
| (1,459) | 1:A:69:THR:HG21 | 1:A:108:PRO:HG3 | 4 | 0.11 |
| (1,459) | 1:A:69:THR:HG22 | 1:A:108:PRO:HG3 | 4 | 0.11 |
| (1,459) | 1:A:69:THR:HG23 | 1:A:108:PRO:HG3 | 4 | 0.11 |
| (1,459) | 1:A:69:THR:HG21 | 1:A:108:PRO:HG3 | 9 | 0.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,459) | 1:A:69:THR:HG22 | 1:A:108:PRO:HG3 | 9 | 0.11 |
| (1,459) | 1:A:69:THR:HG23 | 1:A:108:PRO:HG3 | 9 | 0.11 |
| (1,459) | 1:A:69:THR:HG21 | 1:A:108:PRO:HG3 | 11 | 0.11 |
| (1,459) | 1:A:69:THR:HG22 | 1:A:108:PRO:HG3 | 11 | 0.11 |
| (1,459) | 1:A:69:THR:HG23 | 1:A:108:PRO:HG3 | 11 | 0.11 |
| (1,459) | 1:A:69:THR:HG21 | 1:A:108:PRO:HG3 | 12 | 0.11 |
| (1,459) | 1:A:69:THR:HG22 | 1:A:108:PRO:HG3 | 12 | 0.11 |
| (1,459) | 1:A:69:THR:HG23 | 1:A:108:PRO:HG3 | 12 | 0.11 |
| (1,449) | 1:A:119:LEU:HD22 | 1:A:37:TRP:HB3 | 13 | 0.11 |
| (1,449) | 1:A:119:LEU:HD21 | 1:A:37:TRP:HB3 | 13 | 0.11 |
| (1,449) | 1:A:119:LEU:HD23 | 1:A:37:TRP:HB3 | 13 | 0.11 |
| (1,43) | 1:A:98:VAL:HG22 | 1:A:45:LEU:HD22 | 14 | 0.11 |
| (1,349) | 1:A:100:ARG:HA | 1:A:100:ARG:HD2 | 7 | 0.11 |
| (1,349) | 1:A:100:ARG:HA | 1:A:100:ARG:HD3 | 7 | 0.11 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG12 | 1:A:67:ARG:HB2 | 7 | 0.11 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG12 | 1:A:67:ARG:HB3 | 7 | 0.11 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG11 | 1:A:67:ARG:HB2 | 7 | 0.11 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG11 | 1:A:67:ARG:HB3 | 7 | 0.11 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG13 | 1:A:67:ARG:HB2 | 7 | 0.11 |
| (1,30) | 1:A:82:VAL:HG13 | 1:A:67:ARG:HB3 | 7 | 0.11 |
| (1,273) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:100:ARG:HD2 | 3 | 0.11 |
| (1,273) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:100:ARG:HD3 | 3 | 0.11 |
| (1,273) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:100:ARG:HD2 | 3 | 0.11 |
| (1,273) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:100:ARG:HD3 | 3 | 0.11 |
| (1,273) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:100:ARG:HD2 | 3 | 0.11 |
| (1,273) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:100:ARG:HD3 | 3 | 0.11 |
| (1,273) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:100:ARG:HD2 | 20 | 0.11 |
| (1,273) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:100:ARG:HD3 | 20 | 0.11 |
| (1,273) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:100:ARG:HD2 | 20 | 0.11 |
| (1,273) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:100:ARG:HD3 | 20 | 0.11 |
| (1,273) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:100:ARG:HD2 | 20 | 0.11 |
| (1,273) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:100:ARG:HD3 | 20 | 0.11 |
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:74:GLY:HA3 | 2 | 0.11 |
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:74:GLY:HA3 | 2 | 0.11 |
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:74:GLY:HA3 | 2 | 0.11 |
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:74:GLY:HA3 | 4 | 0.11 |
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:74:GLY:HA3 | 4 | 0.11 |
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:74:GLY:HA3 | 4 | 0.11 |
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:74:GLY:HA3 | 13 | 0.11 |
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:74:GLY:HA3 | 13 | 0.11 |
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:74:GLY:HA3 | 13 | 0.11 |
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD12 | 1:A:74:GLY:HA3 | 18 | 0.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD11 | 1:A:74:GLY:HA3 | 18 | 0.11 |
| (1,250) | 1:A:77:LEU:HD13 | 1:A:74:GLY:HA3 | 18 | 0.11 |
| (1,2079) | 1:A:87:LEU:H | 1:A:83:SER:HB2 | 12 | 0.11 |
| (1,2079) | 1:A:87:LEU:H | 1:A:89:SER:HB3 | 12 | 0.11 |
| (1,2079) | 1:A:87:LEU:H | 1:A:131:GLY:HA3 | 12 | 0.11 |
| (1,206) | 1:A:56:LEU:HD22 | 1:A:51:TYR:HB3 | 9 | 0.11 |
| (1,206) | 1:A:56:LEU:HD21 | 1:A:51:TYR:HB3 | 9 | 0.11 |
| (1,206) | 1:A:56:LEU:HD23 | 1:A:51:TYR:HB3 | 9 | 0.11 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB2 | 4 | 0.11 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB1 | 4 | 0.11 |
| (1,2043) | 1:A:68:PHE:H | 1:A:78:ALA:HB3 | 4 | 0.11 |
| (1,2043) | 1:A:125:PHE:H | 1:A:123:ILE:HG12 | 4 | 0.11 |
| (1,2037) | 1:A:117:VAL:H | 1:A:68:PHE:HD1 | 7 | 0.11 |
| (1,2037) | 1:A:117:VAL:H | 1:A:68:PHE:HD2 | 7 | 0.11 |
| (1,2037) | 1:A:117:VAL:H | 1:A:114:ASN:HD21 | 7 | 0.11 |
| (1,1990) | 1:A:42:SER:H | 1:A:38:ARG:HB2 | 2 | 0.11 |
| (1,1990) | 1:A:42:SER:H | 1:A:40:ARG:HB3 | 2 | 0.11 |
| (1,1979) | 1:A:64:GLY:H | 1:A:94:ILE:HG22 | 9 | 0.11 |
| (1,1979) | 1:A:64:GLY:H | 1:A:94:ILE:HG21 | 9 | 0.11 |
| (1,1979) | 1:A:64:GLY:H | 1:A:94:ILE:HG23 | 9 | 0.11 |
| (1,1979) | 1:A:64:GLY:H | 1:A:94:ILE:HG12 | 9 | 0.11 |
| (1,1979) | 1:A:64:GLY:H | 1:A:94:ILE:HG13 | 9 | 0.11 |
| (1,1979) | 1:A:64:GLY:H | 1:A:66:VAL:HG22 | 9 | 0.11 |
| (1,1979) | 1:A:64:GLY:H | 1:A:66:VAL:HG21 | 9 | 0.11 |
| (1,1979) | 1:A:64:GLY:H | 1:A:66:VAL:HG23 | 9 | 0.11 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD12 | 9 | 0.11 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD11 | 9 | 0.11 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD13 | 9 | 0.11 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD22 | 9 | 0.11 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD21 | 9 | 0.11 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD23 | 9 | 0.11 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD12 | 9 | 0.11 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD11 | 9 | 0.11 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD13 | 9 | 0.11 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD12 | 16 | 0.11 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD11 | 16 | 0.11 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:87:LEU:HD13 | 16 | 0.11 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD22 | 16 | 0.11 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD21 | 16 | 0.11 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD23 | 16 | 0.11 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD12 | 16 | 0.11 |
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD11 | 16 | 0.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1977) | 1:A:94:ILE:H | 1:A:97:LEU:HD13 | 16 | 0.11 |
| (1,195) | 1:A:45:LEU:HD22 | 1:A:101:ALA:HB2 | 1 | 0.11 |
| (1,195) | 1:A:45:LEU:HD22 | 1:A:101:ALA:HB2 | 3 | 0.11 |
| (1,195) | 1:A:45:LEU:HD22 | 1:A:101:ALA:HB2 | 5 | 0.11 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:124:ASP:HB2 | 18 | 0.11 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:124:ASP:HB3 | 18 | 0.11 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD21 | 1:A:124:ASP:HB2 | 18 | 0.11 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD21 | 1:A:124:ASP:HB3 | 18 | 0.11 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD23 | 1:A:124:ASP:HB2 | 18 | 0.11 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD23 | 1:A:124:ASP:HB3 | 18 | 0.11 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD22 | 1:A:95:GLN:HG2 | 18 | 0.11 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD21 | 1:A:95:GLN:HG2 | 18 | 0.11 |
| (1,1801) | 1:A:127:LEU:HD23 | 1:A:95:GLN:HG2 | 18 | 0.11 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD22 | 1:A:45:LEU:HB2 | 11 | 0.11 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD21 | 1:A:45:LEU:HB2 | 11 | 0.11 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD23 | 1:A:45:LEU:HB2 | 11 | 0.11 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD12 | 1:A:45:LEU:HB2 | 11 | 0.11 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD11 | 1:A:45:LEU:HB2 | 11 | 0.11 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD13 | 1:A:45:LEU:HB2 | 11 | 0.11 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD22 | 1:A:49:LYS:HB2 | 11 | 0.11 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD21 | 1:A:49:LYS:HB2 | 11 | 0.11 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD23 | 1:A:49:LYS:HB2 | 11 | 0.11 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD12 | 1:A:49:LYS:HB2 | 11 | 0.11 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD11 | 1:A:49:LYS:HB2 | 11 | 0.11 |
| (1,1796) | 1:A:97:LEU:HD13 | 1:A:49:LYS:HB2 | 11 | 0.11 |
| (1,1785) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:73:GLN:HA | 8 | 0.11 |
| (1,1785) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:73:GLN:HA | 8 | 0.11 |
| (1,1785) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:73:GLN:HA | 8 | 0.11 |
| (1,1785) | 1:A:70:LEU:HD12 | 1:A:77:LEU:HA | 8 | 0.11 |
| (1,1785) | 1:A:70:LEU:HD11 | 1:A:77:LEU:HA | 8 | 0.11 |
| (1,1785) | 1:A:70:LEU:HD13 | 1:A:77:LEU:HA | 8 | 0.11 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD22 | 5 | 0.11 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD21 | 5 | 0.11 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD23 | 5 | 0.11 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD22 | 5 | 0.11 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD21 | 5 | 0.11 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD23 | 5 | 0.11 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD22 | 5 | 0.11 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD21 | 5 | 0.11 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD23 | 5 | 0.11 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD12 | 5 | 0.11 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD11 | 5 | 0.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG22 | 1:A:121:LEU:HD13 | 5 | 0.11 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD12 | 5 | 0.11 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD11 | 5 | 0.11 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG21 | 1:A:121:LEU:HD13 | 5 | 0.11 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD12 | 5 | 0.11 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD11 | 5 | 0.11 |
| (1,1742) | 1:A:117:VAL:HG23 | 1:A:121:LEU:HD13 | 5 | 0.11 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD22 | 14 | 0.11 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD21 | 14 | 0.11 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD23 | 14 | 0.11 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD12 | 14 | 0.11 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD11 | 14 | 0.11 |
| (1,1735) | 1:A:123:ILE:HG12 | 1:A:121:LEU:HD13 | 14 | 0.11 |
| (1,1713) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:117:VAL:HG12 | 11 | 0.11 |
| (1,1713) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:117:VAL:HG11 | 11 | 0.11 |
| (1,1713) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:117:VAL:HG13 | 11 | 0.11 |
| (1,1713) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:117:VAL:HG12 | 11 | 0.11 |
| (1,1713) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:117:VAL:HG11 | 11 | 0.11 |
| (1,1713) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:117:VAL:HG13 | 11 | 0.11 |
| (1,1713) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:117:VAL:HG12 | 11 | 0.11 |
| (1,1713) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:117:VAL:HG11 | 11 | 0.11 |
| (1,1713) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:117:VAL:HG13 | 11 | 0.11 |
| (1,1713) | 1:A:109:ALA:HB2 | 1:A:117:VAL:HG12 | 11 | 0.11 |
| (1,1713) | 1:A:109:ALA:HB2 | 1:A:117:VAL:HG11 | 11 | 0.11 |
| (1,1713) | 1:A:109:ALA:HB2 | 1:A:117:VAL:HG13 | 11 | 0.11 |
| (1,1713) | 1:A:109:ALA:HB1 | 1:A:117:VAL:HG12 | 11 | 0.11 |
| (1,1713) | 1:A:109:ALA:HB1 | 1:A:117:VAL:HG11 | 11 | 0.11 |
| (1,1713) | 1:A:109:ALA:HB1 | 1:A:117:VAL:HG13 | 11 | 0.11 |
| (1,1713) | 1:A:109:ALA:HB3 | 1:A:117:VAL:HG12 | 11 | 0.11 |
| (1,1713) | 1:A:109:ALA:HB3 | 1:A:117:VAL:HG11 | 11 | 0.11 |
| (1,1713) | 1:A:109:ALA:HB3 | 1:A:117:VAL:HG13 | 11 | 0.11 |
| (1,17) | 1:A:56:LEU:HD12 | 1:A:53:LYS:HA | 4 | 0.11 |
| (1,17) | 1:A:56:LEU:HD11 | 1:A:53:LYS:HA | 4 | 0.11 |
| (1,17) | 1:A:56:LEU:HD13 | 1:A:53:LYS:HA | 4 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:87:LEU:HD12 | 14 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:87:LEU:HD11 | 14 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:87:LEU:HD13 | 14 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:87:LEU:HD12 | 14 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:87:LEU:HD11 | 14 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:87:LEU:HD13 | 14 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:97:LEU:HD22 | 14 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:97:LEU:HD21 | 14 | 0.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:97:LEU:HD23 | 14 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:97:LEU:HD12 | 14 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:97:LEU:HD11 | 14 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:97:LEU:HD13 | 14 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:97:LEU:HD22 | 14 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:97:LEU:HD21 | 14 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:97:LEU:HD23 | 14 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:97:LEU:HD12 | 14 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:97:LEU:HD11 | 14 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:97:LEU:HD13 | 14 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:87:LEU:HD12 | 18 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:87:LEU:HD11 | 18 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:87:LEU:HD13 | 18 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:87:LEU:HD12 | 18 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:87:LEU:HD11 | 18 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:87:LEU:HD13 | 18 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:97:LEU:HD22 | 18 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:97:LEU:HD21 | 18 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:97:LEU:HD23 | 18 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:97:LEU:HD12 | 18 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:97:LEU:HD11 | 18 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:97:LEU:HD13 | 18 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:97:LEU:HD22 | 18 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:97:LEU:HD21 | 18 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:97:LEU:HD23 | 18 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:97:LEU:HD12 | 18 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:97:LEU:HD11 | 18 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:97:LEU:HD13 | 18 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:87:LEU:HD12 | 20 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:87:LEU:HD11 | 20 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:87:LEU:HD13 | 20 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:87:LEU:HD12 | 20 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:87:LEU:HD11 | 20 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:87:LEU:HD13 | 20 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:97:LEU:HD22 | 20 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:97:LEU:HD21 | 20 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:97:LEU:HD23 | 20 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:97:LEU:HD12 | 20 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:97:LEU:HD11 | 20 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB2 | 1:A:97:LEU:HD13 | 20 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:97:LEU:HD22 | 20 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:97:LEU:HD21 | 20 | 0.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:97:LEU:HD23 | 20 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:97:LEU:HD12 | 20 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:97:LEU:HD11 | 20 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:60:ARG:HB3 | 1:A:97:LEU:HD13 | 20 | 0.11 |
| (1,164) | 1:A:53:LYS:HE3 | 1:A:56:LEU:HB2 | 9 | 0.11 |
| (1,1630) | 1:A:98:VAL:HG22 | 1:A:50:ARG:HG2 | 8 | 0.11 |
| (1,1630) | 1:A:98:VAL:HG22 | 1:A:50:ARG:HG3 | 8 | 0.11 |
| (1,1630) | 1:A:98:VAL:HG21 | 1:A:50:ARG:HG2 | 8 | 0.11 |
| (1,1630) | 1:A:98:VAL:HG21 | 1:A:50:ARG:HG3 | 8 | 0.11 |
| (1,1630) | 1:A:98:VAL:HG23 | 1:A:50:ARG:HG2 | 8 | 0.11 |
| (1,1630) | 1:A:98:VAL:HG23 | 1:A:50:ARG:HG3 | 8 | 0.11 |
| (1,1630) | 1:A:98:VAL:HG22 | 1:A:53:LYS:HG2 | 8 | 0.11 |
| (1,1630) | 1:A:98:VAL:HG22 | 1:A:53:LYS:HG3 | 8 | 0.11 |
| (1,1630) | 1:A:98:VAL:HG21 | 1:A:53:LYS:HG2 | 8 | 0.11 |
| (1,1630) | 1:A:98:VAL:HG21 | 1:A:53:LYS:HG3 | 8 | 0.11 |
| (1,1630) | 1:A:98:VAL:HG23 | 1:A:53:LYS:HG2 | 8 | 0.11 |
| (1,1630) | 1:A:98:VAL:HG23 | 1:A:53:LYS:HG3 | 8 | 0.11 |
| (1,1616) | 1:A:87:LEU:HD22 | 1:A:87:LEU:H | 4 | 0.11 |
| (1,1616) | 1:A:87:LEU:HD21 | 1:A:87:LEU:H | 4 | 0.11 |
| (1,1616) | 1:A:87:LEU:HD23 | 1:A:87:LEU:H | 4 | 0.11 |
| (1,1616) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:90:LEU:H | 4 | 0.11 |
| (1,1600) | 1:A:59:LYS:HB2 | 1:A:60:ARG:H | 20 | 0.11 |
| (1,1600) | 1:A:59:LYS:HB3 | 1:A:60:ARG:H | 20 | 0.11 |
| (1,1600) | 1:A:72:ARG:HB2 | 1:A:72:ARG:H | 20 | 0.11 |
| (1,1600) | 1:A:72:ARG:HB3 | 1:A:72:ARG:H | 20 | 0.11 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:95:GLN:HB2 | 11 | 0.11 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:95:GLN:HB2 | 11 | 0.11 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:95:GLN:HB2 | 11 | 0.11 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG22 | 1:A:95:GLN:HG2 | 11 | 0.11 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG21 | 1:A:95:GLN:HG2 | 11 | 0.11 |
| (1,1584) | 1:A:123:ILE:HG23 | 1:A:95:GLN:HG2 | 11 | 0.11 |
| (1,1573) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:67:ARG:HD2 | 8 | 0.11 |
| (1,1573) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:67:ARG:HD3 | 8 | 0.11 |
| (1,1573) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:67:ARG:HD2 | 8 | 0.11 |
| (1,1573) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:67:ARG:HD3 | 8 | 0.11 |
| (1,1573) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:67:ARG:HD2 | 8 | 0.11 |
| (1,1573) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:67:ARG:HD3 | 8 | 0.11 |
| (1,1573) | 1:A:119:LEU:HD12 | 1:A:67:ARG:HD2 | 8 | 0.11 |
| (1,1573) | 1:A:119:LEU:HD12 | 1:A:67:ARG:HD3 | 8 | 0.11 |
| (1,1573) | 1:A:119:LEU:HD11 | 1:A:67:ARG:HD2 | 8 | 0.11 |
| (1,1573) | 1:A:119:LEU:HD11 | 1:A:67:ARG:HD3 | 8 | 0.11 |
| (1,1573) | 1:A:119:LEU:HD13 | 1:A:67:ARG:HD2 | 8 | 0.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1573) | 1:A:119:LEU:HD13 | 1:A:67:ARG:HD3 | 8 | 0.11 |
| (1,1573) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:67:ARG:HD2 | 17 | 0.11 |
| (1,1573) | 1:A:70:LEU:HD22 | 1:A:67:ARG:HD3 | 17 | 0.11 |
| (1,1573) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:67:ARG:HD2 | 17 | 0.11 |
| (1,1573) | 1:A:70:LEU:HD21 | 1:A:67:ARG:HD3 | 17 | 0.11 |
| (1,1573) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:67:ARG:HD2 | 17 | 0.11 |
| (1,1573) | 1:A:70:LEU:HD23 | 1:A:67:ARG:HD3 | 17 | 0.11 |
| (1,1573) | 1:A:119:LEU:HD12 | 1:A:67:ARG:HD2 | 17 | 0.11 |
| (1,1573) | 1:A:119:LEU:HD12 | 1:A:67:ARG:HD3 | 17 | 0.11 |
| (1,1573) | 1:A:119:LEU:HD11 | 1:A:67:ARG:HD2 | 17 | 0.11 |
| (1,1573) | 1:A:119:LEU:HD11 | 1:A:67:ARG:HD3 | 17 | 0.11 |
| (1,1573) | 1:A:119:LEU:HD13 | 1:A:67:ARG:HD2 | 17 | 0.11 |
| (1,1573) | 1:A:119:LEU:HD13 | 1:A:67:ARG:HD3 | 17 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:68:PHE:HE1 | 1 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:68:PHE:HE2 | 1 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:68:PHE:HE1 | 1 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:68:PHE:HE2 | 1 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:68:PHE:HE1 | 1 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:68:PHE:HE2 | 1 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:68:PHE:HZ | 1 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:68:PHE:HZ | 1 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:68:PHE:HZ | 1 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:68:PHE:HE1 | 3 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:68:PHE:HE2 | 3 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:68:PHE:HE1 | 3 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:68:PHE:HE2 | 3 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:68:PHE:HE1 | 3 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:68:PHE:HE2 | 3 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:68:PHE:HZ | 3 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:68:PHE:HZ | 3 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:68:PHE:HZ | 3 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:68:PHE:HE1 | 5 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:68:PHE:HE2 | 5 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:68:PHE:HE1 | 5 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:68:PHE:HE2 | 5 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:68:PHE:HE1 | 5 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:68:PHE:HE2 | 5 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:68:PHE:HZ | 5 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:68:PHE:HZ | 5 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:68:PHE:HZ | 5 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:68:PHE:HE1 | 17 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:68:PHE:HE2 | 17 | 0.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:68:PHE:HE1 | 17 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:68:PHE:HE2 | 17 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:68:PHE:HE1 | 17 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:68:PHE:HE2 | 17 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:68:PHE:HZ | 17 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:68:PHE:HZ | 17 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:68:PHE:HZ | 17 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:68:PHE:HE1 | 20 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:68:PHE:HE2 | 20 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:68:PHE:HE1 | 20 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:68:PHE:HE2 | 20 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:68:PHE:HE1 | 20 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:68:PHE:HE2 | 20 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD12 | 1:A:68:PHE:HZ | 20 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD11 | 1:A:68:PHE:HZ | 20 | 0.11 |
| (1,1545) | 1:A:121:LEU:HD13 | 1:A:68:PHE:HZ | 20 | 0.11 |
| (1,1520) | 1:A:123:ILE:HD12 | 1:A:63:VAL:HB | 1 | 0.11 |
| (1,1520) | 1:A:123:ILE:HD11 | 1:A:63:VAL:HB | 1 | 0.11 |
| (1,1520) | 1:A:123:ILE:HD13 | 1:A:63:VAL:HB | 1 | 0.11 |
| (1,1520) | 1:A:123:ILE:HD12 | 1:A:93:GLU:HB3 | 1 | 0.11 |
| (1,1520) | 1:A:123:ILE:HD11 | 1:A:93:GLU:HB3 | 1 | 0.11 |
| (1,1520) | 1:A:123:ILE:HD13 | 1:A:93:GLU:HB3 | 1 | 0.11 |
| (1,1520) | 1:A:123:ILE:HD12 | 1:A:100:ARG:HB2 | 1 | 0.11 |
| (1,1520) | 1:A:123:ILE:HD12 | 1:A:100:ARG:HB3 | 1 | 0.11 |
| (1,1520) | 1:A:123:ILE:HD11 | 1:A:100:ARG:HB2 | 1 | 0.11 |
| (1,1520) | 1:A:123:ILE:HD11 | 1:A:100:ARG:HB3 | 1 | 0.11 |
| (1,1520) | 1:A:123:ILE:HD13 | 1:A:100:ARG:HB2 | 1 | 0.11 |
| (1,1520) | 1:A:123:ILE:HD13 | 1:A:100:ARG:HB3 | 1 | 0.11 |
| (1,1520) | 1:A:123:ILE:HD12 | 1:A:122:PRO:HG3 | 1 | 0.11 |
| (1,1520) | 1:A:123:ILE:HD11 | 1:A:122:PRO:HG3 | 1 | 0.11 |
| (1,1520) | 1:A:123:ILE:HD13 | 1:A:122:PRO:HG3 | 1 | 0.11 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG22 | 11 | 0.11 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG21 | 11 | 0.11 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB2 | 1:A:76:VAL:HG23 | 11 | 0.11 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG22 | 11 | 0.11 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG21 | 11 | 0.11 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB1 | 1:A:76:VAL:HG23 | 11 | 0.11 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG22 | 11 | 0.11 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG21 | 11 | 0.11 |
| (1,1509) | 1:A:101:ALA:HB3 | 1:A:76:VAL:HG23 | 11 | 0.11 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD22 | 11 | 0.11 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD21 | 11 | 0.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG21 | 1:A:121:LEU:HD23 | 11 | 0.11 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD22 | 11 | 0.11 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD21 | 11 | 0.11 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG22 | 1:A:121:LEU:HD23 | 11 | 0.11 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD22 | 11 | 0.11 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD21 | 11 | 0.11 |
| (1,1509) | 1:A:120:THR:HG23 | 1:A:121:LEU:HD23 | 11 | 0.11 |
| (1,1506) | 1:A:78:ALA:HB2 | 1:A:99:LYS:HD2 | 10 | 0.11 |
| (1,1506) | 1:A:78:ALA:HB1 | 1:A:99:LYS:HD2 | 10 | 0.11 |
| (1,1506) | 1:A:78:ALA:HB3 | 1:A:99:LYS:HD2 | 10 | 0.11 |
| (1,1506) | 1:A:78:ALA:HB2 | 1:A:99:LYS:HD3 | 10 | 0.11 |
| (1,1506) | 1:A:78:ALA:HB1 | 1:A:99:LYS:HD3 | 10 | 0.11 |
| (1,1506) | 1:A:78:ALA:HB3 | 1:A:99:LYS:HD3 | 10 | 0.11 |
| (1,1506) | 1:A:78:ALA:HB2 | 1:A:70:LEU:HG | 10 | 0.11 |
| (1,1506) | 1:A:78:ALA:HB1 | 1:A:70:LEU:HG | 10 | 0.11 |
| (1,1506) | 1:A:78:ALA:HB3 | 1:A:70:LEU:HG | 10 | 0.11 |
| (1,1498) | 1:A:87:LEU:HD22 | 1:A:123:ILE:HG12 | 5 | 0.11 |
| (1,1498) | 1:A:87:LEU:HD21 | 1:A:123:ILE:HG12 | 5 | 0.11 |
| (1,1498) | 1:A:87:LEU:HD23 | 1:A:123:ILE:HG12 | 5 | 0.11 |
| (1,1498) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:130:ALA:HB2 | 5 | 0.11 |
| (1,1498) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:130:ALA:HB1 | 5 | 0.11 |
| (1,1498) | 1:A:90:LEU:HG | 1:A:130:ALA:HB3 | 5 | 0.11 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:90:LEU:HB2 | 2 | 0.11 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:90:LEU:HB2 | 2 | 0.11 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:90:LEU:HB2 | 2 | 0.11 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD12 | 1:A:128:ARG:HB3 | 2 | 0.11 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD11 | 1:A:128:ARG:HB3 | 2 | 0.11 |
| (1,1496) | 1:A:127:LEU:HD13 | 1:A:128:ARG:HB3 | 2 | 0.11 |
| (1,1466) | 1:A:25:ARG:H | 1:A:23:GLN:HA | 5 | 0.11 |
| (1,132) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:81:LEU:HG | 10 | 0.11 |
| (1,132) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:81:LEU:HG | 10 | 0.11 |
| (1,132) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:81:LEU:HG | 10 | 0.11 |
| (1,132) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:81:LEU:HG | 11 | 0.11 |
| (1,132) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:81:LEU:HG | 11 | 0.11 |
| (1,132) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:81:LEU:HG | 11 | 0.11 |
| (1,132) | 1:A:82:VAL:HG22 | 1:A:81:LEU:HG | 18 | 0.11 |
| (1,132) | 1:A:82:VAL:HG21 | 1:A:81:LEU:HG | 18 | 0.11 |
| (1,132) | 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:81:LEU:HG | 18 | 0.11 |
| (1,1264) | 1:A:92:ARG:H | 1:A:88:PRO:HA | 17 | 0.11 |
| (1,126) | 1:A:51:TYR:HB3 | 1:A:53:LYS:HE2 | 3 | 0.11 |
| (1,126) | 1:A:51:TYR:HB3 | 1:A:53:LYS:HE2 | 8 | 0.11 |
| (1,126) | 1:A:51:TYR:HB3 | 1:A:53:LYS:HE2 | 18 | 0.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1238) | 1:A:116:THR:H | 1:A:113:VAL:H | 11 | 0.11 |
| (1,1238) | 1:A:116:THR:H | 1:A:113:VAL:H | 19 | 0.11 |
| (1,1233) | 1:A:106:THR:H | 1:A:105:PRO:HG3 | 5 | 0.11 |
| (1,1180) | 1:A:45:LEU:H | 1:A:45:LEU:HB3 | 4 | 0.11 |
| (1,1180) | 1:A:45:LEU:H | 1:A:45:LEU:HB3 | 13 | 0.11 |
| (1,1173) | 1:A:62:GLY:H | 1:A:125:PHE:HB3 | 1 | 0.11 |
| (1,1172) | 1:A:125:PHE:HB2 | 1:A:62:GLY:H | 6 | 0.11 |
| (1,1172) | 1:A:125:PHE:HB2 | 1:A:62:GLY:H | 9 | 0.11 |
| (1,1054) | 1:A:47:ARG:HB2 | 1:A:47:ARG:H | 1 | 0.11 |
| (1,1013) | 1:A:116:THR:HG21 | 1:A:116:THR:H | 20 | 0.11 |
| (1,1013) | 1:A:116:THR:HG22 | 1:A:116:THR:H | 20 | 0.11 |
| (1,1013) | 1:A:116:THR:HG23 | 1:A:116:THR:H | 20 | 0.11 |

