# Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

Jun 6, 2023 – 06:42 pm BST

| | | |
|---|---|---|
| PDB ID | : | 6EHZ |
| BMRB ID | : | 34176 |
| Title | : | NMR solution structure of murine CXCL12 gamma isoform |
| Authors | : | Laguri, C.; Lortat-Jacob, H.; SImorre, J.P. |
| Deposited on | : | 2017-09-15 |

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:

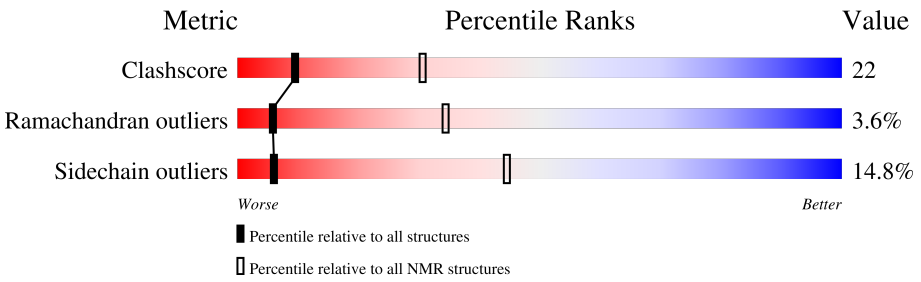
| | | |
|---|---|---|
| MolProbity | : | 4.02b-467 |
| Percentile statistics | : | 20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019) |
| wwPDB-RCI | : | v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005) |
| PANAV | : | Wang et al. (2010) |
| wwPDB-ShiftChecker | : | v1.2 |
| BMRB Restraints Analysis | : | 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 86%.

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




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

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

| Mol | Chain | Length | Quality of chain |
|---|---|---|---|
| 1 | A | 98 | 36% 19% • 41% |

# 2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 20 models. Model 18 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:9-A:66 (58) | 0.45 | 18 |

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 4 clusters. No single-model clusters were found.

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

# 3 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1704 atoms, of which 891 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Stromal cell-derived factor 1.

| Mol | Chain | Residues | Atoms | | | | | | Trace |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | Total | C | H | N | O | S | |
| 1 | A | 98 | 1704 | 511 | 891 | 166 | 132 | 4 | 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: Stromal cell-derived factor 1

Chain A: 36% 19% • 41%

K1 P2 V3 S4 L5 S6 Y7 R8 C9 F14 I18 V23 K24 H25 L26 K27 I28 L29 N30 T31 P32 N33 Q37 I38 V39 A40 K43 I51 D52 P53 K54 L55 I58 Y61 L62 N67 K68 G69 R70 R71 E72 E73 K74 V75 G76 K77 K78 E79 K80 I81 G82

K83 K84 K85 R86 Q87 K88 K89 R90 K91 A92 A93 Q94 K95 R96 K97 N98

## 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: Stromal cell-derived factor 1

Chain A: 37% 18% • 41%

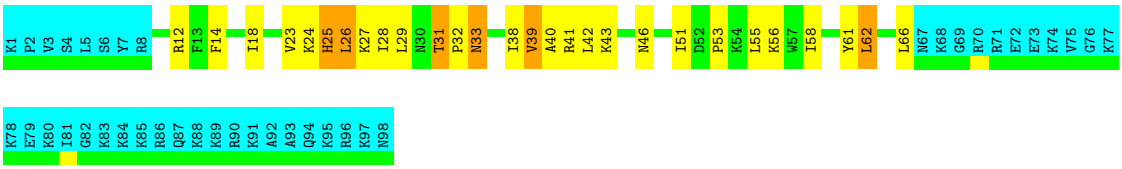
K1 P2 V3 S4 L5 S6 Y7 R8 C9 P10 F14 I18 V23 K24 H25 L26 L29 N30 T31 P32 N33 L36 Q37 I38 V39 A40 K43 C50 I51 D52 P53 K54 L55 I58 L62 N67 K68 G69 R70 R71 E72 E73 K74 V75 G76 K77 K78 E79 K80 I81

G82 K83 K84 K85 R86 Q87 K88 K89 R90 K91 A92 A93 Q94 K95 R96 K97 N98

### 4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: Stromal cell-derived factor 1

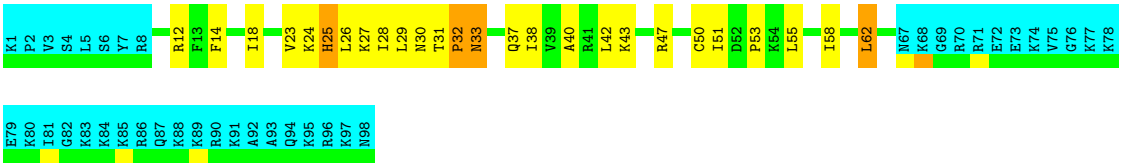
Chain A: 31% 22% 6% 41%




### 4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Stromal cell-derived factor 1

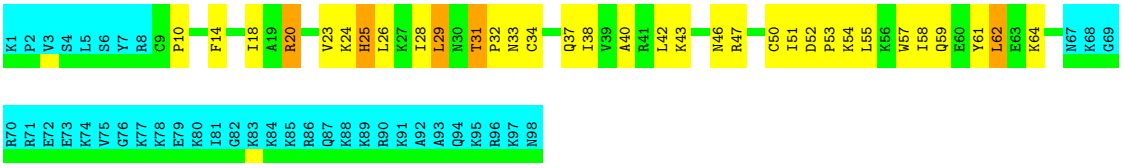
Chain A: 33% 22% • 41%




### 4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Stromal cell-derived factor 1

Chain A: 26% 29% 5% 41%




### 4.2.5 Score per residue for model 5

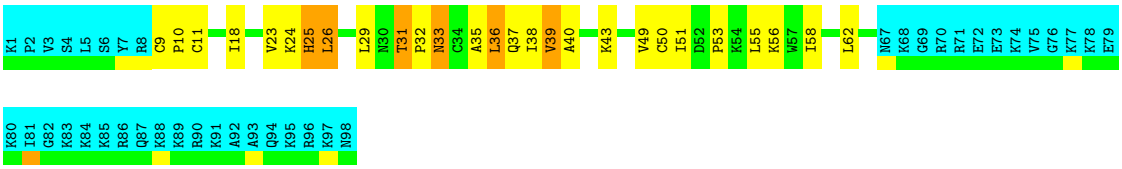
- Molecule 1: Stromal cell-derived factor 1

Chain A: 33% 22% • 41%

### 4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Stromal cell-derived factor 1

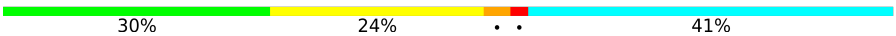
Chain A: 32% 21% 6% 41%

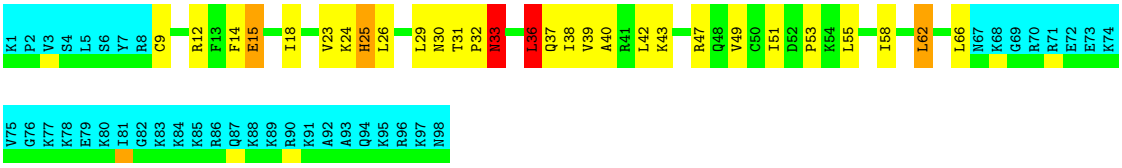



### 4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Stromal cell-derived factor 1

Chain A:

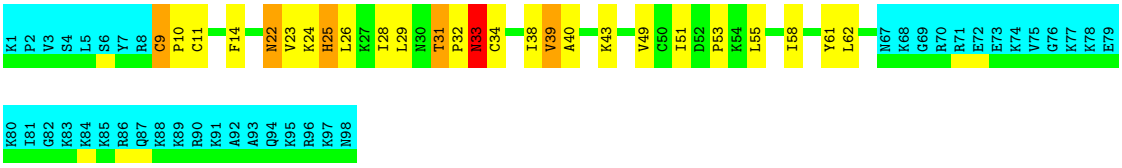



### 4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Stromal cell-derived factor 1

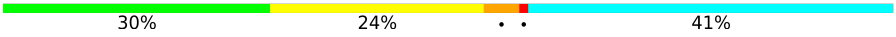
Chain A:




### 4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Stromal cell-derived factor 1

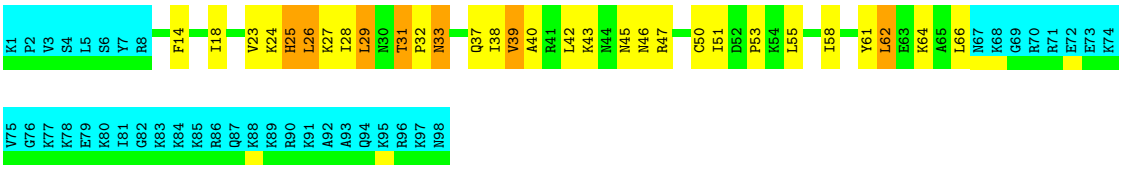
Chain A:



### 4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Stromal cell-derived factor 1

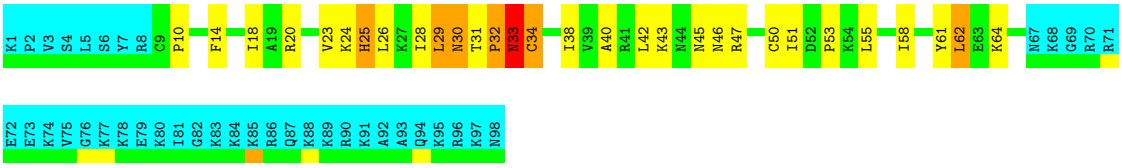
Chain A:




### 4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Stromal cell-derived factor 1

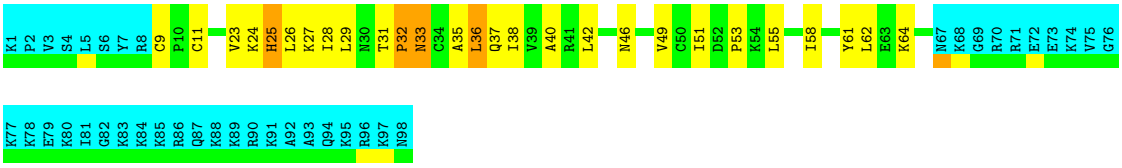
Chain A:




### 4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Stromal cell-derived factor 1

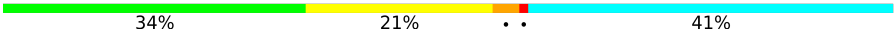
Chain A:

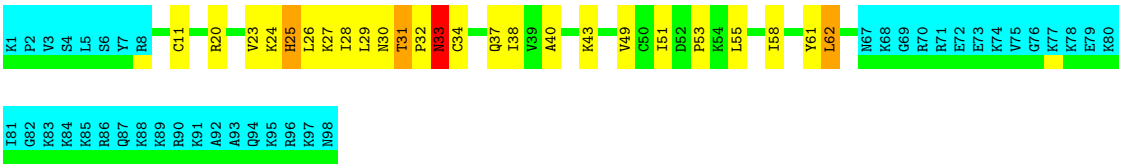



### 4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Stromal cell-derived factor 1

Chain A:

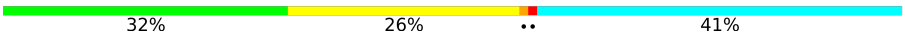


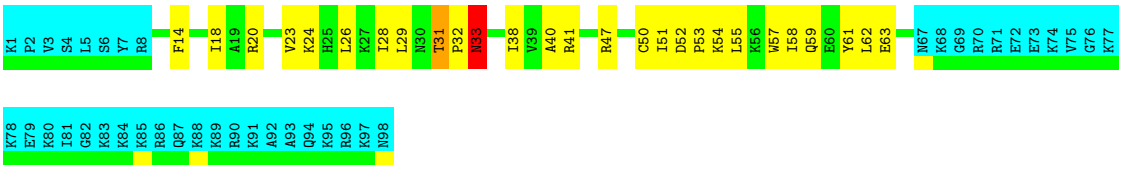




### 4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Stromal cell-derived factor 1

Chain A:

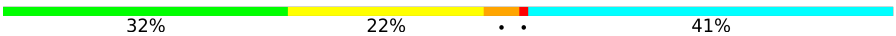


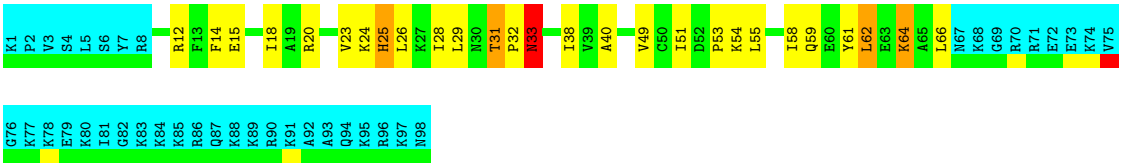



### 4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Stromal cell-derived factor 1

Chain A:

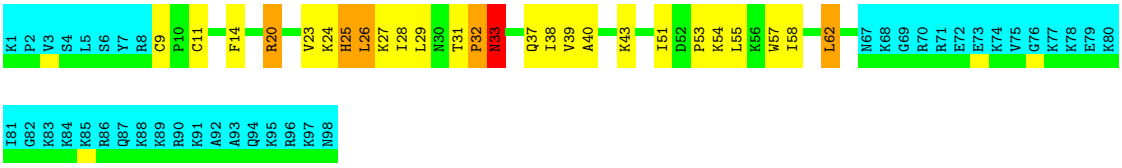



### 4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Stromal cell-derived factor 1

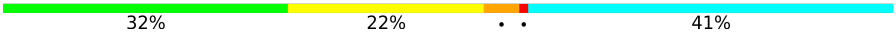
Chain A:

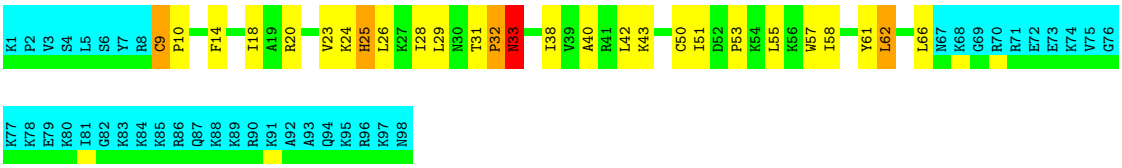



### 4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Stromal cell-derived factor 1

Chain A:

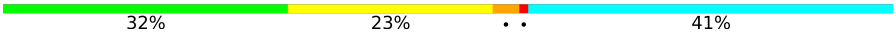


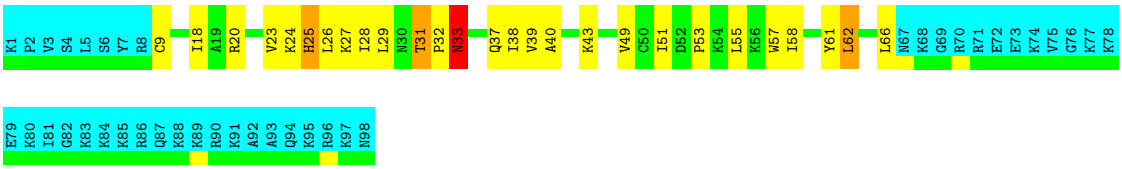




### 4.2.18 Score per residue for model 18 (medoid)

- Molecule 1: Stromal cell-derived factor 1

Chain A:

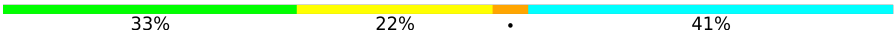


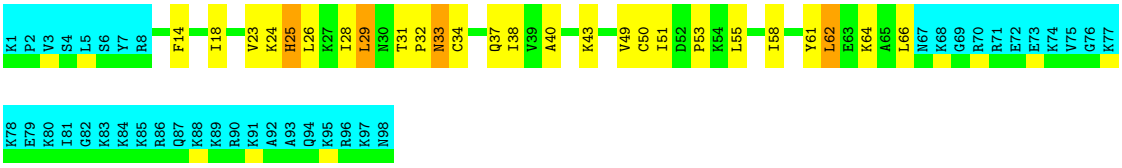



### 4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Stromal cell-derived factor 1

Chain A:




### 4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Stromal cell-derived factor 1

Chain A:

# 5 Refinement protocol and experimental data overview (i)

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

Of the 20 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *all calculated structures submitted*.

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

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

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

| Chemical shift file(s) | working_cs.cif |
|---|---|
| Number of chemical shift lists | 1 |
| Total number of shifts | 1021 |
| Number of shifts mapped to atoms | 1021 |
| Number of unparsed shifts | 0 |
| Number of shifts with mapping errors | 0 |
| Number of shifts with mapping warnings | 0 |
| Assignment completeness (well-defined parts) | 86% |

# 6 Model quality (i)

## 6.1 Standard geometry (i)

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 | 476 | 498 | 496 | 22±3 |
| All | All | 9520 | 9960 | 9920 | 435 |

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 22.