# 10 Dihedral-angle violation analysis (i)

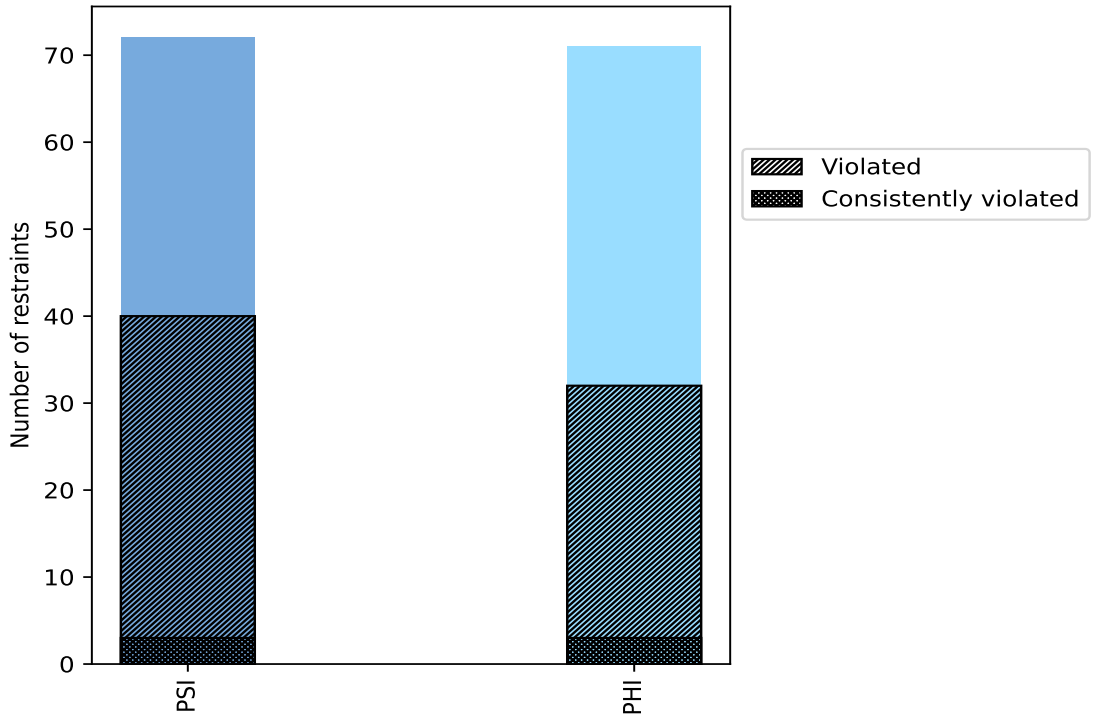
## 10.1 Summary of dihedral-angle violations (i)

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

| Angle type | Count | %[1] | Violated[3] | | | Consistently Violated[4] | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | Count | %[2] | %[1] | Count | %[2] | %[1] |
| PSI | 72 | 50.3 | 40 | 55.6 | 28.0 | 3 | 4.2 | 2.1 |
| PHI | 71 | 49.7 | 32 | 45.1 | 22.4 | 3 | 4.2 | 2.1 |
| Total | 143 | 100.0 | 72 | 50.3 | 50.3 | 6 | 4.2 | 4.2 |

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

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



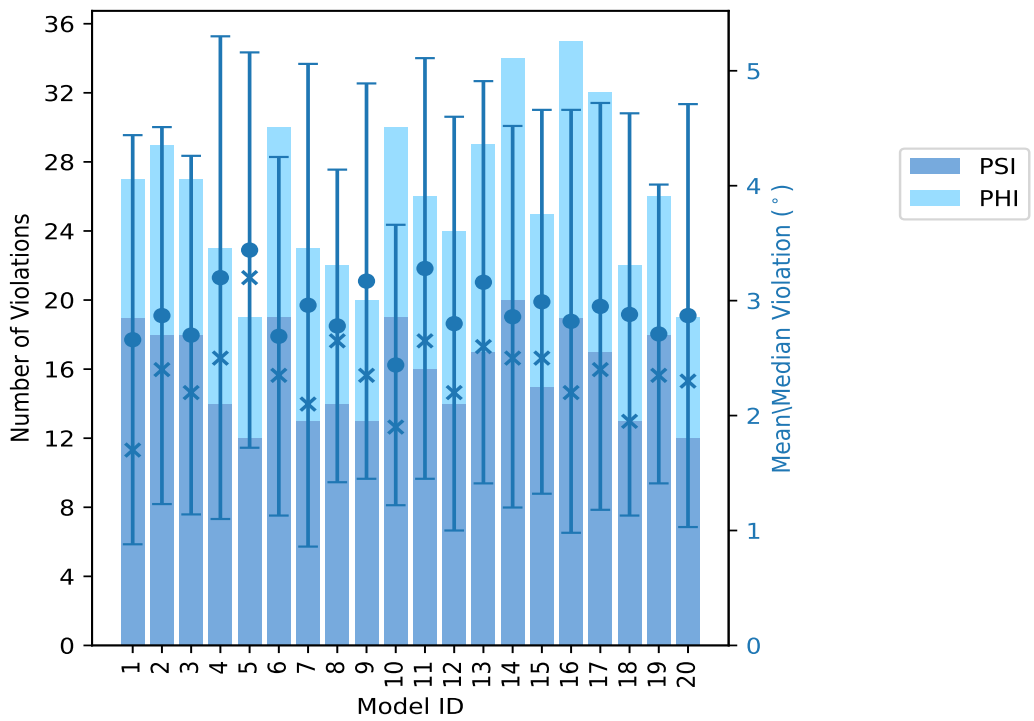

Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories

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

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

| Model ID | Number of violations | | | Mean (°) | Max (°) | SD (°) | Median (°) |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | PSI | PHI | Total | | | | |
| 1 | 19 | 8 | 27 | 2.66 | 7.9 | 1.78 | 1.7 |
| 2 | 18 | 11 | 29 | 2.87 | 7.7 | 1.64 | 2.4 |
| 3 | 18 | 9 | 27 | 2.7 | 7.5 | 1.56 | 2.2 |
| 4 | 14 | 9 | 23 | 3.2 | 9.8 | 2.1 | 2.5 |
| 5 | 12 | 7 | 19 | 3.44 | 6.6 | 1.72 | 3.2 |
| 6 | 19 | 11 | 30 | 2.69 | 8.0 | 1.56 | 2.35 |
| 7 | 13 | 10 | 23 | 2.96 | 10.0 | 2.1 | 2.1 |
| 8 | 14 | 8 | 22 | 2.78 | 6.5 | 1.36 | 2.65 |
| 9 | 13 | 7 | 20 | 3.17 | 7.1 | 1.72 | 2.35 |
| 10 | 19 | 11 | 30 | 2.44 | 6.1 | 1.22 | 1.9 |
| 11 | 16 | 10 | 26 | 3.28 | 8.1 | 1.83 | 2.65 |
| 12 | 14 | 10 | 24 | 2.8 | 7.6 | 1.8 | 2.2 |
| 13 | 17 | 12 | 29 | 3.16 | 6.8 | 1.75 | 2.6 |
| 14 | 20 | 14 | 34 | 2.86 | 8.7 | 1.66 | 2.5 |
| 15 | 15 | 10 | 25 | 2.99 | 7.9 | 1.67 | 2.5 |
| 16 | 19 | 16 | 35 | 2.82 | 7.5 | 1.84 | 2.2 |
| 17 | 17 | 15 | 32 | 2.95 | 8.7 | 1.77 | 2.4 |
| 18 | 13 | 9 | 22 | 2.88 | 8.0 | 1.75 | 1.95 |
| 19 | 18 | 8 | 26 | 2.71 | 5.5 | 1.3 | 2.35 |
| 20 | 12 | 7 | 19 | 2.87 | 8.0 | 1.84 | 2.3 |