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

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|---|---|---|---|---|---|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:26:LEU:HD11 | 1:A:38:ILE:HG22 | 0.89 | 1.42 | 11 | 16 |
| 1:A:53:PRO:HA | 1:A:58:ILE:HG21 | 0.72 | 1.61 | 4 | 20 |
| 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:38:ILE:HG22 | 0.71 | 1.63 | 10 | 4 |
| 1:A:32:PRO:O | 1:A:33:ASN:HB3 | 0.65 | 1.91 | 11 | 1 |
| 1:A:23:VAL:CG2 | 1:A:40:ALA:HB1 | 0.63 | 2.24 | 7 | 20 |
| 1:A:18:ILE:CD1 | 1:A:49:VAL:HG11 | 0.63 | 2.22 | 7 | 2 |
| 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:H | 0.63 | 1.53 | 6 | 3 |
| 1:A:31:THR:HG21 | 1:A:37:GLN:NE2 | 0.62 | 2.09 | 7 | 3 |
| 1:A:25:HIS:H | 1:A:25:HIS:CD2 | 0.60 | 2.13 | 12 | 19 |
| 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:40:ALA:HB1 | 0.60 | 1.74 | 11 | 19 |
| 1:A:9:CYS:SG | 1:A:32:PRO:HG2 | 0.58 | 2.39 | 16 | 2 |
| 1:A:51:ILE:HG22 | 1:A:55:LEU:HD12 | 0.57 | 1.74 | 10 | 20 |
| 1:A:26:LEU:HD11 | 1:A:38:ILE:CG2 | 0.57 | 2.27 | 18 | 12 |
| 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:36:LEU:H | 0.56 | 1.60 | 7 | 1 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|---|---|---|---|---|---|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:28:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG23 | 0.56 | 2.30 | 15 | 9 |
| 1:A:24:LYS:CD | 1:A:43:LYS:HA | 0.56 | 2.31 | 17 | 1 |
| 1:A:24:LYS:HE3 | 1:A:43:LYS:O | 0.56 | 1.99 | 18 | 3 |
| 1:A:36:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:N | 0.54 | 2.18 | 12 | 3 |
| 1:A:18:ILE:HB | 1:A:51:ILE:HG23 | 0.54 | 1.78 | 17 | 13 |
| 1:A:42:LEU:O | 1:A:46:ASN:HA | 0.54 | 2.03 | 5 | 5 |
| 1:A:22:ASN:HD22 | 1:A:22:ASN:C | 0.53 | 2.06 | 8 | 1 |
| 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:62:LEU:HD23 | 0.53 | 1.78 | 11 | 2 |
| 1:A:33:ASN:N | 1:A:33:ASN:HD22 | 0.53 | 2.00 | 15 | 4 |
| 1:A:29:LEU:CB | 1:A:37:GLN:HB2 | 0.53 | 2.34 | 20 | 3 |
| 1:A:15:GLU:OE1 | 1:A:18:ILE:HB | 0.53 | 2.04 | 15 | 1 |
| 1:A:24:LYS:CG | 1:A:43:LYS:HA | 0.52 | 2.34 | 17 | 11 |
| 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ARG:HG2 | 0.52 | 1.81 | 7 | 4 |
| 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:24:LYS:O | 0.52 | 2.05 | 11 | 19 |
| 1:A:12:ARG:HD2 | 1:A:12:ARG:N | 0.52 | 2.20 | 7 | 2 |
| 1:A:9:CYS:SG | 1:A:10:PRO:HD2 | 0.52 | 2.44 | 9 | 2 |
| 1:A:38:ILE:O | 1:A:50:CYS:HA | 0.52 | 2.04 | 19 | 10 |
| 1:A:28:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:CE2 | 0.52 | 2.40 | 15 | 14 |
| 1:A:31:THR:CB | 1:A:32:PRO:HD2 | 0.52 | 2.34 | 19 | 5 |
| 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:62:LEU:HD13 | 0.51 | 1.81 | 3 | 14 |
| 1:A:24:LYS:HD3 | 1:A:43:LYS:HA | 0.51 | 1.83 | 17 | 1 |
| 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:39:VAL:O | 0.51 | 2.06 | 6 | 4 |
| 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:36:LEU:O | 0.51 | 2.06 | 6 | 3 |
| 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:37:GLN:HE22 | 0.50 | 1.67 | 6 | 3 |
| 1:A:45:ASN:ND2 | 1:A:47:ARG:HD2 | 0.50 | 2.22 | 10 | 1 |
| 1:A:31:THR:C | 1:A:33:ASN:H | 0.50 | 2.10 | 6 | 18 |
| 1:A:20:ARG:HG2 | 1:A:57:TRP:CD2 | 0.50 | 2.42 | 17 | 3 |
| 1:A:53:PRO:HA | 1:A:58:ILE:CG2 | 0.50 | 2.35 | 4 | 2 |
| 1:A:22:ASN:HD22 | 1:A:23:VAL:N | 0.49 | 2.04 | 8 | 1 |
| 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ARG:CG | 0.49 | 2.37 | 7 | 1 |
| 1:A:31:THR:HB | 1:A:32:PRO:HD2 | 0.49 | 1.83 | 19 | 5 |
| 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:CD1 | 0.48 | 2.19 | 1 | 3 |
| 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:40:ALA:HB1 | 0.48 | 1.83 | 7 | 2 |
| 1:A:58:ILE:CG2 | 1:A:62:LEU:HD23 | 0.48 | 2.38 | 11 | 1 |
| 1:A:28:ILE:HA | 1:A:37:GLN:O | 0.48 | 2.08 | 5 | 5 |
| 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:43:LYS:HA | 0.47 | 1.86 | 1 | 6 |
| 1:A:51:ILE:HG22 | 1:A:55:LEU:CD1 | 0.47 | 2.38 | 1 | 16 |
| 1:A:62:LEU:O | 1:A:66:LEU:HD13 | 0.47 | 2.09 | 17 | 7 |
| 1:A:20:ARG:CZ | 1:A:57:TRP:HB2 | 0.47 | 2.39 | 4 | 1 |
| 1:A:35:ALA:O | 1:A:37:GLN:HG3 | 0.47 | 2.10 | 6 | 2 |
| 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:37:GLN:NE2 | 0.47 | 2.23 | 18 | 2 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|---|---|---|---|---|---|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:9:CYS:CB | 1:A:37:GLN:HE22 | 0.47 | 2.23 | 12 | 1 |
| 1:A:52:ASP:OD1 | 1:A:54:LYS:HB2 | 0.47 | 2.10 | 4 | 2 |
| 1:A:15:GLU:OE1 | 1:A:51:ILE:HG23 | 0.46 | 2.10 | 15 | 2 |
| 1:A:24:LYS:HE3 | 1:A:43:LYS:HA | 0.46 | 1.87 | 5 | 2 |
| 1:A:24:LYS:CE | 1:A:43:LYS:HA | 0.45 | 2.41 | 4 | 1 |
| 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:42:LEU:O | 0.45 | 2.11 | 17 | 1 |
| 1:A:31:THR:CB | 1:A:34:CYS:HB2 | 0.45 | 2.42 | 13 | 5 |
| 1:A:62:LEU:O | 1:A:66:LEU:HD23 | 0.45 | 2.11 | 18 | 2 |
| 1:A:51:ILE:HG21 | 1:A:58:ILE:HD11 | 0.45 | 1.88 | 13 | 11 |
| 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:CD2 | 0.44 | 2.21 | 7 | 1 |
| 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:43:LYS:HA | 0.44 | 1.89 | 11 | 2 |
| 1:A:20:ARG:HG2 | 1:A:57:TRP:CE3 | 0.44 | 2.48 | 16 | 1 |
| 1:A:58:ILE:CG2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 0.44 | 2.42 | 20 | 6 |
| 1:A:26:LEU:HD12 | 1:A:39:VAL:O | 0.44 | 2.13 | 8 | 4 |
| 1:A:29:LEU:HB3 | 1:A:37:GLN:HB2 | 0.44 | 1.89 | 4 | 2 |
| 1:A:56:LYS:N | 1:A:56:LYS:HD2 | 0.44 | 2.27 | 6 | 1 |
| 1:A:28:ILE:HD13 | 1:A:38:ILE:HG23 | 0.44 | 1.88 | 15 | 1 |
| 1:A:41:ARG:HA | 1:A:47:ARG:O | 0.44 | 2.12 | 14 | 1 |
| 1:A:9:CYS:CB | 1:A:10:PRO:HD2 | 0.44 | 2.43 | 17 | 1 |
| 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:43:LYS:O | 0.44 | 2.13 | 8 | 1 |
| 1:A:29:LEU:HD13 | 1:A:30:ASN:N | 0.43 | 2.28 | 11 | 1 |
| 1:A:10:PRO:HD2 | 1:A:37:GLN:HE21 | 0.43 | 1.72 | 4 | 1 |
| 1:A:18:ILE:HD13 | 1:A:49:VAL:HG11 | 0.43 | 1.90 | 15 | 1 |
| 1:A:40:ALA:O | 1:A:48:GLN:HA | 0.43 | 2.13 | 20 | 1 |
| 1:A:31:THR:HB | 1:A:34:CYS:HB2 | 0.43 | 1.91 | 11 | 6 |
| 1:A:59:GLN:O | 1:A:63:GLU:HG3 | 0.43 | 2.13 | 9 | 2 |
| 1:A:45:ASN:O | 1:A:46:ASN:HB3 | 0.42 | 2.14 | 11 | 1 |
| 1:A:10:PRO:HD2 | 1:A:31:THR:HG22 | 0.42 | 1.92 | 1 | 1 |
| 1:A:26:LEU:HD13 | 1:A:40:ALA:HB2 | 0.42 | 1.92 | 1 | 4 |
| 1:A:26:LEU:CD2 | 1:A:38:ILE:HG22 | 0.42 | 2.41 | 10 | 1 |
| 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:27:LYS:H | 0.42 | 1.74 | 2 | 1 |
| 1:A:59:GLN:NE2 | 1:A:62:LEU:HD22 | 0.41 | 2.30 | 15 | 2 |
| 1:A:20:ARG:HA | 1:A:23:VAL:HG12 | 0.41 | 1.92 | 13 | 1 |
| 1:A:26:LEU:HD12 | 1:A:27:LYS:N | 0.41 | 2.30 | 13 | 1 |
| 1:A:15:GLU:OE2 | 1:A:49:VAL:HG22 | 0.41 | 2.15 | 15 | 1 |
| 1:A:40:ALA:HB2 | 1:A:51:ILE:HD11 | 0.41 | 1.92 | 2 | 1 |
| 1:A:10:PRO:HG2 | 1:A:31:THR:HG22 | 0.41 | 1.92 | 6 | 1 |
| 1:A:26:LEU:HD11 | 1:A:51:ILE:CD1 | 0.41 | 2.46 | 6 | 1 |
| 1:A:32:PRO:C | 1:A:33:ASN:HD22 | 0.41 | 2.20 | 17 | 1 |
| 1:A:27:LYS:HE2 | 1:A:28:ILE:O | 0.41 | 2.16 | 18 | 1 |
| 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:43:LYS:CA | 0.40 | 2.46 | 17 | 1 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|---|---|---|---|---|---|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:25:HIS:CD2 | 1:A:25:HIS:N | 0.40 | 2.89 | 3 | 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 | 58/98 (59%) | 49±1 (85±2%) | 7±1 (12±2%) | 2±0 (4±1%) | 6 | 34 |
| All | All | 1160/1960 (59%) | 982 (85%) | 136 (12%) | 42 (4%) | 6 | 34 |

All 5 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 | 33 | ASN | 20 |
| 1 | A | 32 | PRO | 19 |
| 1 | A | 36 | LEU | 1 |
| 1 | A | 25 | HIS | 1 |
| 1 | A | 10 | PRO | 1 |

### 6.3.2 Protein sidechains (i)

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

| Mol | Chain | Analysed | Rotameric | Outliers | Percentiles | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | 53/88 (60%) | 45±1 (85±3%) | 8±1 (15±3%) | 6 | 44 |
| All | All | 1060/1760 (60%) | 903 (85%) | 157 (15%) | 6 | 44 |

All 24 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 | 29 | LEU | 20 |
| 1 | A | 25 | HIS | 19 |
| 1 | A | 62 | LEU | 18 |
| 1 | A | 14 | PHE | 16 |
| 1 | A | 31 | THR | 13 |
| 1 | A | 33 | ASN | 10 |
| 1 | A | 11 | CYS | 7 |
| 1 | A | 49 | VAL | 7 |
| 1 | A | 64 | LYS | 6 |
| 1 | A | 30 | ASN | 5 |
| 1 | A | 36 | LEU | 4 |
| 1 | A | 26 | LEU | 4 |
| 1 | A | 39 | VAL | 4 |
| 1 | A | 27 | LYS | 4 |
| 1 | A | 20 | ARG | 4 |
| 1 | A | 12 | ARG | 3 |
| 1 | A | 9 | CYS | 3 |
| 1 | A | 54 | LYS | 3 |
| 1 | A | 41 | ARG | 2 |
| 1 | A | 37 | GLN | 1 |
| 1 | A | 56 | LYS | 1 |
| 1 | A | 15 | GLU | 1 |
| 1 | A | 22 | ASN | 1 |
| 1 | A | 34 | CYS | 1 |

### 6.3.3 RNA (i)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

## 6.5 Carbohydrates (i)

There are no monosaccharides in this entry.

## 6.6 Ligand geometry (i)

There are no ligands in this entry.

## 6.7 Other polymers (i)

There are no such molecules in this entry.

## 6.8 Polymer linkage issues (i)

There are no chain breaks in this entry.

# 7 Chemical shift validation (i)

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 86% for the well-defined parts and 69% for the entire structure.

## 7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *shifts_starch.nmrstar*

### 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 | 1021 |
| Number of shifts mapped to atoms | 1021 |
| 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 |
|---|---|---|---|
| $^{13}C_{\alpha}$ | 95 | -0.05 ± 0.16 | None needed (< 0.5 ppm) |
| $^{13}C_{\beta}$ | 91 | 0.04 ± 0.13 | None needed (< 0.5 ppm) |
| $^{13}C'$ | 61 | -0.04 ± 0.09 | None needed (< 0.5 ppm) |
| $^{15}N$ | 91 | -0.11 ± 0.29 | None needed (< 0.5 ppm) |

### 7.1.3 Completeness of resonance assignments (i)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 86%, i.e. 737 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 860. 0 out of 10 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

| | Total | $^{1}H$ | $^{13}C$ | $^{15}N$ |
|---|---|---|---|---|
| Backbone | 279/284 (98%) | 113/113 (100%) | 111/116 (96%) | 55/55 (100%) |
| Sidechain | 420/519 (81%) | 276/336 (82%) | 135/156 (87%) | 9/27 (33%) |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| | Total | $^{1}$H | $^{13}$C | $^{15}$N |
|---|---|---|---|---|
| Aromatic | 38/57 (67%) | 21/28 (75%) | 16/24 (67%) | 1/5 (20%) |
| Overall | 737/860 (86%) | 410/477 (86%) | 262/296 (89%) | 65/87 (75%) |

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 69%, i.e. 1021 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1487. 0 out of 13 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

| | Total | $^{1}$H | $^{13}$C | $^{15}$N |
|---|---|---|---|---|
| Backbone | 417/485 (86%) | 170/195 (87%) | 156/196 (80%) | 91/94 (97%) |
| Sidechain | 558/936 (60%) | 350/596 (59%) | 197/277 (71%) | 11/63 (17%) |
| Aromatic | 46/66 (70%) | 25/32 (78%) | 20/29 (69%) | 1/5 (20%) |
| Overall | 1021/1487 (69%) | 545/823 (66%) | 373/502 (74%) | 103/162 (64%) |

### 7.1.4 Statistically unusual chemical shifts (i)

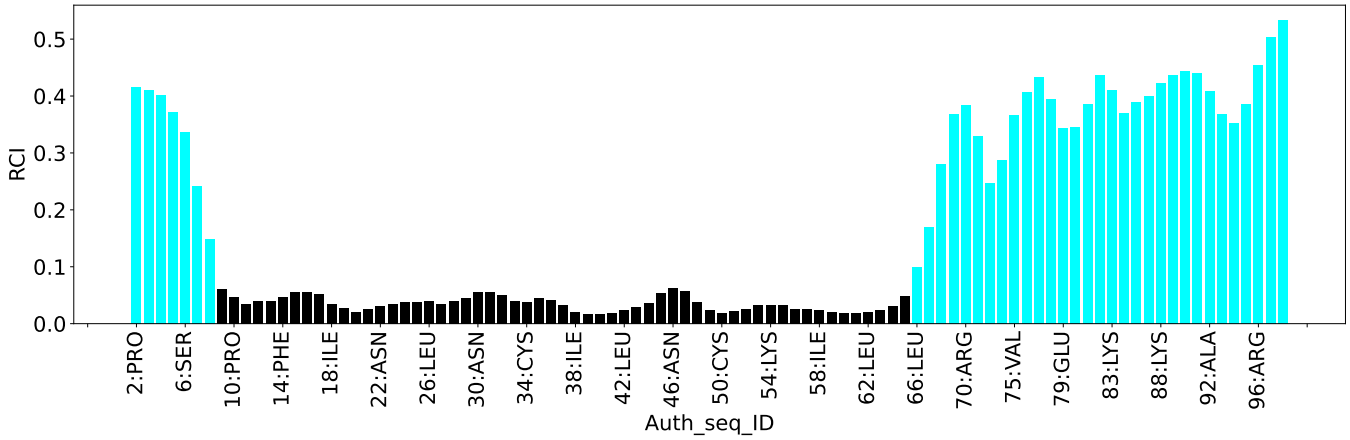
The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

| List Id | Chain | Res | Type | Atom | Shift, *ppm* | Expected range, *ppm* | Z-score |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | 20 | ARG | HB2 | 0.33 | 0.52 – 3.08 | -5.7 |

### 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:PRO
6:SER
10:PRO
14:PHE
18:ILE
22:ASN
26:LEU
30:ASN
34:CYS
38:ILE
42:LEU
46:ASN
50:CYS
54:LYS
58:ILE
62:LEU
66:LEU
70:ARG
75:VAL
79:GLU
83:LYS
88:LYS
92:ALA
96:ARG
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 | 1499 |
| Intra-residue (\|i-j\|=0) | 665 |
| Sequential (\|i-j\|=1) | 316 |
| Medium range (\|i-j\|>1 and \|i-j\|<5) | 222 |
| Long range (\|i-j\|≥5) | 296 |
| Inter-chain | 0 |
| Hydrogen bond restraints | 0 |
| Disulfide bond restraints | 0 |
| Total dihedral-angle restraints | 0 |
| Number of unmapped restraints | 0 |
| Number of restraints per residue | 15.3 |
| Number of long range restraints per residue[1] | 3.0 |

[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) | 63.5 | 0.2 |
| 0.2-0.5 (Medium) | 58.6 | 0.5 |
| >0.5 (Large) | 69.4 | 2.53 |

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

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

# 9 Distance violation analysis (i)

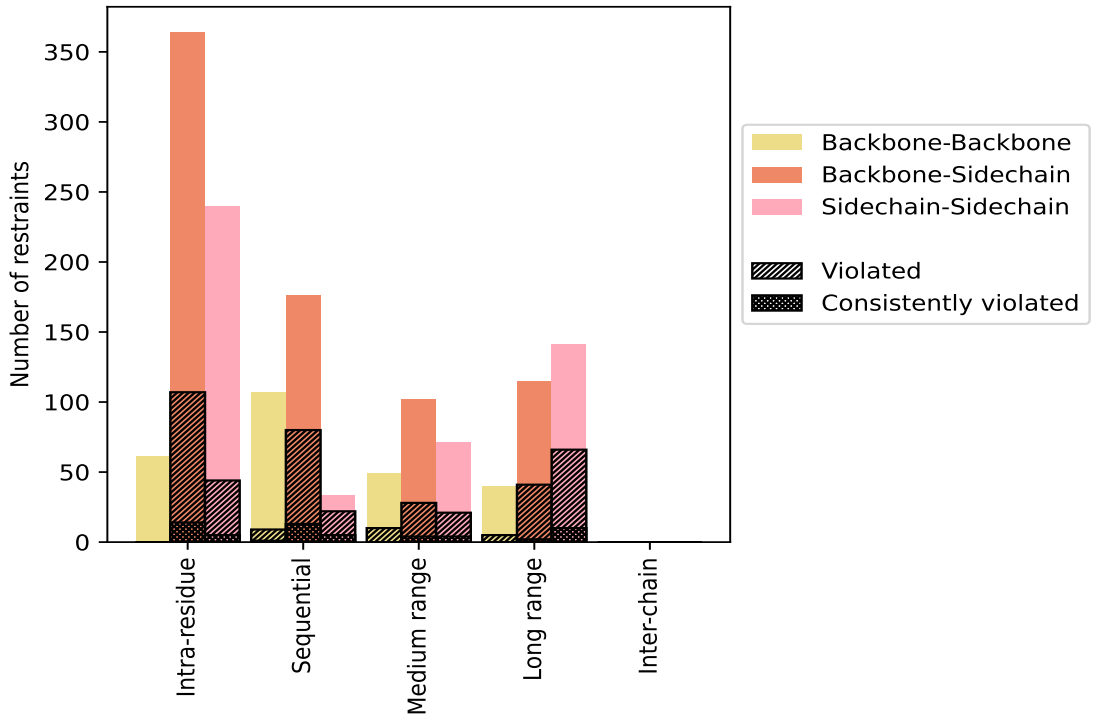
## 9.1 Summary of distance violations (i)

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) | 665 | 44.4 | 151 | 22.7 | 10.1 | 19 | 2.9 | 1.3 |
| Backbone-Backbone | 61 | 4.1 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 364 | 24.3 | 107 | 29.4 | 7.1 | 14 | 3.8 | 0.9 |
| Sidechain-Sidechain | 240 | 16.0 | 44 | 18.3 | 2.9 | 5 | 2.1 | 0.3 |
| Sequential (\|i-j\|=1) | 316 | 21.1 | 111 | 35.1 | 7.4 | 19 | 6.0 | 1.3 |
| Backbone-Backbone | 107 | 7.1 | 9 | 8.4 | 0.6 | 1 | 0.9 | 0.1 |
| Backbone-Sidechain | 176 | 11.7 | 80 | 45.5 | 5.3 | 13 | 7.4 | 0.9 |
| Sidechain-Sidechain | 33 | 2.2 | 22 | 66.7 | 1.5 | 5 | 15.2 | 0.3 |
| Medium range (\|i-j\|>1 & \|i-j\|<5) | 222 | 14.8 | 59 | 26.6 | 3.9 | 8 | 3.6 | 0.5 |
| Backbone-Backbone | 49 | 3.3 | 10 | 20.4 | 0.7 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 102 | 6.8 | 28 | 27.5 | 1.9 | 4 | 3.9 | 0.3 |
| Sidechain-Sidechain | 71 | 4.7 | 21 | 29.6 | 1.4 | 4 | 5.6 | 0.3 |
| Long range (\|i-j\|≥5) | 296 | 19.7 | 112 | 37.8 | 7.5 | 12 | 4.1 | 0.8 |
| Backbone-Backbone | 40 | 2.7 | 5 | 12.5 | 0.3 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 115 | 7.7 | 41 | 35.7 | 2.7 | 2 | 1.7 | 0.1 |
| Sidechain-Sidechain | 141 | 9.4 | 66 | 46.8 | 4.4 | 10 | 7.1 | 0.7 |
| Inter-chain | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Backbone | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Sidechain-Sidechain | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Hydrogen bond | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Disulfide bond | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Total | 1499 | 100.0 | 433 | 28.9 | 28.9 | 58 | 3.9 | 3.9 |
| Backbone-Backbone | 257 | 17.1 | 24 | 9.3 | 1.6 | 1 | 0.4 | 0.1 |
| Backbone-Sidechain | 757 | 50.5 | 256 | 33.8 | 17.1 | 33 | 4.4 | 2.2 |
| Sidechain-Sidechain | 485 | 32.4 | 153 | 31.5 | 10.2 | 24 | 4.9 | 1.6 |