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




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

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

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

| Number of violated restraints | | | Fraction of the ensemble | |
|---|---|---|---|---|
| PSI | PHI | Total | Count[1] | % |
| 7 | 7 | 14 | 1 | 5.0 |
| 6 | 5 | 11 | 2 | 10.0 |
| 2 | 3 | 5 | 3 | 15.0 |
| 2 | 4 | 6 | 4 | 20.0 |
| 2 | 1 | 3 | 5 | 25.0 |
| 0 | 0 | 0 | 6 | 30.0 |
| 1 | 2 | 3 | 7 | 35.0 |
| 5 | 1 | 6 | 8 | 40.0 |
| 2 | 1 | 3 | 9 | 45.0 |
| 0 | 3 | 3 | 10 | 50.0 |
| 2 | 0 | 2 | 11 | 55.0 |

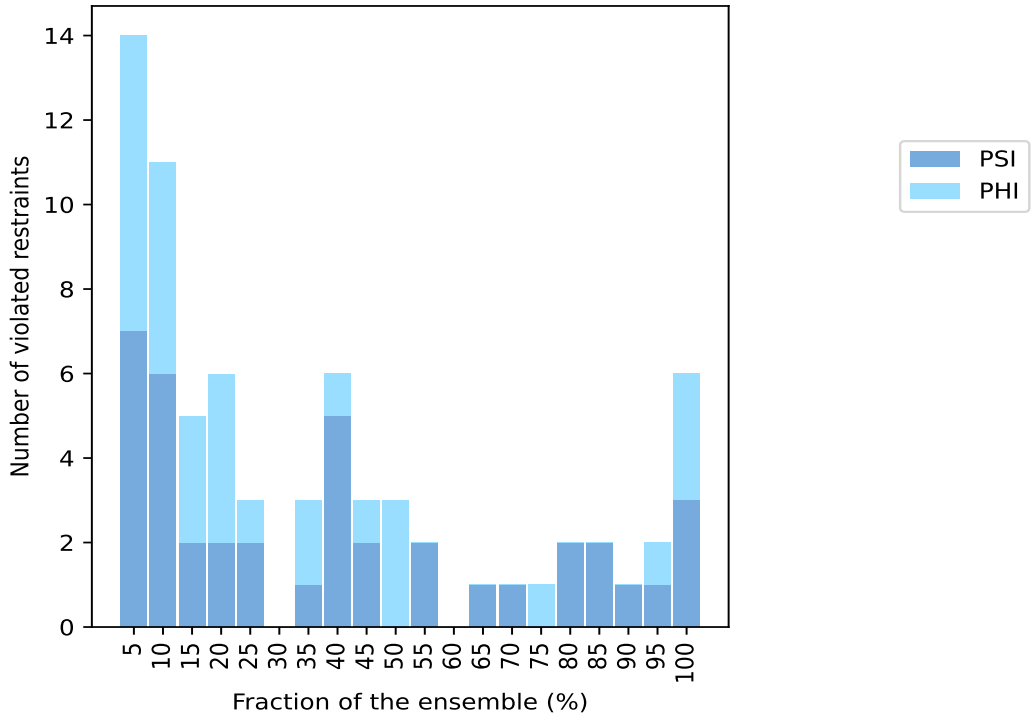
*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Number of violated restraints | | | Fraction of the ensemble | |
|---|---|---|---|---|
| PSI | PHI | Total | Count[1] | % |
| 0 | 0 | 0 | 12 | 60.0 |
| 1 | 0 | 1 | 13 | 65.0 |
| 1 | 0 | 1 | 14 | 70.0 |
| 0 | 1 | 1 | 15 | 75.0 |
| 2 | 0 | 2 | 16 | 80.0 |
| 2 | 0 | 2 | 17 | 85.0 |
| 1 | 0 | 1 | 18 | 90.0 |
| 1 | 1 | 2 | 19 | 95.0 |
| 3 | 3 | 6 | 20 | 100.0 |

[1] Number of models with violations

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

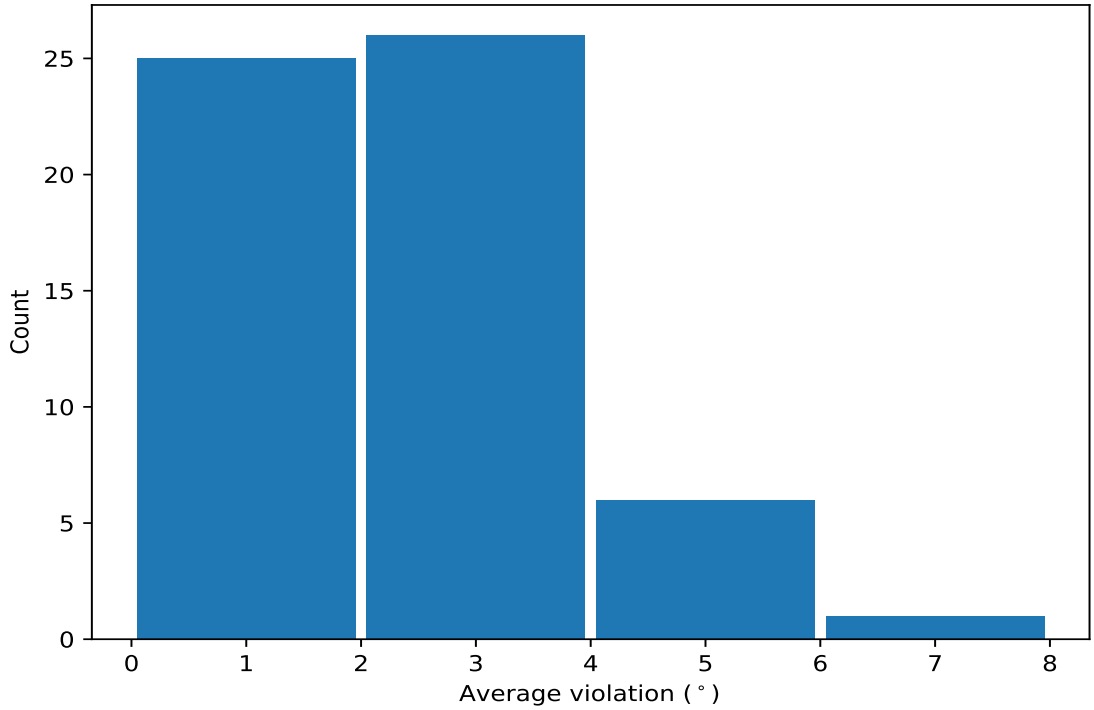



## 10.4 Most violated dihedral-angle restraints in the ensemble (i)

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

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

in the ensemble




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

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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Models[1] | Mean | SD[2] | Median |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,139) | 1:A:124:ASP:N | 1:A:124:ASP:CA | 1:A:124:ASP:C | 1:A:125:PHE:N | 20 | 6.36 | 1.77 | 6.7 |
| (1,119) | 1:A:112:TYR:N | 1:A:112:TYR:CA | 1:A:112:TYR:C | 1:A:113:VAL:N | 20 | 5.63 | 1.21 | 5.55 |
| (1,140) | 1:A:124:ASP:C | 1:A:125:PHE:N | 1:A:125:PHE:CA | 1:A:125:PHE:C | 20 | 4.66 | 1.31 | 4.5 |
| (1,121) | 1:A:113:VAL:N | 1:A:113:VAL:CA | 1:A:113:VAL:C | 1:A:114:ASN:N | 20 | 4.32 | 0.67 | 4.4 |
| (1,120) | 1:A:112:TYR:C | 1:A:113:VAL:N | 1:A:113:VAL:CA | 1:A:113:VAL:C | 20 | 4.04 | 1.0 | 3.8 |
| (1,90) | 1:A:92:ARG:C | 1:A:93:GLU:N | 1:A:93:GLU:CA | 1:A:93:GLU:C | 20 | 2.95 | 0.68 | 3.05 |
| (1,124) | 1:A:116:THR:C | 1:A:117:VAL:N | 1:A:117:VAL:CA | 1:A:117:VAL:C | 19 | 5.24 | 1.63 | 5.1 |
| (1,127) | 1:A:118:GLU:N | 1:A:118:GLU:CA | 1:A:118:GLU:C | 1:A:119:LEU:N | 19 | 2.51 | 0.93 | 2.3 |
| (1,143) | 1:A:126:SER:N | 1:A:126:SER:CA | 1:A:126:SER:C | 1:A:127:LEU:N | 18 | 2.18 | 0.65 | 2.1 |
| (1,22) | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:LYS:N | 17 | 3.86 | 1.43 | 4.1 |
| (1,123) | 1:A:116:THR:N | 1:A:116:THR:CA | 1:A:116:THR:C | 1:A:117:VAL:N | 17 | 2.68 | 0.91 | 2.7 |
| (1,99) | 1:A:97:LEU:N | 1:A:97:LEU:CA | 1:A:97:LEU:C | 1:A:98:VAL:N | 16 | 3.49 | 1.41 | 3.7 |
| (1,135) | 1:A:122:PRO:N | 1:A:122:PRO:CA | 1:A:122:PRO:C | 1:A:123:ILE:N | 16 | 2.33 | 0.6 | 2.45 |
| (1,96) | 1:A:95:GLN:C | 1:A:96:ALA:N | 1:A:96:ALA:CA | 1:A:96:ALA:C | 15 | 2.25 | 0.79 | 2.1 |
| (1,83) | 1:A:89:SER:N | 1:A:89:SER:CA | 1:A:89:SER:C | 1:A:90:LEU:N | 14 | 1.7 | 0.46 | 1.55 |
| (1,101) | 1:A:98:VAL:N | 1:A:98:VAL:CA | 1:A:98:VAL:C | 1:A:99:LYS:N | 13 | 1.77 | 0.52 | 1.5 |
| (1,29) | 1:A:52:PRO:N | 1:A:52:PRO:CA | 1:A:52:PRO:C | 1:A:53:LYS:N | 11 | 2.04 | 0.82 | 1.8 |
| (1,25) | 1:A:50:ARG:N | 1:A:50:ARG:CA | 1:A:50:ARG:C | 1:A:51:TYR:N | 11 | 1.86 | 0.49 | 1.8 |
| (1,52) | 1:A:64:GLY:C | 1:A:65:GLN:N | 1:A:65:GLN:CA | 1:A:65:GLN:C | 10 | 3.01 | 1.3 | 2.5 |
| (1,100) | 1:A:97:LEU:C | 1:A:98:VAL:N | 1:A:98:VAL:CA | 1:A:98:VAL:C | 10 | 1.89 | 0.52 | 1.95 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

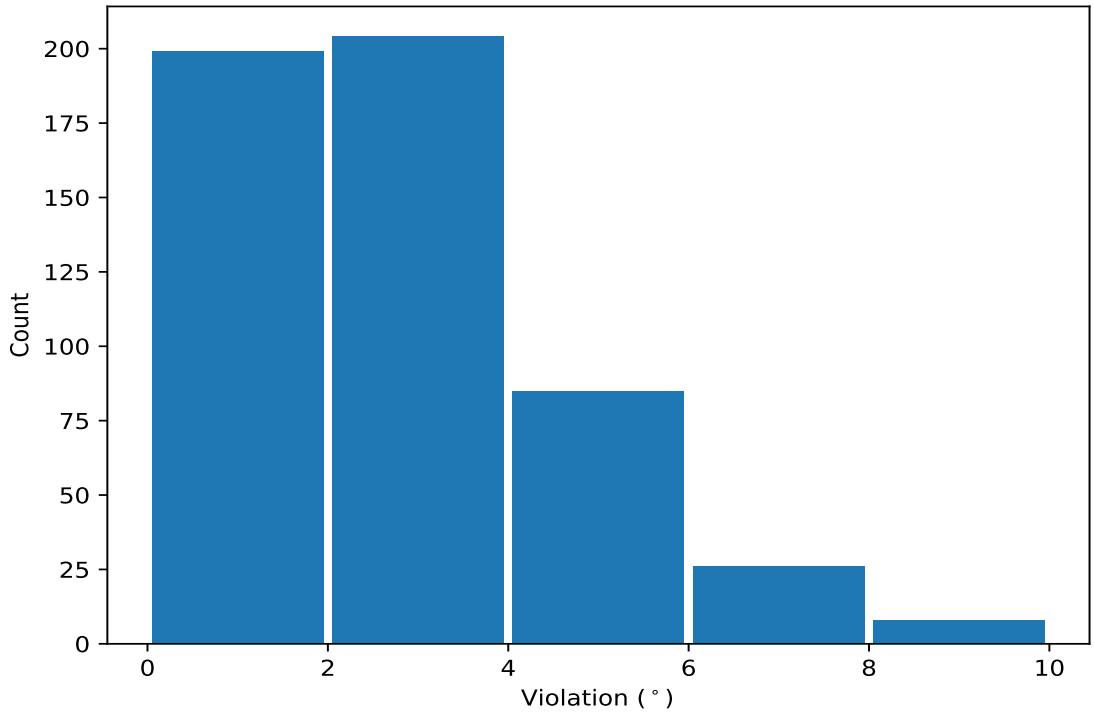
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Models[1] | Mean | SD[2] | Median |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,17) | 1:A:45:LEU:C | 1:A:46:ASN:N | 1:A:46:ASN:CA | 1:A:46:ASN:C | 10 | 1.46 | 0.33 | 1.4 |
| (1,14) | 1:A:44:ARG:N | 1:A:44:ARG:CA | 1:A:44:ARG:C | 1:A:45:LEU:N | 9 | 3.68 | 2.19 | 2.7 |
| (1,51) | 1:A:64:GLY:N | 1:A:64:GLY:CA | 1:A:64:GLY:C | 1:A:65:GLN:N | 9 | 2.36 | 0.99 | 2.1 |
| (1,88) | 1:A:91:ASP:C | 1:A:92:ARG:N | 1:A:92:ARG:CA | 1:A:92:ARG:C | 9 | 1.72 | 0.43 | 1.8 |
| (1,107) | 1:A:102:SER:N | 1:A:102:SER:CA | 1:A:102:SER:C | 1:A:103:PRO:N | 8 | 4.4 | 2.85 | 3.6 |
| (1,49) | 1:A:63:VAL:N | 1:A:63:VAL:CA | 1:A:63:VAL:C | 1:A:64:GLY:N | 8 | 2.26 | 0.68 | 2.5 |
| (1,125) | 1:A:117:VAL:N | 1:A:117:VAL:CA | 1:A:117:VAL:C | 1:A:118:GLU:N | 8 | 1.89 | 0.86 | 1.65 |
| (1,142) | 1:A:125:PHE:C | 1:A:126:SER:N | 1:A:126:SER:CA | 1:A:126:SER:C | 8 | 1.78 | 0.51 | 1.6 |
| (1,23) | 1:A:49:LYS:N | 1:A:49:LYS:CA | 1:A:49:LYS:C | 1:A:50:ARG:N | 8 | 1.52 | 0.48 | 1.3 |
| (1,133) | 1:A:121:LEU:N | 1:A:121:LEU:CA | 1:A:121:LEU:C | 1:A:122:PRO:N | 8 | 1.3 | 0.29 | 1.2 |
| (1,91) | 1:A:93:GLU:N | 1:A:93:GLU:CA | 1:A:93:GLU:C | 1:A:94:ILE:N | 7 | 2.37 | 1.17 | 2.1 |
| (1,1) | 1:A:37:TRP:C | 1:A:38:ARG:N | 1:A:38:ARG:CA | 1:A:38:ARG:C | 7 | 1.51 | 0.2 | 1.5 |
| (1,46) | 1:A:61:GLN:C | 1:A:62:GLY:N | 1:A:62:GLY:CA | 1:A:62:GLY:C | 7 | 1.26 | 0.16 | 1.2 |
| (1,31) | 1:A:53:LYS:N | 1:A:53:LYS:CA | 1:A:53:LYS:C | 1:A:54:ASP:N | 5 | 2.52 | 0.63 | 2.7 |
| (1,137) | 1:A:123:ILE:N | 1:A:123:ILE:CA | 1:A:123:ILE:C | 1:A:124:ASP:N | 5 | 2.0 | 0.59 | 2.1 |
| (1,122) | 1:A:115:GLY:C | 1:A:116:THR:N | 1:A:116:THR:CA | 1:A:116:THR:C | 5 | 1.54 | 0.46 | 1.4 |
| (1,97) | 1:A:96:ALA:N | 1:A:96:ALA:CA | 1:A:96:ALA:C | 1:A:97:LEU:N | 4 | 2.8 | 0.73 | 2.65 |
| (1,98) | 1:A:96:ALA:C | 1:A:97:LEU:N | 1:A:97:LEU:CA | 1:A:97:LEU:C | 4 | 2.0 | 0.45 | 1.85 |
| (1,32) | 1:A:53:LYS:C | 1:A:54:ASP:N | 1:A:54:ASP:CA | 1:A:54:ASP:C | 4 | 1.68 | 0.51 | 1.5 |
| (1,37) | 1:A:56:LEU:N | 1:A:56:LEU:CA | 1:A:56:LEU:C | 1:A:57:ARG:N | 4 | 1.68 | 0.22 | 1.65 |
| (1,86) | 1:A:90:LEU:C | 1:A:91:ASP:N | 1:A:91:ASP:CA | 1:A:91:ASP:C | 4 | 1.45 | 0.21 | 1.55 |
| (1,48) | 1:A:62:GLY:C | 1:A:63:VAL:N | 1:A:63:VAL:CA | 1:A:63:VAL:C | 4 | 1.2 | 0.1 | 1.2 |
| (1,109) | 1:A:103:PRO:N | 1:A:103:PRO:CA | 1:A:103:PRO:C | 1:A:104:LEU:N | 3 | 2.5 | 1.19 | 2.4 |
| (1,94) | 1:A:94:ILE:C | 1:A:95:GLN:N | 1:A:95:GLN:CA | 1:A:95:GLN:C | 3 | 2.27 | 0.54 | 2.6 |
| (1,43) | 1:A:60:ARG:N | 1:A:60:ARG:CA | 1:A:60:ARG:C | 1:A:61:GLN:N | 3 | 2.0 | 0.29 | 1.9 |
| (1,84) | 1:A:89:SER:C | 1:A:90:LEU:N | 1:A:90:LEU:CA | 1:A:90:LEU:C | 3 | 2.0 | 0.22 | 1.9 |
| (1,13) | 1:A:43:GLY:C | 1:A:44:ARG:N | 1:A:44:ARG:CA | 1:A:44:ARG:C | 3 | 1.37 | 0.31 | 1.2 |
| (1,12) | 1:A:43:GLY:N | 1:A:43:GLY:CA | 1:A:43:GLY:C | 1:A:44:ARG:N | 2 | 2.5 | 0.1 | 2.5 |
| (1,110) | 1:A:103:PRO:C | 1:A:104:LEU:N | 1:A:104:LEU:CA | 1:A:104:LEU:C | 2 | 2.05 | 0.35 | 2.05 |
| (1,67) | 1:A:72:ARG:N | 1:A:72:ARG:CA | 1:A:72:ARG:C | 1:A:73:GLN:N | 2 | 2.0 | 0.6 | 2.0 |
| (1,76) | 1:A:78:ALA:C | 1:A:79:VAL:N | 1:A:79:VAL:CA | 1:A:79:VAL:C | 2 | 2.0 | 0.2 | 2.0 |
| (1,82) | 1:A:88:PRO:C | 1:A:89:SER:N | 1:A:89:SER:CA | 1:A:89:SER:C | 2 | 1.8 | 0.5 | 1.8 |
| (1,55) | 1:A:66:VAL:N | 1:A:66:VAL:CA | 1:A:66:VAL:C | 1:A:67:ARG:N | 2 | 1.6 | 0.2 | 1.6 |
| (1,34) | 1:A:54:ASP:C | 1:A:55:ALA:N | 1:A:55:ALA:CA | 1:A:55:ALA:C | 2 | 1.5 | 0.3 | 1.5 |
| (1,16) | 1:A:45:LEU:N | 1:A:45:LEU:CA | 1:A:45:LEU:C | 1:A:46:ASN:N | 2 | 1.35 | 0.15 | 1.35 |
| (1,44) | 1:A:60:ARG:C | 1:A:61:GLN:N | 1:A:61:GLN:CA | 1:A:61:GLN:C | 2 | 1.3 | 0.1 | 1.3 |
| (1,45) | 1:A:61:GLN:N | 1:A:61:GLN:CA | 1:A:61:GLN:C | 1:A:62:GLY:N | 2 | 1.25 | 0.15 | 1.25 |
| (1,87) | 1:A:91:ASP:N | 1:A:91:ASP:CA | 1:A:91:ASP:C | 1:A:92:ARG:N | 2 | 1.25 | 0.15 | 1.25 |