[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 | 70 | 42 | 26 | 38 | 0 | 176 | 0.51 | 1.71 | 0.44 | 0.31 |
| 2 | 70 | 56 | 25 | 65 | 0 | 216 | 0.57 | 2.53 | 0.5 | 0.38 |
| 3 | 71 | 50 | 23 | 41 | 0 | 185 | 0.48 | 1.92 | 0.4 | 0.31 |
| 4 | 68 | 48 | 21 | 36 | 0 | 173 | 0.47 | 1.87 | 0.41 | 0.26 |
| 5 | 70 | 54 | 21 | 45 | 0 | 190 | 0.47 | 1.88 | 0.4 | 0.3 |
| 6 | 82 | 46 | 24 | 53 | 0 | 205 | 0.53 | 1.73 | 0.44 | 0.39 |
| 7 | 68 | 44 | 27 | 40 | 0 | 179 | 0.49 | 1.88 | 0.43 | 0.32 |
| 8 | 71 | 50 | 28 | 42 | 0 | 191 | 0.5 | 2.5 | 0.43 | 0.34 |
| 9 | 75 | 54 | 27 | 44 | 0 | 200 | 0.48 | 1.89 | 0.4 | 0.33 |
| 10 | 69 | 49 | 31 | 49 | 0 | 198 | 0.56 | 1.72 | 0.43 | 0.4 |
| 11 | 63 | 47 | 28 | 44 | 0 | 182 | 0.51 | 2.2 | 0.45 | 0.32 |

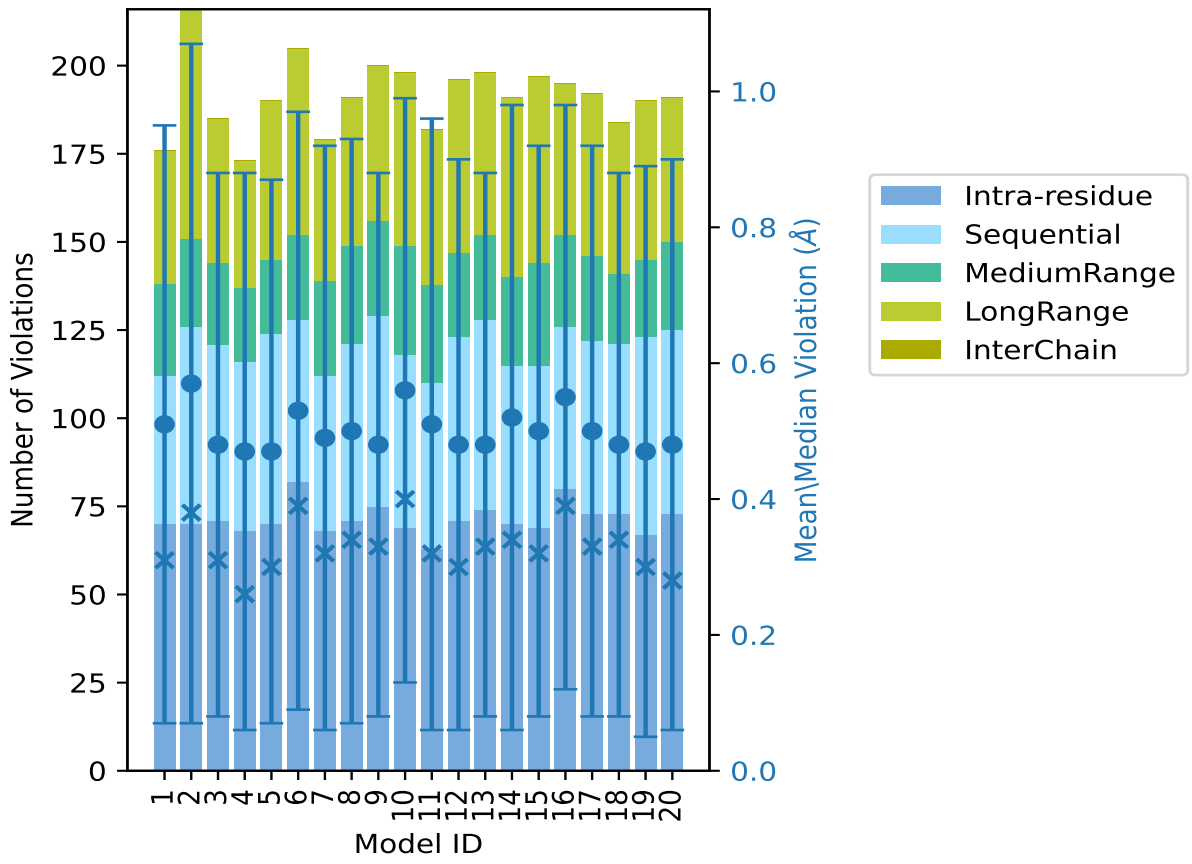
*Continued on next page...*

*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 | 71 | 52 | 24 | 49 | 0 | 196 | 0.48 | 1.84 | 0.42 | 0.3 |
| 13 | 74 | 54 | 24 | 46 | 0 | 198 | 0.48 | 1.85 | 0.4 | 0.33 |
| 14 | 70 | 45 | 25 | 51 | 0 | 191 | 0.52 | 2.51 | 0.46 | 0.34 |
| 15 | 69 | 46 | 29 | 53 | 0 | 197 | 0.5 | 1.88 | 0.42 | 0.32 |
| 16 | 80 | 46 | 26 | 43 | 0 | 195 | 0.55 | 1.96 | 0.43 | 0.39 |
| 17 | 73 | 49 | 24 | 46 | 0 | 192 | 0.5 | 1.9 | 0.42 | 0.33 |
| 18 | 73 | 48 | 20 | 43 | 0 | 184 | 0.48 | 2.07 | 0.4 | 0.34 |
| 19 | 67 | 56 | 22 | 45 | 0 | 190 | 0.47 | 2.51 | 0.42 | 0.3 |
| 20 | 73 | 52 | 25 | 41 | 0 | 191 | 0.48 | 1.89 | 0.42 | 0.28 |

[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

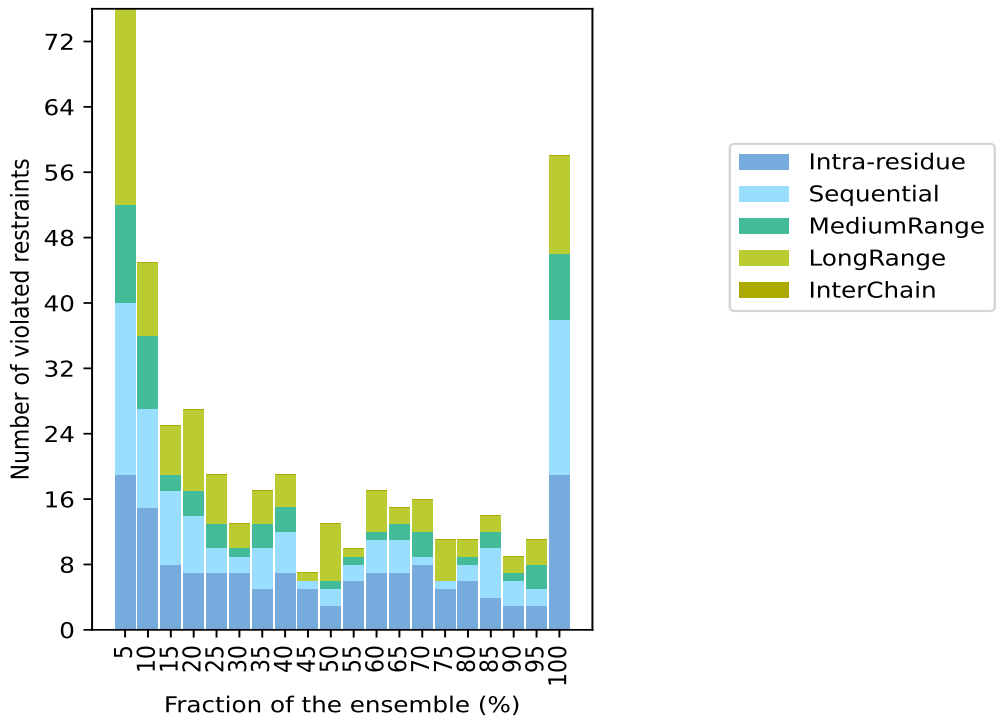
## 9.3 Distance violation statistics for the ensemble (i)

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, 1066(IR:514, SQ:205, MR:163, LR:184, IC:0) restraints are not violated in the ensemble.

| Number of violated restraints | | | | | | Fraction of the ensemble | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| IR[1] | SQ[2] | MR[3] | LR[4] | IC[5] | Total | Count[6] | % |
| 19 | 21 | 12 | 24 | 0 | 76 | 1 | 5.0 |
| 15 | 12 | 9 | 9 | 0 | 45 | 2 | 10.0 |
| 8 | 9 | 2 | 6 | 0 | 25 | 3 | 15.0 |
| 7 | 7 | 3 | 10 | 0 | 27 | 4 | 20.0 |
| 7 | 3 | 3 | 6 | 0 | 19 | 5 | 25.0 |
| 7 | 2 | 1 | 3 | 0 | 13 | 6 | 30.0 |
| 5 | 5 | 3 | 4 | 0 | 17 | 7 | 35.0 |
| 7 | 5 | 3 | 4 | 0 | 19 | 8 | 40.0 |
| 5 | 1 | 0 | 1 | 0 | 7 | 9 | 45.0 |
| 3 | 2 | 1 | 7 | 0 | 13 | 10 | 50.0 |
| 6 | 2 | 1 | 1 | 0 | 10 | 11 | 55.0 |
| 7 | 4 | 1 | 5 | 0 | 17 | 12 | 60.0 |
| 7 | 4 | 2 | 2 | 0 | 15 | 13 | 65.0 |
| 8 | 1 | 3 | 4 | 0 | 16 | 14 | 70.0 |
| 5 | 1 | 0 | 5 | 0 | 11 | 15 | 75.0 |
| 6 | 2 | 1 | 2 | 0 | 11 | 16 | 80.0 |
| 4 | 6 | 2 | 2 | 0 | 14 | 17 | 85.0 |
| 3 | 3 | 1 | 2 | 0 | 9 | 18 | 90.0 |
| 3 | 2 | 3 | 3 | 0 | 11 | 19 | 95.0 |
| 19 | 19 | 8 | 12 | 0 | 58 | 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

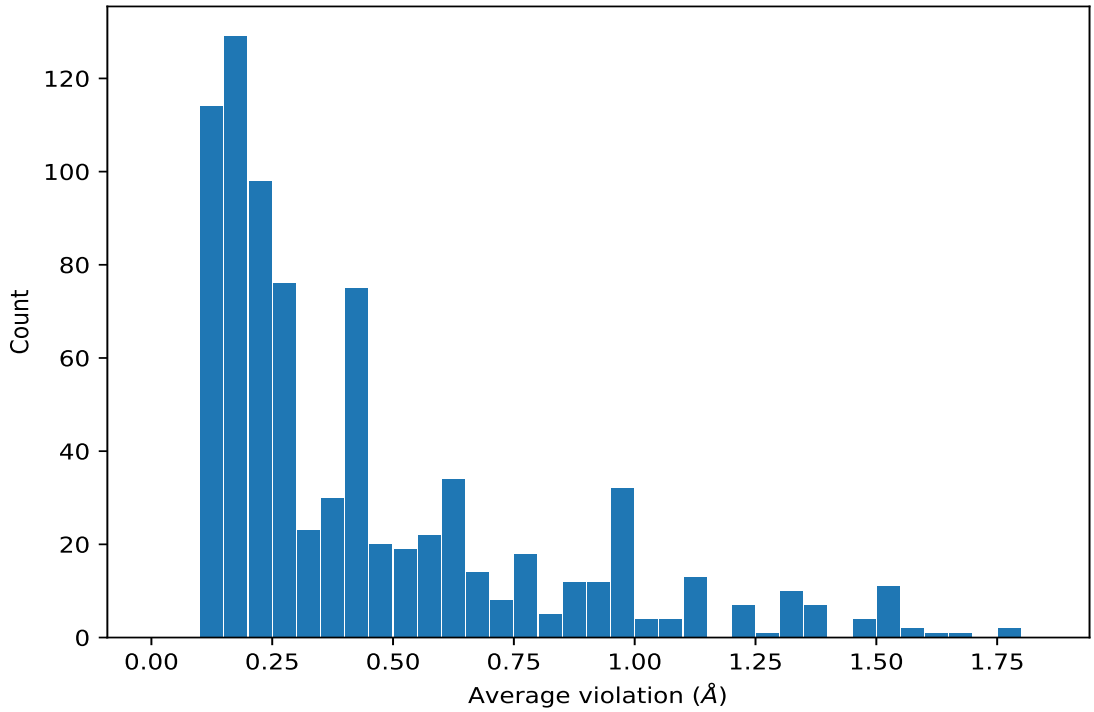
### 9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble (i)