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

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

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

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




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

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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,139) | 1:A:124:ASP:N | 1:A:124:ASP:CA | 1:A:124:ASP:C | 1:A:125:PHE:N | 7 | 10.0 |
| (1,107) | 1:A:102:SER:N | 1:A:102:SER:CA | 1:A:102:SER:C | 1:A:103:PRO:N | 4 | 9.8 |
| (1,139) | 1:A:124:ASP:N | 1:A:124:ASP:CA | 1:A:124:ASP:C | 1:A:125:PHE:N | 17 | 8.7 |
| (1,124) | 1:A:116:THR:C | 1:A:117:VAL:N | 1:A:117:VAL:CA | 1:A:117:VAL:C | 14 | 8.7 |
| (1,139) | 1:A:124:ASP:N | 1:A:124:ASP:CA | 1:A:124:ASP:C | 1:A:125:PHE:N | 11 | 8.1 |
| (1,139) | 1:A:124:ASP:N | 1:A:124:ASP:CA | 1:A:124:ASP:C | 1:A:125:PHE:N | 18 | 8.0 |
| (1,124) | 1:A:116:THR:C | 1:A:117:VAL:N | 1:A:117:VAL:CA | 1:A:117:VAL:C | 6 | 8.0 |
| (1,119) | 1:A:112:TYR:N | 1:A:112:TYR:CA | 1:A:112:TYR:C | 1:A:113:VAL:N | 20 | 8.0 |
| (1,139) | 1:A:124:ASP:N | 1:A:124:ASP:CA | 1:A:124:ASP:C | 1:A:125:PHE:N | 15 | 7.9 |
| (1,124) | 1:A:116:THR:C | 1:A:117:VAL:N | 1:A:117:VAL:CA | 1:A:117:VAL:C | 1 | 7.9 |
| (1,107) | 1:A:102:SER:N | 1:A:102:SER:CA | 1:A:102:SER:C | 1:A:103:PRO:N | 2 | 7.7 |
| (1,119) | 1:A:112:TYR:N | 1:A:112:TYR:CA | 1:A:112:TYR:C | 1:A:113:VAL:N | 12 | 7.6 |
| (1,14) | 1:A:44:ARG:N | 1:A:44:ARG:CA | 1:A:44:ARG:C | 1:A:45:LEU:N | 16 | 7.5 |
| (1,139) | 1:A:124:ASP:N | 1:A:124:ASP:CA | 1:A:124:ASP:C | 1:A:125:PHE:N | 3 | 7.5 |
| (1,139) | 1:A:124:ASP:N | 1:A:124:ASP:CA | 1:A:124:ASP:C | 1:A:125:PHE:N | 12 | 7.5 |
| (1,139) | 1:A:124:ASP:N | 1:A:124:ASP:CA | 1:A:124:ASP:C | 1:A:125:PHE:N | 1 | 7.3 |
| (1,22) | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:LYS:N | 7 | 7.1 |
| (1,140) | 1:A:124:ASP:C | 1:A:125:PHE:N | 1:A:125:PHE:CA | 1:A:125:PHE:C | 9 | 7.1 |
| (1,139) | 1:A:124:ASP:N | 1:A:124:ASP:CA | 1:A:124:ASP:C | 1:A:125:PHE:N | 14 | 7.1 |
| (1,119) | 1:A:112:TYR:N | 1:A:112:TYR:CA | 1:A:112:TYR:C | 1:A:113:VAL:N | 16 | 7.1 |
| (1,140) | 1:A:124:ASP:C | 1:A:125:PHE:N | 1:A:125:PHE:CA | 1:A:125:PHE:C | 15 | 6.9 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,119) | 1:A:112:TYR:N | 1:A:112:TYR:CA | 1:A:112:TYR:C | 1:A:113:VAL:N | 11 | 6.9 |
| (1,139) | 1:A:124:ASP:N | 1:A:124:ASP:CA | 1:A:124:ASP:C | 1:A:125:PHE:N | 13 | 6.8 |
| (1,14) | 1:A:44:ARG:N | 1:A:44:ARG:CA | 1:A:44:ARG:C | 1:A:45:LEU:N | 5 | 6.6 |
| (1,139) | 1:A:124:ASP:N | 1:A:124:ASP:CA | 1:A:124:ASP:C | 1:A:125:PHE:N | 16 | 6.6 |
| (1,119) | 1:A:112:TYR:N | 1:A:112:TYR:CA | 1:A:112:TYR:C | 1:A:113:VAL:N | 2 | 6.6 |
| (1,124) | 1:A:116:THR:C | 1:A:117:VAL:N | 1:A:117:VAL:CA | 1:A:117:VAL:C | 8 | 6.5 |
| (1,99) | 1:A:97:LEU:N | 1:A:97:LEU:CA | 1:A:97:LEU:C | 1:A:98:VAL:N | 13 | 6.4 |
| (1,119) | 1:A:112:TYR:N | 1:A:112:TYR:CA | 1:A:112:TYR:C | 1:A:113:VAL:N | 17 | 6.4 |
| (1,119) | 1:A:112:TYR:N | 1:A:112:TYR:CA | 1:A:112:TYR:C | 1:A:113:VAL:N | 13 | 6.3 |
| (1,140) | 1:A:124:ASP:C | 1:A:125:PHE:N | 1:A:125:PHE:CA | 1:A:125:PHE:C | 7 | 6.2 |
| (1,22) | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:LYS:N | 10 | 6.1 |
| (1,119) | 1:A:112:TYR:N | 1:A:112:TYR:CA | 1:A:112:TYR:C | 1:A:113:VAL:N | 9 | 6.1 |
| (1,124) | 1:A:116:THR:C | 1:A:117:VAL:N | 1:A:117:VAL:CA | 1:A:117:VAL:C | 5 | 6.0 |
| (1,140) | 1:A:124:ASP:C | 1:A:125:PHE:N | 1:A:125:PHE:CA | 1:A:125:PHE:C | 13 | 5.9 |
| (1,120) | 1:A:112:TYR:C | 1:A:113:VAL:N | 1:A:113:VAL:CA | 1:A:113:VAL:C | 16 | 5.9 |
| (1,124) | 1:A:116:THR:C | 1:A:117:VAL:N | 1:A:117:VAL:CA | 1:A:117:VAL:C | 16 | 5.8 |
| (1,119) | 1:A:112:TYR:N | 1:A:112:TYR:CA | 1:A:112:TYR:C | 1:A:113:VAL:N | 5 | 5.8 |
| (1,140) | 1:A:124:ASP:C | 1:A:125:PHE:N | 1:A:125:PHE:CA | 1:A:125:PHE:C | 17 | 5.7 |
| (1,14) | 1:A:44:ARG:N | 1:A:44:ARG:CA | 1:A:44:ARG:C | 1:A:45:LEU:N | 4 | 5.7 |
| (1,120) | 1:A:112:TYR:C | 1:A:113:VAL:N | 1:A:113:VAL:CA | 1:A:113:VAL:C | 11 | 5.7 |
| (1,140) | 1:A:124:ASP:C | 1:A:125:PHE:N | 1:A:125:PHE:CA | 1:A:125:PHE:C | 11 | 5.6 |
| (1,139) | 1:A:124:ASP:N | 1:A:124:ASP:CA | 1:A:124:ASP:C | 1:A:125:PHE:N | 6 | 5.6 |
| (1,124) | 1:A:116:THR:C | 1:A:117:VAL:N | 1:A:117:VAL:CA | 1:A:117:VAL:C | 11 | 5.6 |
| (1,119) | 1:A:112:TYR:N | 1:A:112:TYR:CA | 1:A:112:TYR:C | 1:A:113:VAL:N | 6 | 5.6 |
| (1,52) | 1:A:64:GLY:C | 1:A:65:GLN:N | 1:A:65:GLN:CA | 1:A:65:GLN:C | 13 | 5.5 |
| (1,139) | 1:A:124:ASP:N | 1:A:124:ASP:CA | 1:A:124:ASP:C | 1:A:125:PHE:N | 4 | 5.5 |
| (1,120) | 1:A:112:TYR:C | 1:A:113:VAL:N | 1:A:113:VAL:CA | 1:A:113:VAL:C | 20 | 5.5 |
| (1,119) | 1:A:112:TYR:N | 1:A:112:TYR:CA | 1:A:112:TYR:C | 1:A:113:VAL:N | 3 | 5.5 |
| (1,119) | 1:A:112:TYR:N | 1:A:112:TYR:CA | 1:A:112:TYR:C | 1:A:113:VAL:N | 19 | 5.5 |
| (1,99) | 1:A:97:LEU:N | 1:A:97:LEU:CA | 1:A:97:LEU:C | 1:A:98:VAL:N | 2 | 5.4 |
| (1,139) | 1:A:124:ASP:N | 1:A:124:ASP:CA | 1:A:124:ASP:C | 1:A:125:PHE:N | 5 | 5.4 |
| (1,121) | 1:A:113:VAL:N | 1:A:113:VAL:CA | 1:A:113:VAL:C | 1:A:114:ASN:N | 18 | 5.4 |
| (1,22) | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:LYS:N | 17 | 5.3 |
| (1,99) | 1:A:97:LEU:N | 1:A:97:LEU:CA | 1:A:97:LEU:C | 1:A:98:VAL:N | 16 | 5.2 |
| (1,140) | 1:A:124:ASP:C | 1:A:125:PHE:N | 1:A:125:PHE:CA | 1:A:125:PHE:C | 4 | 5.2 |
| (1,140) | 1:A:124:ASP:C | 1:A:125:PHE:N | 1:A:125:PHE:CA | 1:A:125:PHE:C | 5 | 5.2 |
| (1,124) | 1:A:116:THR:C | 1:A:117:VAL:N | 1:A:117:VAL:CA | 1:A:117:VAL:C | 17 | 5.2 |
| (1,121) | 1:A:113:VAL:N | 1:A:113:VAL:CA | 1:A:113:VAL:C | 1:A:114:ASN:N | 1 | 5.2 |
| (1,120) | 1:A:112:TYR:C | 1:A:113:VAL:N | 1:A:113:VAL:CA | 1:A:113:VAL:C | 12 | 5.2 |
| (1,91) | 1:A:93:GLU:N | 1:A:93:GLU:CA | 1:A:93:GLU:C | 1:A:94:ILE:N | 19 | 5.1 |
| (1,124) | 1:A:116:THR:C | 1:A:117:VAL:N | 1:A:117:VAL:CA | 1:A:117:VAL:C | 15 | 5.1 |
| (1,124) | 1:A:116:THR:C | 1:A:117:VAL:N | 1:A:117:VAL:CA | 1:A:117:VAL:C | 20 | 5.1 |
| (1,121) | 1:A:113:VAL:N | 1:A:113:VAL:CA | 1:A:113:VAL:C | 1:A:114:ASN:N | 9 | 5.1 |
| (1,121) | 1:A:113:VAL:N | 1:A:113:VAL:CA | 1:A:113:VAL:C | 1:A:114:ASN:N | 14 | 5.1 |
| (1,120) | 1:A:112:TYR:C | 1:A:113:VAL:N | 1:A:113:VAL:CA | 1:A:113:VAL:C | 9 | 5.1 |
| (1,124) | 1:A:116:THR:C | 1:A:117:VAL:N | 1:A:117:VAL:CA | 1:A:117:VAL:C | 2 | 5.0 |
| (1,119) | 1:A:112:TYR:N | 1:A:112:TYR:CA | 1:A:112:TYR:C | 1:A:113:VAL:N | 18 | 5.0 |
| (1,107) | 1:A:102:SER:N | 1:A:102:SER:CA | 1:A:102:SER:C | 1:A:103:PRO:N | 16 | 5.0 |
| (1,140) | 1:A:124:ASP:C | 1:A:125:PHE:N | 1:A:125:PHE:CA | 1:A:125:PHE:C | 18 | 4.9 |
| (1,139) | 1:A:124:ASP:N | 1:A:124:ASP:CA | 1:A:124:ASP:C | 1:A:125:PHE:N | 9 | 4.9 |
| (1,121) | 1:A:113:VAL:N | 1:A:113:VAL:CA | 1:A:113:VAL:C | 1:A:114:ASN:N | 3 | 4.9 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,121) | 1:A:113:VAL:N | 1:A:113:VAL:CA | 1:A:113:VAL:C | 1:A:114:ASN:N | 4 | 4.9 |
| (1,107) | 1:A:102:SER:N | 1:A:102:SER:CA | 1:A:102:SER:C | 1:A:103:PRO:N | 5 | 4.9 |
| (1,127) | 1:A:118:GLU:N | 1:A:118:GLU:CA | 1:A:118:GLU:C | 1:A:119:LEU:N | 14 | 4.8 |
| (1,124) | 1:A:116:THR:C | 1:A:117:VAL:N | 1:A:117:VAL:CA | 1:A:117:VAL:C | 13 | 4.8 |
| (1,124) | 1:A:116:THR:C | 1:A:117:VAL:N | 1:A:117:VAL:CA | 1:A:117:VAL:C | 19 | 4.8 |
| (1,119) | 1:A:112:TYR:N | 1:A:112:TYR:CA | 1:A:112:TYR:C | 1:A:113:VAL:N | 4 | 4.8 |
| (1,52) | 1:A:64:GLY:C | 1:A:65:GLN:N | 1:A:65:GLN:CA | 1:A:65:GLN:C | 11 | 4.7 |
| (1,140) | 1:A:124:ASP:C | 1:A:125:PHE:N | 1:A:125:PHE:CA | 1:A:125:PHE:C | 14 | 4.7 |
| (1,139) | 1:A:124:ASP:N | 1:A:124:ASP:CA | 1:A:124:ASP:C | 1:A:125:PHE:N | 2 | 4.7 |
| (1,124) | 1:A:116:THR:C | 1:A:117:VAL:N | 1:A:117:VAL:CA | 1:A:117:VAL:C | 3 | 4.7 |
| (1,121) | 1:A:113:VAL:N | 1:A:113:VAL:CA | 1:A:113:VAL:C | 1:A:114:ASN:N | 13 | 4.7 |
| (1,121) | 1:A:113:VAL:N | 1:A:113:VAL:CA | 1:A:113:VAL:C | 1:A:114:ASN:N | 17 | 4.7 |
| (1,119) | 1:A:112:TYR:N | 1:A:112:TYR:CA | 1:A:112:TYR:C | 1:A:113:VAL:N | 15 | 4.7 |
| (1,99) | 1:A:97:LEU:N | 1:A:97:LEU:CA | 1:A:97:LEU:C | 1:A:98:VAL:N | 9 | 4.6 |
| (1,121) | 1:A:113:VAL:N | 1:A:113:VAL:CA | 1:A:113:VAL:C | 1:A:114:ASN:N | 6 | 4.6 |
| (1,121) | 1:A:113:VAL:N | 1:A:113:VAL:CA | 1:A:113:VAL:C | 1:A:114:ASN:N | 8 | 4.6 |
| (1,120) | 1:A:112:TYR:C | 1:A:113:VAL:N | 1:A:113:VAL:CA | 1:A:113:VAL:C | 13 | 4.6 |
| (1,22) | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:LYS:N | 19 | 4.5 |
| (1,139) | 1:A:124:ASP:N | 1:A:124:ASP:CA | 1:A:124:ASP:C | 1:A:125:PHE:N | 20 | 4.5 |
| (1,119) | 1:A:112:TYR:N | 1:A:112:TYR:CA | 1:A:112:TYR:C | 1:A:113:VAL:N | 10 | 4.5 |
| (1,120) | 1:A:112:TYR:C | 1:A:113:VAL:N | 1:A:113:VAL:CA | 1:A:113:VAL:C | 3 | 4.4 |
| (1,120) | 1:A:112:TYR:C | 1:A:113:VAL:N | 1:A:113:VAL:CA | 1:A:113:VAL:C | 17 | 4.4 |
| (1,119) | 1:A:112:TYR:N | 1:A:112:TYR:CA | 1:A:112:TYR:C | 1:A:113:VAL:N | 8 | 4.4 |
| (1,51) | 1:A:64:GLY:N | 1:A:64:GLY:CA | 1:A:64:GLY:C | 1:A:65:GLN:N | 13 | 4.3 |
| (1,22) | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:LYS:N | 11 | 4.3 |
| (1,22) | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:LYS:N | 15 | 4.3 |
| (1,140) | 1:A:124:ASP:C | 1:A:125:PHE:N | 1:A:125:PHE:CA | 1:A:125:PHE:C | 6 | 4.3 |
| (1,140) | 1:A:124:ASP:C | 1:A:125:PHE:N | 1:A:125:PHE:CA | 1:A:125:PHE:C | 19 | 4.3 |
| (1,124) | 1:A:116:THR:C | 1:A:117:VAL:N | 1:A:117:VAL:CA | 1:A:117:VAL:C | 18 | 4.3 |
| (1,119) | 1:A:112:TYR:N | 1:A:112:TYR:CA | 1:A:112:TYR:C | 1:A:113:VAL:N | 14 | 4.3 |
| (1,22) | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:LYS:N | 5 | 4.2 |
| (1,22) | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:LYS:N | 18 | 4.2 |
| (1,140) | 1:A:124:ASP:C | 1:A:125:PHE:N | 1:A:125:PHE:CA | 1:A:125:PHE:C | 10 | 4.2 |
| (1,121) | 1:A:113:VAL:N | 1:A:113:VAL:CA | 1:A:113:VAL:C | 1:A:114:ASN:N | 11 | 4.2 |
| (1,99) | 1:A:97:LEU:N | 1:A:97:LEU:CA | 1:A:97:LEU:C | 1:A:98:VAL:N | 12 | 4.1 |
| (1,52) | 1:A:64:GLY:C | 1:A:65:GLN:N | 1:A:65:GLN:CA | 1:A:65:GLN:C | 3 | 4.1 |
| (1,22) | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:LYS:N | 4 | 4.1 |
| (1,140) | 1:A:124:ASP:C | 1:A:125:PHE:N | 1:A:125:PHE:CA | 1:A:125:PHE:C | 1 | 4.1 |
| (1,140) | 1:A:124:ASP:C | 1:A:125:PHE:N | 1:A:125:PHE:CA | 1:A:125:PHE:C | 16 | 4.1 |
| (1,139) | 1:A:124:ASP:N | 1:A:124:ASP:CA | 1:A:124:ASP:C | 1:A:125:PHE:N | 8 | 4.1 |
| (1,123) | 1:A:116:THR:N | 1:A:116:THR:CA | 1:A:116:THR:C | 1:A:117:VAL:N | 1 | 4.1 |
| (1,22) | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:LYS:N | 12 | 4.0 |
| (1,127) | 1:A:118:GLU:N | 1:A:118:GLU:CA | 1:A:118:GLU:C | 1:A:119:LEU:N | 17 | 4.0 |
| (1,123) | 1:A:116:THR:N | 1:A:116:THR:CA | 1:A:116:THR:C | 1:A:117:VAL:N | 17 | 4.0 |
| (1,121) | 1:A:113:VAL:N | 1:A:113:VAL:CA | 1:A:113:VAL:C | 1:A:114:ASN:N | 2 | 4.0 |
| (1,120) | 1:A:112:TYR:C | 1:A:113:VAL:N | 1:A:113:VAL:CA | 1:A:113:VAL:C | 19 | 4.0 |
| (1,109) | 1:A:103:PRO:N | 1:A:103:PRO:CA | 1:A:103:PRO:C | 1:A:104:LEU:N | 4 | 4.0 |
| (1,99) | 1:A:97:LEU:N | 1:A:97:LEU:CA | 1:A:97:LEU:C | 1:A:98:VAL:N | 20 | 3.9 |
| (1,90) | 1:A:92:ARG:C | 1:A:93:GLU:N | 1:A:93:GLU:CA | 1:A:93:GLU:C | 1 | 3.9 |
| (1,29) | 1:A:52:PRO:N | 1:A:52:PRO:CA | 1:A:52:PRO:C | 1:A:53:LYS:N | 9 | 3.9 |
| (1,127) | 1:A:118:GLU:N | 1:A:118:GLU:CA | 1:A:118:GLU:C | 1:A:119:LEU:N | 13 | 3.9 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,121) | 1:A:113:VAL:N | 1:A:113:VAL:CA | 1:A:113:VAL:C | 1:A:114:ASN:N | 15 | 3.9 |
| (1,121) | 1:A:113:VAL:N | 1:A:113:VAL:CA | 1:A:113:VAL:C | 1:A:114:ASN:N | 19 | 3.9 |
| (1,120) | 1:A:112:TYR:C | 1:A:113:VAL:N | 1:A:113:VAL:CA | 1:A:113:VAL:C | 5 | 3.9 |
| (1,119) | 1:A:112:TYR:N | 1:A:112:TYR:CA | 1:A:112:TYR:C | 1:A:113:VAL:N | 7 | 3.9 |
| (1,99) | 1:A:97:LEU:N | 1:A:97:LEU:CA | 1:A:97:LEU:C | 1:A:98:VAL:N | 4 | 3.8 |
| (1,99) | 1:A:97:LEU:N | 1:A:97:LEU:CA | 1:A:97:LEU:C | 1:A:98:VAL:N | 10 | 3.8 |
| (1,97) | 1:A:96:ALA:N | 1:A:96:ALA:CA | 1:A:96:ALA:C | 1:A:97:LEU:N | 11 | 3.8 |
| (1,96) | 1:A:95:GLN:C | 1:A:96:ALA:N | 1:A:96:ALA:CA | 1:A:96:ALA:C | 1 | 3.8 |
| (1,90) | 1:A:92:ARG:C | 1:A:93:GLU:N | 1:A:93:GLU:CA | 1:A:93:GLU:C | 10 | 3.8 |
| (1,90) | 1:A:92:ARG:C | 1:A:93:GLU:N | 1:A:93:GLU:CA | 1:A:93:GLU:C | 18 | 3.8 |
| (1,143) | 1:A:126:SER:N | 1:A:126:SER:CA | 1:A:126:SER:C | 1:A:127:LEU:N | 2 | 3.8 |
| (1,139) | 1:A:124:ASP:N | 1:A:124:ASP:CA | 1:A:124:ASP:C | 1:A:125:PHE:N | 10 | 3.8 |
| (1,125) | 1:A:117:VAL:N | 1:A:117:VAL:CA | 1:A:117:VAL:C | 1:A:118:GLU:N | 14 | 3.8 |
| (1,121) | 1:A:113:VAL:N | 1:A:113:VAL:CA | 1:A:113:VAL:C | 1:A:114:ASN:N | 10 | 3.8 |
| (1,123) | 1:A:116:THR:N | 1:A:116:THR:CA | 1:A:116:THR:C | 1:A:117:VAL:N | 8 | 3.7 |
| (1,121) | 1:A:113:VAL:N | 1:A:113:VAL:CA | 1:A:113:VAL:C | 1:A:114:ASN:N | 12 | 3.7 |
| (1,120) | 1:A:112:TYR:C | 1:A:113:VAL:N | 1:A:113:VAL:CA | 1:A:113:VAL:C | 2 | 3.7 |
| (1,99) | 1:A:97:LEU:N | 1:A:97:LEU:CA | 1:A:97:LEU:C | 1:A:98:VAL:N | 15 | 3.6 |
| (1,96) | 1:A:95:GLN:C | 1:A:96:ALA:N | 1:A:96:ALA:CA | 1:A:96:ALA:C | 7 | 3.6 |
| (1,120) | 1:A:112:TYR:C | 1:A:113:VAL:N | 1:A:113:VAL:CA | 1:A:113:VAL:C | 4 | 3.6 |
| (1,120) | 1:A:112:TYR:C | 1:A:113:VAL:N | 1:A:113:VAL:CA | 1:A:113:VAL:C | 8 | 3.6 |
| (1,120) | 1:A:112:TYR:C | 1:A:113:VAL:N | 1:A:113:VAL:CA | 1:A:113:VAL:C | 10 | 3.6 |
| (1,119) | 1:A:112:TYR:N | 1:A:112:TYR:CA | 1:A:112:TYR:C | 1:A:113:VAL:N | 1 | 3.6 |
| (1,90) | 1:A:92:ARG:C | 1:A:93:GLU:N | 1:A:93:GLU:CA | 1:A:93:GLU:C | 8 | 3.5 |
| (1,90) | 1:A:92:ARG:C | 1:A:93:GLU:N | 1:A:93:GLU:CA | 1:A:93:GLU:C | 9 | 3.5 |
| (1,90) | 1:A:92:ARG:C | 1:A:93:GLU:N | 1:A:93:GLU:CA | 1:A:93:GLU:C | 17 | 3.5 |
| (1,22) | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:LYS:N | 8 | 3.5 |
| (1,22) | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:LYS:N | 13 | 3.5 |
| (1,123) | 1:A:116:THR:N | 1:A:116:THR:CA | 1:A:116:THR:C | 1:A:117:VAL:N | 6 | 3.5 |
| (1,121) | 1:A:113:VAL:N | 1:A:113:VAL:CA | 1:A:113:VAL:C | 1:A:114:ASN:N | 7 | 3.5 |
| (1,121) | 1:A:113:VAL:N | 1:A:113:VAL:CA | 1:A:113:VAL:C | 1:A:114:ASN:N | 20 | 3.5 |
| (1,52) | 1:A:64:GLY:C | 1:A:65:GLN:N | 1:A:65:GLN:CA | 1:A:65:GLN:C | 18 | 3.4 |
| (1,51) | 1:A:64:GLY:N | 1:A:64:GLY:CA | 1:A:64:GLY:C | 1:A:65:GLN:N | 11 | 3.4 |
| (1,140) | 1:A:124:ASP:C | 1:A:125:PHE:N | 1:A:125:PHE:CA | 1:A:125:PHE:C | 3 | 3.4 |
| (1,123) | 1:A:116:THR:N | 1:A:116:THR:CA | 1:A:116:THR:C | 1:A:117:VAL:N | 12 | 3.4 |
| (1,121) | 1:A:113:VAL:N | 1:A:113:VAL:CA | 1:A:113:VAL:C | 1:A:114:ASN:N | 5 | 3.4 |
| (1,120) | 1:A:112:TYR:C | 1:A:113:VAL:N | 1:A:113:VAL:CA | 1:A:113:VAL:C | 15 | 3.4 |
| (1,90) | 1:A:92:ARG:C | 1:A:93:GLU:N | 1:A:93:GLU:CA | 1:A:93:GLU:C | 20 | 3.3 |
| (1,140) | 1:A:124:ASP:C | 1:A:125:PHE:N | 1:A:125:PHE:CA | 1:A:125:PHE:C | 20 | 3.3 |
| (1,139) | 1:A:124:ASP:N | 1:A:124:ASP:CA | 1:A:124:ASP:C | 1:A:125:PHE:N | 19 | 3.3 |
| (1,127) | 1:A:118:GLU:N | 1:A:118:GLU:CA | 1:A:118:GLU:C | 1:A:119:LEU:N | 7 | 3.3 |
| (1,120) | 1:A:112:TYR:C | 1:A:113:VAL:N | 1:A:113:VAL:CA | 1:A:113:VAL:C | 6 | 3.3 |
| (1,97) | 1:A:96:ALA:N | 1:A:96:ALA:CA | 1:A:96:ALA:C | 1:A:97:LEU:N | 14 | 3.2 |
| (1,96) | 1:A:95:GLN:C | 1:A:96:ALA:N | 1:A:96:ALA:CA | 1:A:96:ALA:C | 8 | 3.2 |
| (1,90) | 1:A:92:ARG:C | 1:A:93:GLU:N | 1:A:93:GLU:CA | 1:A:93:GLU:C | 4 | 3.2 |
| (1,90) | 1:A:92:ARG:C | 1:A:93:GLU:N | 1:A:93:GLU:CA | 1:A:93:GLU:C | 5 | 3.2 |
| (1,49) | 1:A:63:VAL:N | 1:A:63:VAL:CA | 1:A:63:VAL:C | 1:A:64:GLY:N | 8 | 3.2 |
| (1,143) | 1:A:126:SER:N | 1:A:126:SER:CA | 1:A:126:SER:C | 1:A:127:LEU:N | 6 | 3.2 |
| (1,140) | 1:A:124:ASP:C | 1:A:125:PHE:N | 1:A:125:PHE:CA | 1:A:125:PHE:C | 2 | 3.2 |
| (1,140) | 1:A:124:ASP:C | 1:A:125:PHE:N | 1:A:125:PHE:CA | 1:A:125:PHE:C | 12 | 3.2 |
| (1,135) | 1:A:122:PRO:N | 1:A:122:PRO:CA | 1:A:122:PRO:C | 1:A:123:ILE:N | 14 | 3.2 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,123) | 1:A:116:THR:N | 1:A:116:THR:CA | 1:A:116:THR:C | 1:A:117:VAL:N | 14 | 3.2 |
| (1,121) | 1:A:113:VAL:N | 1:A:113:VAL:CA | 1:A:113:VAL:C | 1:A:114:ASN:N | 16 | 3.2 |
| (1,99) | 1:A:97:LEU:N | 1:A:97:LEU:CA | 1:A:97:LEU:C | 1:A:98:VAL:N | 3 | 3.1 |
| (1,90) | 1:A:92:ARG:C | 1:A:93:GLU:N | 1:A:93:GLU:CA | 1:A:93:GLU:C | 19 | 3.1 |
| (1,51) | 1:A:64:GLY:N | 1:A:64:GLY:CA | 1:A:64:GLY:C | 1:A:65:GLN:N | 3 | 3.1 |
| (1,31) | 1:A:53:LYS:N | 1:A:53:LYS:CA | 1:A:53:LYS:C | 1:A:54:ASP:N | 14 | 3.1 |
| (1,29) | 1:A:52:PRO:N | 1:A:52:PRO:CA | 1:A:52:PRO:C | 1:A:53:LYS:N | 14 | 3.1 |
| (1,143) | 1:A:126:SER:N | 1:A:126:SER:CA | 1:A:126:SER:C | 1:A:127:LEU:N | 3 | 3.1 |
| (1,135) | 1:A:122:PRO:N | 1:A:122:PRO:CA | 1:A:122:PRO:C | 1:A:123:ILE:N | 11 | 3.1 |
| (1,127) | 1:A:118:GLU:N | 1:A:118:GLU:CA | 1:A:118:GLU:C | 1:A:119:LEU:N | 16 | 3.1 |
| (1,124) | 1:A:116:THR:C | 1:A:117:VAL:N | 1:A:117:VAL:CA | 1:A:117:VAL:C | 12 | 3.1 |
| (1,123) | 1:A:116:THR:N | 1:A:116:THR:CA | 1:A:116:THR:C | 1:A:117:VAL:N | 16 | 3.1 |
| (1,90) | 1:A:92:ARG:C | 1:A:93:GLU:N | 1:A:93:GLU:CA | 1:A:93:GLU:C | 6 | 3.0 |
| (1,90) | 1:A:92:ARG:C | 1:A:93:GLU:N | 1:A:93:GLU:CA | 1:A:93:GLU:C | 15 | 3.0 |
| (1,14) | 1:A:44:ARG:N | 1:A:44:ARG:CA | 1:A:44:ARG:C | 1:A:45:LEU:N | 14 | 3.0 |
| (1,124) | 1:A:116:THR:C | 1:A:117:VAL:N | 1:A:117:VAL:CA | 1:A:117:VAL:C | 7 | 3.0 |
| (1,124) | 1:A:116:THR:C | 1:A:117:VAL:N | 1:A:117:VAL:CA | 1:A:117:VAL:C | 9 | 3.0 |
| (1,124) | 1:A:116:THR:C | 1:A:117:VAL:N | 1:A:117:VAL:CA | 1:A:117:VAL:C | 10 | 3.0 |
| (1,120) | 1:A:112:TYR:C | 1:A:113:VAL:N | 1:A:113:VAL:CA | 1:A:113:VAL:C | 18 | 3.0 |
| (1,96) | 1:A:95:GLN:C | 1:A:96:ALA:N | 1:A:96:ALA:CA | 1:A:96:ALA:C | 14 | 2.9 |
| (1,90) | 1:A:92:ARG:C | 1:A:93:GLU:N | 1:A:93:GLU:CA | 1:A:93:GLU:C | 2 | 2.9 |
| (1,49) | 1:A:63:VAL:N | 1:A:63:VAL:CA | 1:A:63:VAL:C | 1:A:64:GLY:N | 10 | 2.9 |
| (1,31) | 1:A:53:LYS:N | 1:A:53:LYS:CA | 1:A:53:LYS:C | 1:A:54:ASP:N | 16 | 2.9 |
| (1,137) | 1:A:123:ILE:N | 1:A:123:ILE:CA | 1:A:123:ILE:C | 1:A:124:ASP:N | 14 | 2.9 |
| (1,135) | 1:A:122:PRO:N | 1:A:122:PRO:CA | 1:A:122:PRO:C | 1:A:123:ILE:N | 13 | 2.9 |
| (1,120) | 1:A:112:TYR:C | 1:A:113:VAL:N | 1:A:113:VAL:CA | 1:A:113:VAL:C | 7 | 2.9 |
| (1,100) | 1:A:97:LEU:C | 1:A:98:VAL:N | 1:A:98:VAL:CA | 1:A:98:VAL:C | 13 | 2.9 |
| (1,90) | 1:A:92:ARG:C | 1:A:93:GLU:N | 1:A:93:GLU:CA | 1:A:93:GLU:C | 11 | 2.8 |
| (1,90) | 1:A:92:ARG:C | 1:A:93:GLU:N | 1:A:93:GLU:CA | 1:A:93:GLU:C | 12 | 2.8 |