## 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) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (3,278) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HB3 | 20 | 1.78 | 0.14 | 1.85 |
| (3,278) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:64:LYS:HB3 | 20 | 1.78 | 0.14 | 1.85 |
| (1,250) | 1:A:31:THR:H | 1:A:29:LEU:HB2 | 20 | 1.66 | 0.03 | 1.65 |
| (1,556) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:67:ASN:HD22 | 20 | 1.58 | 0.14 | 1.6 |
| (1,171) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 20 | 1.57 | 0.04 | 1.57 |
| (1,1186) | 1:A:61:TYR:HA | 1:A:64:LYS:HB3 | 20 | 1.5 | 0.26 | 1.64 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:62:LEU:HB3 | 20 | 1.47 | 0.05 | 1.46 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:62:LEU:HB3 | 20 | 1.47 | 0.05 | 1.46 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:62:LEU:HB3 | 20 | 1.47 | 0.05 | 1.46 |
| (1,605) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:61:TYR:HB2 | 20 | 1.46 | 0.02 | 1.46 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HB3 | 20 | 1.35 | 0.63 | 1.2 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HB3 | 20 | 1.35 | 0.63 | 1.2 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HB3 | 20 | 1.35 | 0.63 | 1.2 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 20 | 1.35 | 0.63 | 1.2 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 20 | 1.35 | 0.63 | 1.2 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 20 | 1.35 | 0.63 | 1.2 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,685) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:9:CYS:HB2 | 20 | 1.32 | 0.31 | 1.42 |
| (1,549) | 1:A:59:GLN:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 20 | 1.25 | 0.07 | 1.23 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG11 | 20 | 1.1 | 0.28 | 1.2 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG13 | 20 | 1.1 | 0.28 | 1.2 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG12 | 20 | 1.1 | 0.28 | 1.2 |
| (1,571) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HB3 | 20 | 1.03 | 0.2 | 1.11 |
| (1,339) | 1:A:45:ASN:H | 1:A:44:ASN:HD22 | 20 | 1.03 | 0.13 | 1.08 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD13 | 20 | 0.99 | 0.19 | 0.94 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD12 | 20 | 0.99 | 0.19 | 0.94 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD11 | 20 | 0.99 | 0.19 | 0.94 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 20 | 0.99 | 0.19 | 0.94 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 20 | 0.99 | 0.19 | 0.94 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 20 | 0.99 | 0.19 | 0.94 |
| (1,261) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:63:GLU:HB3 | 20 | 0.98 | 0.01 | 0.98 |
| (1,455) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:29:LEU:HB2 | 20 | 0.96 | 0.24 | 1.06 |
| (1,297) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 20 | 0.93 | 0.02 | 0.93 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:53:PRO:HB2 | 20 | 0.93 | 0.32 | 0.91 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:53:PRO:HB2 | 20 | 0.93 | 0.32 | 0.91 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:53:PRO:HB2 | 20 | 0.93 | 0.32 | 0.91 |
| (1,287) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:66:LEU:HB3 | 20 | 0.89 | 0.04 | 0.9 |
| (1,156) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HB3 | 20 | 0.88 | 0.32 | 1.04 |
| (1,347) | 1:A:11:CYS:H | 1:A:10:PRO:HD3 | 20 | 0.88 | 0.24 | 0.96 |
| (1,575) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:24:LYS:HD2 | 20 | 0.88 | 0.39 | 1.09 |
| (1,12) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:LEU:HB3 | 20 | 0.84 | 0.14 | 0.82 |
| (3,144) | 1:A:50:CYS:HB2 | 1:A:11:CYS:HB2 | 20 | 0.82 | 0.3 | 0.79 |
| (3,144) | 1:A:50:CYS:HB2 | 1:A:14:PHE:HB2 | 20 | 0.82 | 0.3 | 0.79 |
| (1,223) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 20 | 0.82 | 0.03 | 0.82 |
| (1,910) | 1:A:10:PRO:HG2 | 1:A:10:PRO:HA | 20 | 0.76 | 0.05 | 0.75 |
| (1,1047) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:29:LEU:HB3 | 20 | 0.75 | 0.38 | 0.62 |
| (1,693) | 1:A:53:PRO:HD2 | 1:A:53:PRO:HB2 | 20 | 0.74 | 0.01 | 0.75 |
| (1,847) | 1:A:53:PRO:HB3 | 1:A:54:LYS:H | 20 | 0.73 | 0.02 | 0.73 |
| (1,155) | 1:A:65:ALA:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 20 | 0.65 | 0.08 | 0.63 |
| (1,809) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:61:TYR:HD2 | 20 | 0.64 | 0.03 | 0.66 |
| (1,567) | 1:A:60:GLU:HA | 1:A:60:GLU:HG3 | 20 | 0.63 | 0.19 | 0.7 |
| (1,296) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:63:GLU:HB3 | 20 | 0.59 | 0.12 | 0.59 |
| (1,229) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 20 | 0.59 | 0.02 | 0.58 |
| (1,218) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:42:LEU:HB3 | 20 | 0.56 | 0.16 | 0.55 |
| (1,639) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:44:ASN:HB2 | 20 | 0.47 | 0.01 | 0.47 |
| (1,194) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:50:CYS:HB3 | 20 | 0.44 | 0.05 | 0.41 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB2 | 20 | 0.44 | 0.03 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB3 | 20 | 0.44 | 0.03 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB1 | 20 | 0.44 | 0.03 | 0.44 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB2 | 20 | 0.44 | 0.03 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB3 | 20 | 0.44 | 0.03 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB1 | 20 | 0.44 | 0.03 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB2 | 20 | 0.44 | 0.03 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB3 | 20 | 0.44 | 0.03 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB1 | 20 | 0.44 | 0.03 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HB3 | 20 | 0.44 | 0.03 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HB3 | 20 | 0.44 | 0.03 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HB3 | 20 | 0.44 | 0.03 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB2 | 20 | 0.44 | 0.03 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB3 | 20 | 0.44 | 0.03 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB1 | 20 | 0.44 | 0.03 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB2 | 20 | 0.44 | 0.03 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB3 | 20 | 0.44 | 0.03 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB1 | 20 | 0.44 | 0.03 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB2 | 20 | 0.44 | 0.03 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB3 | 20 | 0.44 | 0.03 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB1 | 20 | 0.44 | 0.03 | 0.44 |
| (1,88) | 1:A:42:LEU:H | 1:A:42:LEU:HB3 | 20 | 0.39 | 0.02 | 0.39 |
| (1,690) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HB | 20 | 0.36 | 0.06 | 0.36 |
| (1,572) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:43:LYS:HB3 | 20 | 0.36 | 0.01 | 0.36 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 20 | 0.36 | 0.16 | 0.29 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 20 | 0.36 | 0.16 | 0.29 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 20 | 0.36 | 0.16 | 0.29 |
| (1,718) | 1:A:47:ARG:HD3 | 1:A:47:ARG:HG3 | 20 | 0.35 | 0.24 | 0.22 |
| (1,334) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:53:PRO:HD3 | 20 | 0.35 | 0.04 | 0.34 |
| (1,706) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:50:CYS:HB2 | 20 | 0.31 | 0.04 | 0.32 |
| (1,909) | 1:A:10:PRO:HB2 | 1:A:10:PRO:HA | 20 | 0.3 | 0.01 | 0.31 |
| (1,362) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:57:TRP:HB2 | 20 | 0.26 | 0.01 | 0.26 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG22 | 20 | 0.25 | 0.02 | 0.24 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG21 | 20 | 0.25 | 0.02 | 0.24 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG23 | 20 | 0.25 | 0.02 | 0.24 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG21 | 20 | 0.21 | 0.03 | 0.22 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG23 | 20 | 0.21 | 0.03 | 0.22 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG22 | 20 | 0.21 | 0.03 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:55:LEU:HB3 | 20 | 0.2 | 0.02 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:55:LEU:HB3 | 20 | 0.2 | 0.02 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:55:LEU:HB3 | 20 | 0.2 | 0.02 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB2 | 20 | 0.2 | 0.02 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB3 | 20 | 0.2 | 0.02 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB1 | 20 | 0.2 | 0.02 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB2 | 20 | 0.2 | 0.02 | 0.2 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB3 | 20 | 0.2 | 0.02 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB1 | 20 | 0.2 | 0.02 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB2 | 20 | 0.2 | 0.02 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB3 | 20 | 0.2 | 0.02 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB1 | 20 | 0.2 | 0.02 | 0.2 |
| (1,889) | 1:A:57:TRP:HB2 | 1:A:57:TRP:HD1 | 20 | 0.2 | 0.01 | 0.2 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD12 | 20 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD13 | 20 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD11 | 20 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG22 | 20 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG21 | 20 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG23 | 20 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (1,132) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:23:VAL:HB | 20 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:23:VAL:H | 20 | 0.15 | 0.01 | 0.15 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:23:VAL:H | 20 | 0.15 | 0.01 | 0.15 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:23:VAL:H | 20 | 0.15 | 0.01 | 0.15 |
| (1,214) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:47:ARG:H | 20 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HB2 | 20 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 20 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 20 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 20 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD2 | 1:A:13:PHE:HE1 | 20 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD2 | 1:A:13:PHE:HE2 | 20 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD1 | 1:A:13:PHE:HE1 | 20 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD1 | 1:A:13:PHE:HE2 | 20 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,866) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:13:PHE:HE1 | 19 | 1.33 | 0.43 | 1.64 |
| (1,866) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:13:PHE:HE2 | 19 | 1.33 | 0.43 | 1.64 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG23 | 19 | 0.77 | 0.47 | 1.08 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG22 | 19 | 0.77 | 0.47 | 1.08 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG21 | 19 | 0.77 | 0.47 | 1.08 |
| (1,683) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:32:PRO:HB3 | 19 | 0.77 | 0.24 | 0.88 |
| (1,608) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HB2 | 19 | 0.5 | 0.01 | 0.5 |
| (3,75) | 1:A:31:THR:H | 1:A:33:ASN:HD22 | 19 | 0.39 | 0.26 | 0.26 |
| (3,75) | 1:A:31:THR:H | 1:A:37:GLN:HE21 | 19 | 0.39 | 0.26 | 0.26 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD11 | 19 | 0.38 | 0.19 | 0.28 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD12 | 19 | 0.38 | 0.19 | 0.28 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD13 | 19 | 0.38 | 0.19 | 0.28 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HG | 19 | 0.38 | 0.19 | 0.28 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD12 | 1:A:38:ILE:CG2 | 19 | 0.34 | 0.4 | 0.14 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD11 | 1:A:38:ILE:CG2 | 19 | 0.34 | 0.4 | 0.14 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD13 | 1:A:38:ILE:CG2 | 19 | 0.34 | 0.4 | 0.14 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD11 | 19 | 0.26 | 0.26 | 0.17 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD13 | 19 | 0.26 | 0.26 | 0.17 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD12 | 19 | 0.26 | 0.26 | 0.17 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HG | 19 | 0.26 | 0.26 | 0.17 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:27:LYS:HG3 | 19 | 0.23 | 0.04 | 0.22 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB2 | 19 | 0.23 | 0.04 | 0.22 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB3 | 19 | 0.23 | 0.04 | 0.22 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB1 | 19 | 0.23 | 0.04 | 0.22 |
| (1,745) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:59:GLN:HA | 19 | 0.19 | 0.07 | 0.18 |
| (1,741) | 1:A:66:LEU:HA | 1:A:66:LEU:HB2 | 19 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:HG | 18 | 0.56 | 0.03 | 0.55 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 18 | 0.56 | 0.03 | 0.55 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 18 | 0.56 | 0.03 | 0.55 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 18 | 0.56 | 0.03 | 0.55 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ARG:HB3 | 18 | 0.41 | 0.24 | 0.38 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ARG:HB3 | 18 | 0.41 | 0.24 | 0.38 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ARG:HB3 | 18 | 0.41 | 0.24 | 0.38 |
| (1,1194) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:HG | 18 | 0.35 | 0.02 | 0.35 |
| (3,246) | 1:A:39:VAL:HA | 1:A:29:LEU:HB3 | 18 | 0.28 | 0.05 | 0.3 |
| (3,246) | 1:A:39:VAL:HA | 1:A:27:LYS:HB3 | 18 | 0.28 | 0.05 | 0.3 |
| (1,290) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:63:GLU:HG2 | 18 | 0.2 | 0.04 | 0.21 |