| (1,89) | 1:A:92:ARG:N | 1:A:92:ARG:CA | 1:A:92:ARG:C | 1:A:93:GLU:N | 17 | 2.8 |
| (1,83) | 1:A:89:SER:N | 1:A:89:SER:CA | 1:A:89:SER:C | 1:A:90:LEU:N | 19 | 2.8 |
| (1,29) | 1:A:52:PRO:N | 1:A:52:PRO:CA | 1:A:52:PRO:C | 1:A:53:LYS:N | 15 | 2.8 |
| (1,135) | 1:A:122:PRO:N | 1:A:122:PRO:CA | 1:A:122:PRO:C | 1:A:123:ILE:N | 1 | 2.8 |
| (1,135) | 1:A:122:PRO:N | 1:A:122:PRO:CA | 1:A:122:PRO:C | 1:A:123:ILE:N | 17 | 2.8 |
| (1,127) | 1:A:118:GLU:N | 1:A:118:GLU:CA | 1:A:118:GLU:C | 1:A:119:LEU:N | 6 | 2.8 |
| (1,127) | 1:A:118:GLU:N | 1:A:118:GLU:CA | 1:A:118:GLU:C | 1:A:119:LEU:N | 8 | 2.8 |
| (1,99) | 1:A:97:LEU:N | 1:A:97:LEU:CA | 1:A:97:LEU:C | 1:A:98:VAL:N | 6 | 2.7 |
| (1,98) | 1:A:96:ALA:C | 1:A:97:LEU:N | 1:A:97:LEU:CA | 1:A:97:LEU:C | 17 | 2.7 |
| (1,94) | 1:A:94:ILE:C | 1:A:95:GLN:N | 1:A:95:GLN:CA | 1:A:95:GLN:C | 11 | 2.7 |
| (1,31) | 1:A:53:LYS:N | 1:A:53:LYS:CA | 1:A:53:LYS:C | 1:A:54:ASP:N | 6 | 2.7 |
| (1,25) | 1:A:50:ARG:N | 1:A:50:ARG:CA | 1:A:50:ARG:C | 1:A:51:TYR:N | 13 | 2.7 |
| (1,14) | 1:A:44:ARG:N | 1:A:44:ARG:CA | 1:A:44:ARG:C | 1:A:45:LEU:N | 10 | 2.7 |
| (1,135) | 1:A:122:PRO:N | 1:A:122:PRO:CA | 1:A:122:PRO:C | 1:A:123:ILE:N | 20 | 2.7 |
| (1,123) | 1:A:116:THR:N | 1:A:116:THR:CA | 1:A:116:THR:C | 1:A:117:VAL:N | 2 | 2.7 |
| (1,123) | 1:A:116:THR:N | 1:A:116:THR:CA | 1:A:116:THR:C | 1:A:117:VAL:N | 19 | 2.7 |
| (1,120) | 1:A:112:TYR:C | 1:A:113:VAL:N | 1:A:113:VAL:CA | 1:A:113:VAL:C | 14 | 2.7 |
| (1,94) | 1:A:94:ILE:C | 1:A:95:GLN:N | 1:A:95:GLN:CA | 1:A:95:GLN:C | 17 | 2.6 |
| (1,67) | 1:A:72:ARG:N | 1:A:72:ARG:CA | 1:A:72:ARG:C | 1:A:73:GLN:N | 15 | 2.6 |
| (1,49) | 1:A:63:VAL:N | 1:A:63:VAL:CA | 1:A:63:VAL:C | 1:A:64:GLY:N | 1 | 2.6 |
| (1,49) | 1:A:63:VAL:N | 1:A:63:VAL:CA | 1:A:63:VAL:C | 1:A:64:GLY:N | 19 | 2.6 |
| (1,31) | 1:A:53:LYS:N | 1:A:53:LYS:CA | 1:A:53:LYS:C | 1:A:54:ASP:N | 2 | 2.6 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,23) | 1:A:49:LYS:N | 1:A:49:LYS:CA | 1:A:49:LYS:C | 1:A:50:ARG:N | 13 | 2.6 |
| (1,22) | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:LYS:N | 2 | 2.6 |
| (1,142) | 1:A:125:PHE:C | 1:A:126:SER:N | 1:A:126:SER:CA | 1:A:126:SER:C | 12 | 2.6 |
| (1,14) | 1:A:44:ARG:N | 1:A:44:ARG:CA | 1:A:44:ARG:C | 1:A:45:LEU:N | 11 | 2.6 |
| (1,135) | 1:A:122:PRO:N | 1:A:122:PRO:CA | 1:A:122:PRO:C | 1:A:123:ILE:N | 6 | 2.6 |
| (1,135) | 1:A:122:PRO:N | 1:A:122:PRO:CA | 1:A:122:PRO:C | 1:A:123:ILE:N | 12 | 2.6 |
| (1,123) | 1:A:116:THR:N | 1:A:116:THR:CA | 1:A:116:THR:C | 1:A:117:VAL:N | 15 | 2.6 |
| (1,12) | 1:A:43:GLY:N | 1:A:43:GLY:CA | 1:A:43:GLY:C | 1:A:44:ARG:N | 5 | 2.6 |
| (1,96) | 1:A:95:GLN:C | 1:A:96:ALA:N | 1:A:96:ALA:CA | 1:A:96:ALA:C | 17 | 2.5 |
| (1,52) | 1:A:64:GLY:C | 1:A:65:GLN:N | 1:A:65:GLN:CA | 1:A:65:GLN:C | 6 | 2.5 |
| (1,52) | 1:A:64:GLY:C | 1:A:65:GLN:N | 1:A:65:GLN:CA | 1:A:65:GLN:C | 14 | 2.5 |
| (1,51) | 1:A:64:GLY:N | 1:A:64:GLY:CA | 1:A:64:GLY:C | 1:A:65:GLN:N | 14 | 2.5 |
| (1,32) | 1:A:53:LYS:C | 1:A:54:ASP:N | 1:A:54:ASP:CA | 1:A:54:ASP:C | 2 | 2.5 |
| (1,25) | 1:A:50:ARG:N | 1:A:50:ARG:CA | 1:A:50:ARG:C | 1:A:51:TYR:N | 11 | 2.5 |
| (1,143) | 1:A:126:SER:N | 1:A:126:SER:CA | 1:A:126:SER:C | 1:A:127:LEU:N | 7 | 2.5 |
| (1,143) | 1:A:126:SER:N | 1:A:126:SER:CA | 1:A:126:SER:C | 1:A:127:LEU:N | 8 | 2.5 |
| (1,142) | 1:A:125:PHE:C | 1:A:126:SER:N | 1:A:126:SER:CA | 1:A:126:SER:C | 17 | 2.5 |
| (1,14) | 1:A:44:ARG:N | 1:A:44:ARG:CA | 1:A:44:ARG:C | 1:A:45:LEU:N | 3 | 2.5 |
| (1,123) | 1:A:116:THR:N | 1:A:116:THR:CA | 1:A:116:THR:C | 1:A:117:VAL:N | 11 | 2.5 |
| (1,101) | 1:A:98:VAL:N | 1:A:98:VAL:CA | 1:A:98:VAL:C | 1:A:99:LYS:N | 4 | 2.5 |
| (1,101) | 1:A:98:VAL:N | 1:A:98:VAL:CA | 1:A:98:VAL:C | 1:A:99:LYS:N | 15 | 2.5 |
| (1,96) | 1:A:95:GLN:C | 1:A:96:ALA:N | 1:A:96:ALA:CA | 1:A:96:ALA:C | 9 | 2.4 |
| (1,91) | 1:A:93:GLU:N | 1:A:93:GLU:CA | 1:A:93:GLU:C | 1:A:94:ILE:N | 14 | 2.4 |
| (1,90) | 1:A:92:ARG:C | 1:A:93:GLU:N | 1:A:93:GLU:CA | 1:A:93:GLU:C | 3 | 2.4 |
| (1,88) | 1:A:91:ASP:C | 1:A:92:ARG:N | 1:A:92:ARG:CA | 1:A:92:ARG:C | 8 | 2.4 |
| (1,83) | 1:A:89:SER:N | 1:A:89:SER:CA | 1:A:89:SER:C | 1:A:90:LEU:N | 11 | 2.4 |
| (1,49) | 1:A:63:VAL:N | 1:A:63:VAL:CA | 1:A:63:VAL:C | 1:A:64:GLY:N | 4 | 2.4 |
| (1,43) | 1:A:60:ARG:N | 1:A:60:ARG:CA | 1:A:60:ARG:C | 1:A:61:GLN:N | 10 | 2.4 |
| (1,25) | 1:A:50:ARG:N | 1:A:50:ARG:CA | 1:A:50:ARG:C | 1:A:51:TYR:N | 15 | 2.4 |
| (1,143) | 1:A:126:SER:N | 1:A:126:SER:CA | 1:A:126:SER:C | 1:A:127:LEU:N | 19 | 2.4 |
| (1,127) | 1:A:118:GLU:N | 1:A:118:GLU:CA | 1:A:118:GLU:C | 1:A:119:LEU:N | 15 | 2.4 |
| (1,125) | 1:A:117:VAL:N | 1:A:117:VAL:CA | 1:A:117:VAL:C | 1:A:118:GLU:N | 6 | 2.4 |
| (1,123) | 1:A:116:THR:N | 1:A:116:THR:CA | 1:A:116:THR:C | 1:A:117:VAL:N | 13 | 2.4 |
| (1,122) | 1:A:115:GLY:C | 1:A:116:THR:N | 1:A:116:THR:CA | 1:A:116:THR:C | 16 | 2.4 |
| (1,120) | 1:A:112:TYR:C | 1:A:113:VAL:N | 1:A:113:VAL:CA | 1:A:113:VAL:C | 1 | 2.4 |
| (1,12) | 1:A:43:GLY:N | 1:A:43:GLY:CA | 1:A:43:GLY:C | 1:A:44:ARG:N | 16 | 2.4 |
| (1,110) | 1:A:103:PRO:C | 1:A:104:LEU:N | 1:A:104:LEU:CA | 1:A:104:LEU:C | 13 | 2.4 |
| (1,109) | 1:A:103:PRO:N | 1:A:103:PRO:CA | 1:A:103:PRO:C | 1:A:104:LEU:N | 2 | 2.4 |
| (1,101) | 1:A:98:VAL:N | 1:A:98:VAL:CA | 1:A:98:VAL:C | 1:A:99:LYS:N | 2 | 2.4 |
| (1,99) | 1:A:97:LEU:N | 1:A:97:LEU:CA | 1:A:97:LEU:C | 1:A:98:VAL:N | 18 | 2.3 |
| (1,88) | 1:A:91:ASP:C | 1:A:92:ARG:N | 1:A:92:ARG:CA | 1:A:92:ARG:C | 6 | 2.3 |
| (1,84) | 1:A:89:SER:C | 1:A:90:LEU:N | 1:A:90:LEU:CA | 1:A:90:LEU:C | 17 | 2.3 |
| (1,82) | 1:A:88:PRO:C | 1:A:89:SER:N | 1:A:89:SER:CA | 1:A:89:SER:C | 9 | 2.3 |
| (1,52) | 1:A:64:GLY:C | 1:A:65:GLN:N | 1:A:65:GLN:CA | 1:A:65:GLN:C | 16 | 2.3 |
| (1,24) | 1:A:49:LYS:C | 1:A:50:ARG:N | 1:A:50:ARG:CA | 1:A:50:ARG:C | 16 | 2.3 |
| (1,135) | 1:A:122:PRO:N | 1:A:122:PRO:CA | 1:A:122:PRO:C | 1:A:123:ILE:N | 16 | 2.3 |
| (1,127) | 1:A:118:GLU:N | 1:A:118:GLU:CA | 1:A:118:GLU:C | 1:A:119:LEU:N | 3 | 2.3 |
| (1,127) | 1:A:118:GLU:N | 1:A:118:GLU:CA | 1:A:118:GLU:C | 1:A:119:LEU:N | 19 | 2.3 |
| (1,127) | 1:A:118:GLU:N | 1:A:118:GLU:CA | 1:A:118:GLU:C | 1:A:119:LEU:N | 20 | 2.3 |
| (1,107) | 1:A:102:SER:N | 1:A:102:SER:CA | 1:A:102:SER:C | 1:A:103:PRO:N | 7 | 2.3 |
| (1,100) | 1:A:97:LEU:C | 1:A:98:VAL:N | 1:A:98:VAL:CA | 1:A:98:VAL:C | 4 | 2.3 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,96) | 1:A:95:GLN:C | 1:A:96:ALA:N | 1:A:96:ALA:CA | 1:A:96:ALA:C | 5 | 2.2 |
| (1,91) | 1:A:93:GLU:N | 1:A:93:GLU:CA | 1:A:93:GLU:C | 1:A:94:ILE:N | 11 | 2.2 |
| (1,76) | 1:A:78:ALA:C | 1:A:79:VAL:N | 1:A:79:VAL:CA | 1:A:79:VAL:C | 10 | 2.2 |
| (1,22) | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:LYS:N | 16 | 2.2 |
| (1,143) | 1:A:126:SER:N | 1:A:126:SER:CA | 1:A:126:SER:C | 1:A:127:LEU:N | 9 | 2.2 |
| (1,143) | 1:A:126:SER:N | 1:A:126:SER:CA | 1:A:126:SER:C | 1:A:127:LEU:N | 20 | 2.2 |
| (1,137) | 1:A:123:ILE:N | 1:A:123:ILE:CA | 1:A:123:ILE:C | 1:A:124:ASP:N | 9 | 2.2 |
| (1,135) | 1:A:122:PRO:N | 1:A:122:PRO:CA | 1:A:122:PRO:C | 1:A:123:ILE:N | 19 | 2.2 |
| (1,127) | 1:A:118:GLU:N | 1:A:118:GLU:CA | 1:A:118:GLU:C | 1:A:119:LEU:N | 9 | 2.2 |
| (1,101) | 1:A:98:VAL:N | 1:A:98:VAL:CA | 1:A:98:VAL:C | 1:A:99:LYS:N | 17 | 2.2 |
| (1,100) | 1:A:97:LEU:C | 1:A:98:VAL:N | 1:A:98:VAL:CA | 1:A:98:VAL:C | 3 | 2.2 |
| (1,100) | 1:A:97:LEU:C | 1:A:98:VAL:N | 1:A:98:VAL:CA | 1:A:98:VAL:C | 16 | 2.2 |
| (1,98) | 1:A:96:ALA:C | 1:A:97:LEU:N | 1:A:97:LEU:CA | 1:A:97:LEU:C | 11 | 2.1 |
| (1,97) | 1:A:96:ALA:N | 1:A:96:ALA:CA | 1:A:96:ALA:C | 1:A:97:LEU:N | 7 | 2.1 |
| (1,97) | 1:A:96:ALA:N | 1:A:96:ALA:CA | 1:A:96:ALA:C | 1:A:97:LEU:N | 17 | 2.1 |
| (1,96) | 1:A:95:GLN:C | 1:A:96:ALA:N | 1:A:96:ALA:CA | 1:A:96:ALA:C | 19 | 2.1 |
| (1,91) | 1:A:93:GLU:N | 1:A:93:GLU:CA | 1:A:93:GLU:C | 1:A:94:ILE:N | 17 | 2.1 |
| (1,90) | 1:A:92:ARG:C | 1:A:93:GLU:N | 1:A:93:GLU:CA | 1:A:93:GLU:C | 7 | 2.1 |
| (1,83) | 1:A:89:SER:N | 1:A:89:SER:CA | 1:A:89:SER:C | 1:A:90:LEU:N | 2 | 2.1 |
| (1,83) | 1:A:89:SER:N | 1:A:89:SER:CA | 1:A:89:SER:C | 1:A:90:LEU:N | 15 | 2.1 |
| (1,52) | 1:A:64:GLY:C | 1:A:65:GLN:N | 1:A:65:GLN:CA | 1:A:65:GLN:C | 17 | 2.1 |
| (1,51) | 1:A:64:GLY:N | 1:A:64:GLY:CA | 1:A:64:GLY:C | 1:A:65:GLN:N | 17 | 2.1 |
| (1,22) | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:LYS:N | 3 | 2.1 |
| (1,143) | 1:A:126:SER:N | 1:A:126:SER:CA | 1:A:126:SER:C | 1:A:127:LEU:N | 10 | 2.1 |
| (1,143) | 1:A:126:SER:N | 1:A:126:SER:CA | 1:A:126:SER:C | 1:A:127:LEU:N | 15 | 2.1 |
| (1,137) | 1:A:123:ILE:N | 1:A:123:ILE:CA | 1:A:123:ILE:C | 1:A:124:ASP:N | 19 | 2.1 |
| (1,135) | 1:A:122:PRO:N | 1:A:122:PRO:CA | 1:A:122:PRO:C | 1:A:123:ILE:N | 3 | 2.1 |
| (1,125) | 1:A:117:VAL:N | 1:A:117:VAL:CA | 1:A:117:VAL:C | 1:A:118:GLU:N | 13 | 2.1 |
| (1,123) | 1:A:116:THR:N | 1:A:116:THR:CA | 1:A:116:THR:C | 1:A:117:VAL:N | 5 | 2.1 |
| (1,101) | 1:A:98:VAL:N | 1:A:98:VAL:CA | 1:A:98:VAL:C | 1:A:99:LYS:N | 3 | 2.1 |
| (1,101) | 1:A:98:VAL:N | 1:A:98:VAL:CA | 1:A:98:VAL:C | 1:A:99:LYS:N | 16 | 2.1 |
| (1,100) | 1:A:97:LEU:C | 1:A:98:VAL:N | 1:A:98:VAL:CA | 1:A:98:VAL:C | 2 | 2.1 |
| (1,99) | 1:A:97:LEU:N | 1:A:97:LEU:CA | 1:A:97:LEU:C | 1:A:98:VAL:N | 5 | 2.0 |
| (1,96) | 1:A:95:GLN:C | 1:A:96:ALA:N | 1:A:96:ALA:CA | 1:A:96:ALA:C | 11 | 2.0 |
| (1,90) | 1:A:92:ARG:C | 1:A:93:GLU:N | 1:A:93:GLU:CA | 1:A:93:GLU:C | 14 | 2.0 |
| (1,88) | 1:A:91:ASP:C | 1:A:92:ARG:N | 1:A:92:ARG:CA | 1:A:92:ARG:C | 14 | 2.0 |
| (1,42) | 1:A:59:LYS:C | 1:A:60:ARG:N | 1:A:60:ARG:CA | 1:A:60:ARG:C | 15 | 2.0 |
| (1,37) | 1:A:56:LEU:N | 1:A:56:LEU:CA | 1:A:56:LEU:C | 1:A:57:ARG:N | 14 | 2.0 |
| (1,25) | 1:A:50:ARG:N | 1:A:50:ARG:CA | 1:A:50:ARG:C | 1:A:51:TYR:N | 6 | 2.0 |
| (1,17) | 1:A:45:LEU:C | 1:A:46:ASN:N | 1:A:46:ASN:CA | 1:A:46:ASN:C | 6 | 2.0 |
| (1,143) | 1:A:126:SER:N | 1:A:126:SER:CA | 1:A:126:SER:C | 1:A:127:LEU:N | 13 | 2.0 |
| (1,142) | 1:A:125:PHE:C | 1:A:126:SER:N | 1:A:126:SER:CA | 1:A:126:SER:C | 1 | 2.0 |
| (1,133) | 1:A:121:LEU:N | 1:A:121:LEU:CA | 1:A:121:LEU:C | 1:A:122:PRO:N | 2 | 2.0 |
| (1,127) | 1:A:118:GLU:N | 1:A:118:GLU:CA | 1:A:118:GLU:C | 1:A:119:LEU:N | 18 | 2.0 |
| (1,125) | 1:A:117:VAL:N | 1:A:117:VAL:CA | 1:A:117:VAL:C | 1:A:118:GLU:N | 2 | 2.0 |
| (1,107) | 1:A:102:SER:N | 1:A:102:SER:CA | 1:A:102:SER:C | 1:A:103:PRO:N | 10 | 2.0 |
| (1,107) | 1:A:102:SER:N | 1:A:102:SER:CA | 1:A:102:SER:C | 1:A:103:PRO:N | 13 | 2.0 |
| (1,91) | 1:A:93:GLU:N | 1:A:93:GLU:CA | 1:A:93:GLU:C | 1:A:94:ILE:N | 9 | 1.9 |
| (1,84) | 1:A:89:SER:C | 1:A:90:LEU:N | 1:A:90:LEU:CA | 1:A:90:LEU:C | 7 | 1.9 |
| (1,43) | 1:A:60:ARG:N | 1:A:60:ARG:CA | 1:A:60:ARG:C | 1:A:61:GLN:N | 7 | 1.9 |
| (1,29) | 1:A:52:PRO:N | 1:A:52:PRO:CA | 1:A:52:PRO:C | 1:A:53:LYS:N | 6 | 1.9 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,29) | 1:A:52:PRO:N | 1:A:52:PRO:CA | 1:A:52:PRO:C | 1:A:53:LYS:N | 13 | 1.9 |
| (1,25) | 1:A:50:ARG:N | 1:A:50:ARG:CA | 1:A:50:ARG:C | 1:A:51:TYR:N | 8 | 1.9 |
| (1,23) | 1:A:49:LYS:N | 1:A:49:LYS:CA | 1:A:49:LYS:C | 1:A:50:ARG:N | 19 | 1.9 |
| (1,22) | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:LYS:N | 6 | 1.9 |
| (1,17) | 1:A:45:LEU:C | 1:A:46:ASN:N | 1:A:46:ASN:CA | 1:A:46:ASN:C | 5 | 1.9 |
| (1,143) | 1:A:126:SER:N | 1:A:126:SER:CA | 1:A:126:SER:C | 1:A:127:LEU:N | 18 | 1.9 |
| (1,135) | 1:A:122:PRO:N | 1:A:122:PRO:CA | 1:A:122:PRO:C | 1:A:123:ILE:N | 5 | 1.9 |
| (1,127) | 1:A:118:GLU:N | 1:A:118:GLU:CA | 1:A:118:GLU:C | 1:A:119:LEU:N | 2 | 1.9 |
| (1,1) | 1:A:37:TRP:C | 1:A:38:ARG:N | 1:A:38:ARG:CA | 1:A:38:ARG:C | 2 | 1.9 |
| (1,99) | 1:A:97:LEU:N | 1:A:97:LEU:CA | 1:A:97:LEU:C | 1:A:98:VAL:N | 1 | 1.8 |
| (1,88) | 1:A:91:ASP:C | 1:A:92:ARG:N | 1:A:92:ARG:CA | 1:A:92:ARG:C | 7 | 1.8 |
| (1,88) | 1:A:91:ASP:C | 1:A:92:ARG:N | 1:A:92:ARG:CA | 1:A:92:ARG:C | 10 | 1.8 |
| (1,84) | 1:A:89:SER:C | 1:A:90:LEU:N | 1:A:90:LEU:CA | 1:A:90:LEU:C | 12 | 1.8 |
| (1,76) | 1:A:78:ALA:C | 1:A:79:VAL:N | 1:A:79:VAL:CA | 1:A:79:VAL:C | 2 | 1.8 |
| (1,55) | 1:A:66:VAL:N | 1:A:66:VAL:CA | 1:A:66:VAL:C | 1:A:67:ARG:N | 6 | 1.8 |
| (1,49) | 1:A:63:VAL:N | 1:A:63:VAL:CA | 1:A:63:VAL:C | 1:A:64:GLY:N | 15 | 1.8 |
| (1,34) | 1:A:54:ASP:C | 1:A:55:ALA:N | 1:A:55:ALA:CA | 1:A:55:ALA:C | 16 | 1.8 |
| (1,29) | 1:A:52:PRO:N | 1:A:52:PRO:CA | 1:A:52:PRO:C | 1:A:53:LYS:N | 10 | 1.8 |
| (1,25) | 1:A:50:ARG:N | 1:A:50:ARG:CA | 1:A:50:ARG:C | 1:A:51:TYR:N | 17 | 1.8 |
| (1,143) | 1:A:126:SER:N | 1:A:126:SER:CA | 1:A:126:SER:C | 1:A:127:LEU:N | 16 | 1.8 |
| (1,142) | 1:A:125:PHE:C | 1:A:126:SER:N | 1:A:126:SER:CA | 1:A:126:SER:C | 18 | 1.8 |
| (1,140) | 1:A:124:ASP:C | 1:A:125:PHE:N | 1:A:125:PHE:CA | 1:A:125:PHE:C | 8 | 1.8 |
| (1,135) | 1:A:122:PRO:N | 1:A:122:PRO:CA | 1:A:122:PRO:C | 1:A:123:ILE:N | 8 | 1.8 |
| (1,135) | 1:A:122:PRO:N | 1:A:122:PRO:CA | 1:A:122:PRO:C | 1:A:123:ILE:N | 10 | 1.8 |
| (1,13) | 1:A:43:GLY:C | 1:A:44:ARG:N | 1:A:44:ARG:CA | 1:A:44:ARG:C | 17 | 1.8 |
| (1,127) | 1:A:118:GLU:N | 1:A:118:GLU:CA | 1:A:118:GLU:C | 1:A:119:LEU:N | 10 | 1.8 |
| (1,123) | 1:A:116:THR:N | 1:A:116:THR:CA | 1:A:116:THR:C | 1:A:117:VAL:N | 18 | 1.8 |
| (1,100) | 1:A:97:LEU:C | 1:A:98:VAL:N | 1:A:98:VAL:CA | 1:A:98:VAL:C | 18 | 1.8 |
| (1,96) | 1:A:95:GLN:C | 1:A:96:ALA:N | 1:A:96:ALA:CA | 1:A:96:ALA:C | 10 | 1.7 |
| (1,96) | 1:A:95:GLN:C | 1:A:96:ALA:N | 1:A:96:ALA:CA | 1:A:96:ALA:C | 15 | 1.7 |
| (1,91) | 1:A:93:GLU:N | 1:A:93:GLU:CA | 1:A:93:GLU:C | 1:A:94:ILE:N | 12 | 1.7 |
| (1,83) | 1:A:89:SER:N | 1:A:89:SER:CA | 1:A:89:SER:C | 1:A:90:LEU:N | 1 | 1.7 |
| (1,83) | 1:A:89:SER:N | 1:A:89:SER:CA | 1:A:89:SER:C | 1:A:90:LEU:N | 16 | 1.7 |
| (1,52) | 1:A:64:GLY:C | 1:A:65:GLN:N | 1:A:65:GLN:CA | 1:A:65:GLN:C | 10 | 1.7 |
| (1,43) | 1:A:60:ARG:N | 1:A:60:ARG:CA | 1:A:60:ARG:C | 1:A:61:GLN:N | 9 | 1.7 |
| (1,37) | 1:A:56:LEU:N | 1:A:56:LEU:CA | 1:A:56:LEU:C | 1:A:57:ARG:N | 12 | 1.7 |
| (1,32) | 1:A:53:LYS:C | 1:A:54:ASP:N | 1:A:54:ASP:CA | 1:A:54:ASP:C | 14 | 1.7 |
| (1,25) | 1:A:50:ARG:N | 1:A:50:ARG:CA | 1:A:50:ARG:C | 1:A:51:TYR:N | 7 | 1.7 |
| (1,25) | 1:A:50:ARG:N | 1:A:50:ARG:CA | 1:A:50:ARG:C | 1:A:51:TYR:N | 19 | 1.7 |
| (1,22) | 1:A:48:PHE:N | 1:A:48:PHE:CA | 1:A:48:PHE:C | 1:A:49:LYS:N | 20 | 1.7 |
| (1,17) | 1:A:45:LEU:C | 1:A:46:ASN:N | 1:A:46:ASN:CA | 1:A:46:ASN:C | 14 | 1.7 |
| (1,17) | 1:A:45:LEU:C | 1:A:46:ASN:N | 1:A:46:ASN:CA | 1:A:46:ASN:C | 18 | 1.7 |
| (1,143) | 1:A:126:SER:N | 1:A:126:SER:CA | 1:A:126:SER:C | 1:A:127:LEU:N | 14 | 1.7 |
| (1,137) | 1:A:123:ILE:N | 1:A:123:ILE:CA | 1:A:123:ILE:C | 1:A:124:ASP:N | 15 | 1.7 |
| (1,110) | 1:A:103:PRO:C | 1:A:104:LEU:N | 1:A:104:LEU:CA | 1:A:104:LEU:C | 6 | 1.7 |
| (1,99) | 1:A:97:LEU:N | 1:A:97:LEU:CA | 1:A:97:LEU:C | 1:A:98:VAL:N | 8 | 1.6 |
| (1,98) | 1:A:96:ALA:C | 1:A:97:LEU:N | 1:A:97:LEU:CA | 1:A:97:LEU:C | 7 | 1.6 |
| (1,98) | 1:A:96:ALA:C | 1:A:97:LEU:N | 1:A:97:LEU:CA | 1:A:97:LEU:C | 14 | 1.6 |
| (1,96) | 1:A:95:GLN:C | 1:A:96:ALA:N | 1:A:96:ALA:CA | 1:A:96:ALA:C | 6 | 1.6 |
| (1,96) | 1:A:95:GLN:C | 1:A:96:ALA:N | 1:A:96:ALA:CA | 1:A:96:ALA:C | 12 | 1.6 |
| (1,90) | 1:A:92:ARG:C | 1:A:93:GLU:N | 1:A:93:GLU:CA | 1:A:93:GLU:C | 13 | 1.6 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,90) | 1:A:92:ARG:C | 1:A:93:GLU:N | 1:A:93:GLU:CA | 1:A:93:GLU:C | 16 | 1.6 |
| (1,86) | 1:A:90:LEU:C | 1:A:91:ASP:N | 1:A:91:ASP:CA | 1:A:91:ASP:C | 13 | 1.6 |
| (1,86) | 1:A:90:LEU:C | 1:A:91:ASP:N | 1:A:91:ASP:CA | 1:A:91:ASP:C | 17 | 1.6 |
| (1,83) | 1:A:89:SER:N | 1:A:89:SER:CA | 1:A:89:SER:C | 1:A:90:LEU:N | 6 | 1.6 |
| (1,53) | 1:A:65:GLN:N | 1:A:65:GLN:CA | 1:A:65:GLN:C | 1:A:66:VAL:N | 9 | 1.6 |
| (1,51) | 1:A:64:GLY:N | 1:A:64:GLY:CA | 1:A:64:GLY:C | 1:A:65:GLN:N | 16 | 1.6 |
| (1,51) | 1:A:64:GLY:N | 1:A:64:GLY:CA | 1:A:64:GLY:C | 1:A:65:GLN:N | 18 | 1.6 |
| (1,37) | 1:A:56:LEU:N | 1:A:56:LEU:CA | 1:A:56:LEU:C | 1:A:57:ARG:N | 1 | 1.6 |
| (1,33) | 1:A:54:ASP:N | 1:A:54:ASP:CA | 1:A:54:ASP:C | 1:A:55:ALA:N | 1 | 1.6 |
| (1,29) | 1:A:52:PRO:N | 1:A:52:PRO:CA | 1:A:52:PRO:C | 1:A:53:LYS:N | 7 | 1.6 |
| (1,23) | 1:A:49:LYS:N | 1:A:49:LYS:CA | 1:A:49:LYS:C | 1:A:50:ARG:N | 1 | 1.6 |
| (1,143) | 1:A:126:SER:N | 1:A:126:SER:CA | 1:A:126:SER:C | 1:A:127:LEU:N | 1 | 1.6 |
| (1,122) | 1:A:115:GLY:C | 1:A:116:THR:N | 1:A:116:THR:CA | 1:A:116:THR:C | 15 | 1.6 |
| (1,1) | 1:A:37:TRP:C | 1:A:38:ARG:N | 1:A:38:ARG:CA | 1:A:38:ARG:C | 16 | 1.6 |
| (1,99) | 1:A:97:LEU:N | 1:A:97:LEU:CA | 1:A:97:LEU:C | 1:A:98:VAL:N | 19 | 1.5 |
| (1,94) | 1:A:94:ILE:C | 1:A:95:GLN:N | 1:A:95:GLN:CA | 1:A:95:GLN:C | 14 | 1.5 |
| (1,86) | 1:A:90:LEU:C | 1:A:91:ASP:N | 1:A:91:ASP:CA | 1:A:91:ASP:C | 14 | 1.5 |
| (1,83) | 1:A:89:SER:N | 1:A:89:SER:CA | 1:A:89:SER:C | 1:A:90:LEU:N | 3 | 1.5 |
| (1,72) | 1:A:75:HIS:C | 1:A:76:VAL:N | 1:A:76:VAL:CA | 1:A:76:VAL:C | 13 | 1.5 |
| (1,49) | 1:A:63:VAL:N | 1:A:63:VAL:CA | 1:A:63:VAL:C | 1:A:64:GLY:N | 16 | 1.5 |
| (1,46) | 1:A:61:GLN:C | 1:A:62:GLY:N | 1:A:62:GLY:CA | 1:A:62:GLY:C | 15 | 1.5 |
| (1,29) | 1:A:52:PRO:N | 1:A:52:PRO:CA | 1:A:52:PRO:C | 1:A:53:LYS:N | 18 | 1.5 |
| (1,25) | 1:A:50:ARG:N | 1:A:50:ARG:CA | 1:A:50:ARG:C | 1:A:51:TYR:N | 2 | 1.5 |
| (1,17) | 1:A:45:LEU:C | 1:A:46:ASN:N | 1:A:46:ASN:CA | 1:A:46:ASN:C | 10 | 1.5 |
| (1,16) | 1:A:45:LEU:N | 1:A:45:LEU:CA | 1:A:45:LEU:C | 1:A:46:ASN:N | 1 | 1.5 |
| (1,143) | 1:A:126:SER:N | 1:A:126:SER:CA | 1:A:126:SER:C | 1:A:127:LEU:N | 11 | 1.5 |
| (1,133) | 1:A:121:LEU:N | 1:A:121:LEU:CA | 1:A:121:LEU:C | 1:A:122:PRO:N | 3 | 1.5 |
| (1,127) | 1:A:118:GLU:N | 1:A:118:GLU:CA | 1:A:118:GLU:C | 1:A:119:LEU:N | 1 | 1.5 |
| (1,127) | 1:A:118:GLU:N | 1:A:118:GLU:CA | 1:A:118:GLU:C | 1:A:119:LEU:N | 11 | 1.5 |
| (1,127) | 1:A:118:GLU:N | 1:A:118:GLU:CA | 1:A:118:GLU:C | 1:A:119:LEU:N | 12 | 1.5 |
| (1,107) | 1:A:102:SER:N | 1:A:102:SER:CA | 1:A:102:SER:C | 1:A:103:PRO:N | 3 | 1.5 |
| (1,101) | 1:A:98:VAL:N | 1:A:98:VAL:CA | 1:A:98:VAL:C | 1:A:99:LYS:N | 11 | 1.5 |
| (1,101) | 1:A:98:VAL:N | 1:A:98:VAL:CA | 1:A:98:VAL:C | 1:A:99:LYS:N | 12 | 1.5 |
| (1,100) | 1:A:97:LEU:C | 1:A:98:VAL:N | 1:A:98:VAL:CA | 1:A:98:VAL:C | 10 | 1.5 |
| (1,1) | 1:A:37:TRP:C | 1:A:38:ARG:N | 1:A:38:ARG:CA | 1:A:38:ARG:C | 3 | 1.5 |
| (1,1) | 1:A:37:TRP:C | 1:A:38:ARG:N | 1:A:38:ARG:CA | 1:A:38:ARG:C | 4 | 1.5 |
| (1,1) | 1:A:37:TRP:C | 1:A:38:ARG:N | 1:A:38:ARG:CA | 1:A:38:ARG:C | 13 | 1.5 |
| (1,88) | 1:A:91:ASP:C | 1:A:92:ARG:N | 1:A:92:ARG:CA | 1:A:92:ARG:C | 17 | 1.4 |
| (1,88) | 1:A:91:ASP:C | 1:A:92:ARG:N | 1:A:92:ARG:CA | 1:A:92:ARG:C | 18 | 1.4 |
| (1,87) | 1:A:91:ASP:N | 1:A:91:ASP:CA | 1:A:91:ASP:C | 1:A:92:ARG:N | 3 | 1.4 |
| (1,83) | 1:A:89:SER:N | 1:A:89:SER:CA | 1:A:89:SER:C | 1:A:90:LEU:N | 4 | 1.4 |
| (1,83) | 1:A:89:SER:N | 1:A:89:SER:CA | 1:A:89:SER:C | 1:A:90:LEU:N | 9 | 1.4 |
| (1,83) | 1:A:89:SER:N | 1:A:89:SER:CA | 1:A:89:SER:C | 1:A:90:LEU:N | 14 | 1.4 |
| (1,78) | 1:A:79:VAL:C | 1:A:80:THR:N | 1:A:80:THR:CA | 1:A:80:THR:C | 7 | 1.4 |
| (1,67) | 1:A:72:ARG:N | 1:A:72:ARG:CA | 1:A:72:ARG:C | 1:A:73:GLN:N | 1 | 1.4 |
| (1,55) | 1:A:66:VAL:N | 1:A:66:VAL:CA | 1:A:66:VAL:C | 1:A:67:ARG:N | 1 | 1.4 |
| (1,51) | 1:A:64:GLY:N | 1:A:64:GLY:CA | 1:A:64:GLY:C | 1:A:65:GLN:N | 10 | 1.4 |
| (1,46) | 1:A:61:GLN:C | 1:A:62:GLY:N | 1:A:62:GLY:CA | 1:A:62:GLY:C | 10 | 1.4 |
| (1,46) | 1:A:61:GLN:C | 1:A:62:GLY:N | 1:A:62:GLY:CA | 1:A:62:GLY:C | 17 | 1.4 |
| (1,45) | 1:A:61:GLN:N | 1:A:61:GLN:CA | 1:A:61:GLN:C | 1:A:62:GLY:N | 14 | 1.4 |
| (1,44) | 1:A:60:ARG:C | 1:A:61:GLN:N | 1:A:61:GLN:CA | 1:A:61:GLN:C | 1 | 1.4 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,37) | 1:A:56:LEU:N | 1:A:56:LEU:CA | 1:A:56:LEU:C | 1:A:57:ARG:N | 10 | 1.4 |
| (1,29) | 1:A:52:PRO:N | 1:A:52:PRO:CA | 1:A:52:PRO:C | 1:A:53:LYS:N | 8 | 1.4 |
| (1,26) | 1:A:50:ARG:C | 1:A:51:TYR:N | 1:A:51:TYR:CA | 1:A:51:TYR:C | 14 | 1.4 |
| (1,23) | 1:A:49:LYS:N | 1:A:49:LYS:CA | 1:A:49:LYS:C | 1:A:50:ARG:N | 14 | 1.4 |
| (1,142) | 1:A:125:PHE:C | 1:A:126:SER:N | 1:A:126:SER:CA | 1:A:126:SER:C | 5 | 1.4 |
| (1,142) | 1:A:125:PHE:C | 1:A:126:SER:N | 1:A:126:SER:CA | 1:A:126:SER:C | 16 | 1.4 |
| (1,129) | 1:A:119:LEU:N | 1:A:119:LEU:CA | 1:A:119:LEU:C | 1:A:120:THR:N | 19 | 1.4 |
| (1,123) | 1:A:116:THR:N | 1:A:116:THR:CA | 1:A:116:THR:C | 1:A:117:VAL:N | 3 | 1.4 |
| (1,122) | 1:A:115:GLY:C | 1:A:116:THR:N | 1:A:116:THR:CA | 1:A:116:THR:C | 12 | 1.4 |
| (1,101) | 1:A:98:VAL:N | 1:A:98:VAL:CA | 1:A:98:VAL:C | 1:A:99:LYS:N | 13 | 1.4 |
| (1,101) | 1:A:98:VAL:N | 1:A:98:VAL:CA | 1:A:98:VAL:C | 1:A:99:LYS:N | 14 | 1.4 |
| (1,100) | 1:A:97:LEU:C | 1:A:98:VAL:N | 1:A:98:VAL:CA | 1:A:98:VAL:C | 12 | 1.4 |
| (1,100) | 1:A:97:LEU:C | 1:A:98:VAL:N | 1:A:98:VAL:CA | 1:A:98:VAL:C | 20 | 1.4 |
| (1,1) | 1:A:37:TRP:C | 1:A:38:ARG:N | 1:A:38:ARG:CA | 1:A:38:ARG:C | 1 | 1.4 |
| (1,96) | 1:A:95:GLN:C | 1:A:96:ALA:N | 1:A:96:ALA:CA | 1:A:96:ALA:C | 20 | 1.3 |
| (1,88) | 1:A:91:ASP:C | 1:A:92:ARG:N | 1:A:92:ARG:CA | 1:A:92:ARG:C | 19 | 1.3 |
| (1,83) | 1:A:89:SER:N | 1:A:89:SER:CA | 1:A:89:SER:C | 1:A:90:LEU:N | 5 | 1.3 |
| (1,83) | 1:A:89:SER:N | 1:A:89:SER:CA | 1:A:89:SER:C | 1:A:90:LEU:N | 17 | 1.3 |
| (1,82) | 1:A:88:PRO:C | 1:A:89:SER:N | 1:A:89:SER:CA | 1:A:89:SER:C | 19 | 1.3 |
| (1,77) | 1:A:79:VAL:N | 1:A:79:VAL:CA | 1:A:79:VAL:C | 1:A:80:THR:N | 6 | 1.3 |
| (1,52) | 1:A:64:GLY:C | 1:A:65:GLN:N | 1:A:65:GLN:CA | 1:A:65:GLN:C | 4 | 1.3 |
| (1,48) | 1:A:62:GLY:C | 1:A:63:VAL:N | 1:A:63:VAL:CA | 1:A:63:VAL:C | 13 | 1.3 |
| (1,48) | 1:A:62:GLY:C | 1:A:63:VAL:N | 1:A:63:VAL:CA | 1:A:63:VAL:C | 19 | 1.3 |
| (1,32) | 1:A:53:LYS:C | 1:A:54:ASP:N | 1:A:54:ASP:CA | 1:A:54:ASP:C | 6 | 1.3 |
| (1,31) | 1:A:53:LYS:N | 1:A:53:LYS:CA | 1:A:53:LYS:C | 1:A:54:ASP:N | 7 | 1.3 |
| (1,29) | 1:A:52:PRO:N | 1:A:52:PRO:CA | 1:A:52:PRO:C | 1:A:53:LYS:N | 19 | 1.3 |
| (1,17) | 1:A:45:LEU:C | 1:A:46:ASN:N | 1:A:46:ASN:CA | 1:A:46:ASN:C | 4 | 1.3 |
| (1,143) | 1:A:126:SER:N | 1:A:126:SER:CA | 1:A:126:SER:C | 1:A:127:LEU:N | 4 | 1.3 |
| (1,143) | 1:A:126:SER:N | 1:A:126:SER:CA | 1:A:126:SER:C | 1:A:127:LEU:N | 12 | 1.3 |
| (1,142) | 1:A:125:PHE:C | 1:A:126:SER:N | 1:A:126:SER:CA | 1:A:126:SER:C | 4 | 1.3 |
| (1,14) | 1:A:44:ARG:N | 1:A:44:ARG:CA | 1:A:44:ARG:C | 1:A:45:LEU:N | 12 | 1.3 |
| (1,135) | 1:A:122:PRO:N | 1:A:122:PRO:CA | 1:A:122:PRO:C | 1:A:123:ILE:N | 4 | 1.3 |
| (1,127) | 1:A:118:GLU:N | 1:A:118:GLU:CA | 1:A:118:GLU:C | 1:A:119:LEU:N | 5 | 1.3 |
| (1,125) | 1:A:117:VAL:N | 1:A:117:VAL:CA | 1:A:117:VAL:C | 1:A:118:GLU:N | 11 | 1.3 |
| (1,91) | 1:A:93:GLU:N | 1:A:93:GLU:CA | 1:A:93:GLU:C | 1:A:94:ILE:N | 18 | 1.2 |
| (1,81) | 1:A:81:LEU:N | 1:A:81:LEU:CA | 1:A:81:LEU:C | 1:A:82:VAL:N | 10 | 1.2 |
| (1,51) | 1:A:64:GLY:N | 1:A:64:GLY:CA | 1:A:64:GLY:C | 1:A:65:GLN:N | 6 | 1.2 |
| (1,46) | 1:A:61:GLN:C | 1:A:62:GLY:N | 1:A:62:GLY:CA | 1:A:62:GLY:C | 16 | 1.2 |
| (1,44) | 1:A:60:ARG:C | 1:A:61:GLN:N | 1:A:61:GLN:CA | 1:A:61:GLN:C | 16 | 1.2 |
| (1,35) | 1:A:55:ALA:N | 1:A:55:ALA:CA | 1:A:55:ALA:C | 1:A:56:LEU:N | 10 | 1.2 |
| (1,34) | 1:A:54:ASP:C | 1:A:55:ALA:N | 1:A:55:ALA:CA | 1:A:55:ALA:C | 2 | 1.2 |
| (1,32) | 1:A:53:LYS:C | 1:A:54:ASP:N | 1:A:54:ASP:CA | 1:A:54:ASP:C | 16 | 1.2 |
| (1,29) | 1:A:52:PRO:N | 1:A:52:PRO:CA | 1:A:52:PRO:C | 1:A:53:LYS:N | 1 | 1.2 |
| (1,25) | 1:A:50:ARG:N | 1:A:50:ARG:CA | 1:A:50:ARG:C | 1:A:51:TYR:N | 3 | 1.2 |
| (1,23) | 1:A:49:LYS:N | 1:A:49:LYS:CA | 1:A:49:LYS:C | 1:A:50:ARG:N | 2 | 1.2 |
| (1,23) | 1:A:49:LYS:N | 1:A:49:LYS:CA | 1:A:49:LYS:C | 1:A:50:ARG:N | 16 | 1.2 |
| (1,23) | 1:A:49:LYS:N | 1:A:49:LYS:CA | 1:A:49:LYS:C | 1:A:50:ARG:N | 20 | 1.2 |
| (1,17) | 1:A:45:LEU:C | 1:A:46:ASN:N | 1:A:46:ASN:CA | 1:A:46:ASN:C | 3 | 1.2 |
| (1,16) | 1:A:45:LEU:N | 1:A:45:LEU:CA | 1:A:45:LEU:C | 1:A:46:ASN:N | 17 | 1.2 |
| (1,142) | 1:A:125:PHE:C | 1:A:126:SER:N | 1:A:126:SER:CA | 1:A:126:SER:C | 8 | 1.2 |
| (1,14) | 1:A:44:ARG:N | 1:A:44:ARG:CA | 1:A:44:ARG:C | 1:A:45:LEU:N | 18 | 1.2 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,133) | 1:A:121:LEU:N | 1:A:121:LEU:CA | 1:A:121:LEU:C | 1:A:122:PRO:N | 1 | 1.2 |
| (1,133) | 1:A:121:LEU:N | 1:A:121:LEU:CA | 1:A:121:LEU:C | 1:A:122:PRO:N | 4 | 1.2 |
| (1,133) | 1:A:121:LEU:N | 1:A:121:LEU:CA | 1:A:121:LEU:C | 1:A:122:PRO:N | 20 | 1.2 |
| (1,13) | 1:A:43:GLY:C | 1:A:44:ARG:N | 1:A:44:ARG:CA | 1:A:44:ARG:C | 11 | 1.2 |
| (1,125) | 1:A:117:VAL:N | 1:A:117:VAL:CA | 1:A:117:VAL:C | 1:A:118:GLU:N | 1 | 1.2 |
| (1,125) | 1:A:117:VAL:N | 1:A:117:VAL:CA | 1:A:117:VAL:C | 1:A:118:GLU:N | 8 | 1.2 |
| (1,123) | 1:A:116:THR:N | 1:A:116:THR:CA | 1:A:116:THR:C | 1:A:117:VAL:N | 20 | 1.2 |
| (1,122) | 1:A:115:GLY:C | 1:A:116:THR:N | 1:A:116:THR:CA | 1:A:116:THR:C | 8 | 1.2 |
| (1,101) | 1:A:98:VAL:N | 1:A:98:VAL:CA | 1:A:98:VAL:C | 1:A:99:LYS:N | 7 | 1.2 |
| (1,1) | 1:A:37:TRP:C | 1:A:38:ARG:N | 1:A:38:ARG:CA | 1:A:38:ARG:C | 14 | 1.2 |
| (1,96) | 1:A:95:GLN:C | 1:A:96:ALA:N | 1:A:96:ALA:CA | 1:A:96:ALA:C | 13 | 1.1 |
| (1,88) | 1:A:91:ASP:C | 1:A:92:ARG:N | 1:A:92:ARG:CA | 1:A:92:ARG:C | 15 | 1.1 |
| (1,87) | 1:A:91:ASP:N | 1:A:91:ASP:CA | 1:A:91:ASP:C | 1:A:92:ARG:N | 19 | 1.1 |
| (1,86) | 1:A:90:LEU:C | 1:A:91:ASP:N | 1:A:91:ASP:CA | 1:A:91:ASP:C | 9 | 1.1 |
| (1,83) | 1:A:89:SER:N | 1:A:89:SER:CA | 1:A:89:SER:C | 1:A:90:LEU:N | 12 | 1.1 |
| (1,58) | 1:A:67:ARG:C | 1:A:68:PHE:N | 1:A:68:PHE:CA | 1:A:68:PHE:C | 2 | 1.1 |
| (1,49) | 1:A:63:VAL:N | 1:A:63:VAL:CA | 1:A:63:VAL:C | 1:A:64:GLY:N | 6 | 1.1 |
| (1,48) | 1:A:62:GLY:C | 1:A:63:VAL:N | 1:A:63:VAL:CA | 1:A:63:VAL:C | 3 | 1.1 |
| (1,48) | 1:A:62:GLY:C | 1:A:63:VAL:N | 1:A:63:VAL:CA | 1:A:63:VAL:C | 7 | 1.1 |
| (1,46) | 1:A:61:GLN:C | 1:A:62:GLY:N | 1:A:62:GLY:CA | 1:A:62:GLY:C | 4 | 1.1 |
| (1,46) | 1:A:61:GLN:C | 1:A:62:GLY:N | 1:A:62:GLY:CA | 1:A:62:GLY:C | 6 | 1.1 |
| (1,46) | 1:A:61:GLN:C | 1:A:62:GLY:N | 1:A:62:GLY:CA | 1:A:62:GLY:C | 12 | 1.1 |
| (1,45) | 1:A:61:GLN:N | 1:A:61:GLN:CA | 1:A:61:GLN:C | 1:A:62:GLY:N | 20 | 1.1 |
| (1,25) | 1:A:50:ARG:N | 1:A:50:ARG:CA | 1:A:50:ARG:C | 1:A:51:TYR:N | 18 | 1.1 |
| (1,23) | 1:A:49:LYS:N | 1:A:49:LYS:CA | 1:A:49:LYS:C | 1:A:50:ARG:N | 17 | 1.1 |
| (1,17) | 1:A:45:LEU:C | 1:A:46:ASN:N | 1:A:46:ASN:CA | 1:A:46:ASN:C | 11 | 1.1 |
| (1,17) | 1:A:45:LEU:C | 1:A:46:ASN:N | 1:A:46:ASN:CA | 1:A:46:ASN:C | 16 | 1.1 |
| (1,17) | 1:A:45:LEU:C | 1:A:46:ASN:N | 1:A:46:ASN:CA | 1:A:46:ASN:C | 20 | 1.1 |
| (1,15) | 1:A:44:ARG:C | 1:A:45:LEU:N | 1:A:45:LEU:CA | 1:A:45:LEU:C | 2 | 1.1 |
| (1,137) | 1:A:123:ILE:N | 1:A:123:ILE:CA | 1:A:123:ILE:C | 1:A:124:ASP:N | 8 | 1.1 |
| (1,135) | 1:A:122:PRO:N | 1:A:122:PRO:CA | 1:A:122:PRO:C | 1:A:123:ILE:N | 2 | 1.1 |
| (1,133) | 1:A:121:LEU:N | 1:A:121:LEU:CA | 1:A:121:LEU:C | 1:A:122:PRO:N | 10 | 1.1 |
| (1,133) | 1:A:121:LEU:N | 1:A:121:LEU:CA | 1:A:121:LEU:C | 1:A:122:PRO:N | 13 | 1.1 |
| (1,133) | 1:A:121:LEU:N | 1:A:121:LEU:CA | 1:A:121:LEU:C | 1:A:122:PRO:N | 17 | 1.1 |
| (1,13) | 1:A:43:GLY:C | 1:A:44:ARG:N | 1:A:44:ARG:CA | 1:A:44:ARG:C | 16 | 1.1 |
| (1,125) | 1:A:117:VAL:N | 1:A:117:VAL:CA | 1:A:117:VAL:C | 1:A:118:GLU:N | 3 | 1.1 |
| (1,123) | 1:A:116:THR:N | 1:A:116:THR:CA | 1:A:116:THR:C | 1:A:117:VAL:N | 9 | 1.1 |
| (1,122) | 1:A:115:GLY:C | 1:A:116:THR:N | 1:A:116:THR:CA | 1:A:116:THR:C | 17 | 1.1 |
| (1,109) | 1:A:103:PRO:N | 1:A:103:PRO:CA | 1:A:103:PRO:C | 1:A:104:LEU:N | 16 | 1.1 |
| (1,101) | 1:A:98:VAL:N | 1:A:98:VAL:CA | 1:A:98:VAL:C | 1:A:99:LYS:N | 6 | 1.1 |
| (1,101) | 1:A:98:VAL:N | 1:A:98:VAL:CA | 1:A:98:VAL:C | 1:A:99:LYS:N | 10 | 1.1 |
| (1,100) | 1:A:97:LEU:C | 1:A:98:VAL:N | 1:A:98:VAL:CA | 1:A:98:VAL:C | 15 | 1.1 |