| (1,1188) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 18 | 0.2 | 0.04 | 0.19 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB2 | 18 | 0.18 | 0.04 | 0.17 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB3 | 18 | 0.18 | 0.04 | 0.17 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB1 | 18 | 0.18 | 0.04 | 0.17 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB2 | 18 | 0.18 | 0.04 | 0.17 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB3 | 18 | 0.18 | 0.04 | 0.17 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB1 | 18 | 0.18 | 0.04 | 0.17 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB2 | 18 | 0.18 | 0.04 | 0.17 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB3 | 18 | 0.18 | 0.04 | 0.17 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB1 | 18 | 0.18 | 0.04 | 0.17 |
| (1,948) | 1:A:21:ALA:HA | 1:A:22:ASN:HA | 18 | 0.17 | 0.03 | 0.16 |
| (1,249) | 1:A:31:THR:H | 1:A:31:THR:HB | 18 | 0.14 | 0.03 | 0.13 |
| (1,712) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:37:GLN:HG3 | 17 | 0.78 | 0.32 | 0.93 |
| (3,69) | 1:A:22:ASN:HD21 | 1:A:42:LEU:HB2 | 17 | 0.7 | 0.38 | 0.78 |
| (3,69) | 1:A:22:ASN:HD21 | 1:A:43:LYS:HD2 | 17 | 0.7 | 0.38 | 0.78 |
| (1,269) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:60:GLU:HG3 | 17 | 0.6 | 0.08 | 0.62 |
| (1,76) | 1:A:5:LEU:H | 1:A:5:LEU:HB3 | 17 | 0.44 | 0.18 | 0.36 |
| (1,389) | 1:A:19:ALA:H | 1:A:18:ILE:HG13 | 17 | 0.31 | 0.04 | 0.31 |
| (1,279) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HB3 | 17 | 0.3 | 0.08 | 0.3 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG21 | 17 | 0.24 | 0.05 | 0.25 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG23 | 17 | 0.24 | 0.05 | 0.25 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG22 | 17 | 0.24 | 0.05 | 0.25 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD13 | 17 | 0.24 | 0.05 | 0.25 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD12 | 17 | 0.24 | 0.05 | 0.25 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD11 | 17 | 0.24 | 0.05 | 0.25 |
| (1,640) | 1:A:5:LEU:HA | 1:A:5:LEU:HB2 | 17 | 0.24 | 0.01 | 0.23 |
| (1,1098) | 1:A:48:GLN:HA | 1:A:41:ARG:HG3 | 17 | 0.22 | 0.04 | 0.21 |
| (3,20) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:59:GLN:HG2 | 17 | 0.21 | 0.05 | 0.21 |
| (3,20) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:60:GLU:HG3 | 17 | 0.21 | 0.05 | 0.21 |
| (1,570) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:63:GLU:HG3 | 17 | 0.2 | 0.14 | 0.15 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:59:GLN:HB2 | 17 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:59:GLN:HB2 | 17 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:59:GLN:HB2 | 17 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (3,132) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:26:LEU:HG | 17 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (3,132) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HG3 | 17 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB2 | 17 | 0.13 | 0.02 | 0.14 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB3 | 17 | 0.13 | 0.02 | 0.14 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB1 | 17 | 0.13 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1208) | 1:A:69:GLY:HA2 | 1:A:68:LYS:HB3 | 16 | 0.74 | 0.45 | 0.58 |
| (1,737) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HD2 | 16 | 0.62 | 0.01 | 0.62 |
| (3,282) | 1:A:65:ALA:HA | 1:A:28:ILE:HG12 | 16 | 0.44 | 0.32 | 0.36 |
| (3,282) | 1:A:65:ALA:HA | 1:A:66:LEU:HB3 | 16 | 0.44 | 0.32 | 0.36 |
| (1,501) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:48:GLN:HE22 | 16 | 0.36 | 0.21 | 0.26 |
| (1,254) | 1:A:16:SER:H | 1:A:15:GLU:HB2 | 16 | 0.32 | 0.08 | 0.35 |
| (1,1158) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:58:ILE:HA | 16 | 0.25 | 0.1 | 0.26 |
| (1,822) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:15:GLU:HB3 | 16 | 0.25 | 0.02 | 0.25 |
| (1,298) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:64:LYS:HG3 | 16 | 0.22 | 0.13 | 0.15 |
| (1,164) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:9:CYS:HB3 | 16 | 0.19 | 0.04 | 0.17 |
| (1,309) | 1:A:34:CYS:H | 1:A:34:CYS:HB3 | 16 | 0.18 | 0.03 | 0.18 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB2 | 16 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB3 | 16 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB1 | 16 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (1,684) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:10:PRO:HD3 | 15 | 1.15 | 0.46 | 1.21 |
| (1,654) | 1:A:37:GLN:HA | 1:A:37:GLN:HG3 | 15 | 0.66 | 0.19 | 0.75 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:28:ILE:HG12 | 15 | 0.64 | 0.14 | 0.7 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:28:ILE:HG12 | 15 | 0.64 | 0.14 | 0.7 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:28:ILE:HG12 | 15 | 0.64 | 0.14 | 0.7 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:53:PRO:HG2 | 15 | 0.64 | 0.14 | 0.7 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:53:PRO:HG2 | 15 | 0.64 | 0.14 | 0.7 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:53:PRO:HG2 | 15 | 0.64 | 0.14 | 0.7 |
| (3,156) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HG2 | 15 | 0.54 | 0.25 | 0.67 |
| (3,156) | 1:A:43:LYS:HE2 | 1:A:43:LYS:HG3 | 15 | 0.54 | 0.25 | 0.67 |
| (1,519) | 1:A:52:ASP:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 15 | 0.52 | 0.22 | 0.6 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:24:LYS:HB3 | 15 | 0.46 | 0.15 | 0.49 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:24:LYS:HD2 | 15 | 0.46 | 0.15 | 0.49 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:41:ARG:HB2 | 15 | 0.46 | 0.15 | 0.49 |
| (3,73) | 1:A:29:LEU:H | 1:A:28:ILE:HG13 | 15 | 0.38 | 0.15 | 0.38 |
| (3,73) | 1:A:29:LEU:H | 1:A:38:ILE:HG12 | 15 | 0.38 | 0.15 | 0.38 |
| (3,31) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:50:CYS:HB3 | 15 | 0.3 | 0.12 | 0.31 |
| (3,31) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:52:ASP:HA | 15 | 0.3 | 0.12 | 0.31 |
| (3,121) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HB2 | 15 | 0.29 | 0.08 | 0.33 |
| (3,121) | 1:A:47:ARG:HA | 1:A:47:ARG:HG3 | 15 | 0.29 | 0.08 | 0.33 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD21 | 15 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD22 | 15 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD23 | 15 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (3,183) | 1:A:32:PRO:HB2 | 1:A:32:PRO:HA | 15 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (3,183) | 1:A:10:PRO:HB2 | 1:A:10:PRO:HA | 15 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,510) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 14 | 1.33 | 0.22 | 1.4 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD11 | 14 | 0.89 | 0.01 | 0.89 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD12 | 14 | 0.89 | 0.01 | 0.89 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD13 | 14 | 0.89 | 0.01 | 0.89 |
| (1,615) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:54:LYS:HG3 | 14 | 0.77 | 0.34 | 0.93 |
| (1,719) | 1:A:47:ARG:HD2 | 1:A:47:ARG:HB3 | 14 | 0.68 | 0.47 | 0.76 |
| (1,742) | 1:A:66:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HG | 14 | 0.66 | 0.0 | 0.66 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD22 | 1:A:4:SER:HB3 | 14 | 0.64 | 0.31 | 0.57 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD23 | 1:A:4:SER:HB3 | 14 | 0.64 | 0.31 | 0.57 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD21 | 1:A:4:SER:HB3 | 14 | 0.64 | 0.31 | 0.57 |
| (3,231) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:29:LEU:HG | 14 | 0.64 | 0.31 | 0.57 |
| (3,231) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:66:LEU:HG | 14 | 0.64 | 0.31 | 0.57 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG23 | 14 | 0.63 | 0.23 | 0.73 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG22 | 14 | 0.63 | 0.23 | 0.73 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG21 | 14 | 0.63 | 0.23 | 0.73 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG11 | 14 | 0.63 | 0.23 | 0.73 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG13 | 14 | 0.63 | 0.23 | 0.73 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG12 | 14 | 0.63 | 0.23 | 0.73 |
| (1,151) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 14 | 0.57 | 0.01 | 0.57 |
| (3,143) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:11:CYS:HB2 | 14 | 0.47 | 0.17 | 0.4 |
| (3,143) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:14:PHE:HB2 | 14 | 0.47 | 0.17 | 0.4 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HB2 | 14 | 0.45 | 0.2 | 0.46 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HB2 | 14 | 0.45 | 0.2 | 0.46 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HB2 | 14 | 0.45 | 0.2 | 0.46 |
| (1,122) | 1:A:28:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG13 | 14 | 0.42 | 0.03 | 0.41 |
| (1,791) | 1:A:30:ASN:HD22 | 1:A:30:ASN:HB3 | 14 | 0.4 | 0.1 | 0.43 |
| (3,44) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 14 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (3,44) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 14 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HD1 | 14 | 0.16 | 0.02 | 0.17 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HD1 | 14 | 0.16 | 0.02 | 0.17 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HD1 | 14 | 0.16 | 0.02 | 0.17 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HE1 | 14 | 0.16 | 0.02 | 0.17 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HE1 | 14 | 0.16 | 0.02 | 0.17 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HE1 | 14 | 0.16 | 0.02 | 0.17 |
| (3,30) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:24:LYS:HB3 | 14 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (3,30) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:41:ARG:HB2 | 14 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1180) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:59:GLN:HA | 14 | 0.14 | 0.03 | 0.12 |
| (1,669) | 1:A:21:ALA:HA | 1:A:20:ARG:HB2 | 13 | 1.53 | 0.03 | 1.54 |
| (3,169) | 1:A:7:TYR:HB3 | 1:A:8:ARG:HB2 | 13 | 0.79 | 0.46 | 0.94 |
| (3,169) | 1:A:67:ASN:HB3 | 1:A:68:LYS:HD2 | 13 | 0.79 | 0.46 | 0.94 |
| (1,754) | 1:A:54:LYS:HE3 | 1:A:54:LYS:HG3 | 13 | 0.75 | 0.22 | 0.74 |
| (1,465) | 1:A:37:GLN:HE21 | 1:A:29:LEU:HB2 | 13 | 0.64 | 0.37 | 0.63 |
| (1,867) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:12:ARG:HD2 | 13 | 0.46 | 0.18 | 0.39 |
| (1,304) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:20:ARG:HB2 | 13 | 0.46 | 0.08 | 0.47 |
| (3,202) | 1:A:10:PRO:HB3 | 1:A:10:PRO:HD3 | 13 | 0.43 | 0.02 | 0.43 |
| (3,202) | 1:A:2:PRO:HB2 | 1:A:2:PRO:HD2 | 13 | 0.43 | 0.02 | 0.43 |
| (1,915) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HG3 | 13 | 0.42 | 0.11 | 0.45 |
| (3,98) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:46:ASN:HB2 | 13 | 0.33 | 0.18 | 0.29 |
| (3,98) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:47:ARG:HD2 | 13 | 0.33 | 0.18 | 0.29 |
| (3,17) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:20:ARG:HD3 | 13 | 0.31 | 0.17 | 0.27 |
| (3,17) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:22:ASN:HB2 | 13 | 0.31 | 0.17 | 0.27 |
| (1,687) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG23 | 13 | 0.27 | 0.1 | 0.25 |
| (1,687) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG21 | 13 | 0.27 | 0.1 | 0.25 |
| (1,687) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG22 | 13 | 0.27 | 0.1 | 0.25 |
| (3,131) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HB3 | 13 | 0.22 | 0.01 | 0.22 |
| (3,131) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HD2 | 13 | 0.22 | 0.01 | 0.22 |
| (1,802) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:67:ASN:HA | 13 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,507) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:48:GLN:HB2 | 13 | 0.14 | 0.03 | 0.13 |
| (1,207) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:55:LEU:H | 13 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,920) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:49:VAL:HG11 | 12 | 0.79 | 0.28 | 0.9 |
| (1,920) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:49:VAL:HG13 | 12 | 0.79 | 0.28 | 0.9 |
| (1,920) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:49:VAL:HG12 | 12 | 0.79 | 0.28 | 0.9 |
| (1,1028) | 1:A:38:ILE:HG12 | 1:A:37:GLN:HA | 12 | 0.67 | 0.24 | 0.74 |
| (1,508) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:49:VAL:HG23 | 12 | 0.58 | 0.02 | 0.58 |
| (1,508) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:49:VAL:HG22 | 12 | 0.58 | 0.02 | 0.58 |
| (1,508) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:49:VAL:HG21 | 12 | 0.58 | 0.02 | 0.58 |
| (3,217) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HA | 12 | 0.43 | 0.2 | 0.49 |
| (3,217) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:24:LYS:HE2 | 12 | 0.43 | 0.2 | 0.49 |
| (3,217) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:43:LYS:HE2 | 12 | 0.43 | 0.2 | 0.49 |
| (1,753) | 1:A:54:LYS:HE3 | 1:A:54:LYS:HD2 | 12 | 0.37 | 0.26 | 0.18 |
| (1,646) | 1:A:33:ASN:HA | 1:A:33:ASN:HB2 | 12 | 0.32 | 0.0 | 0.32 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,815) | 1:A:33:ASN:HD22 | 1:A:33:ASN:HB2 | 12 | 0.3 | 0.15 | 0.38 |
| (3,233) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:10:PRO:HD3 | 12 | 0.3 | 0.16 | 0.22 |
| (3,233) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:32:PRO:HD2 | 12 | 0.3 | 0.16 | 0.22 |
| (1,855) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 12 | 0.3 | 0.29 | 0.17 |
| (1,855) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 12 | 0.3 | 0.29 | 0.17 |
| (1,855) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 12 | 0.3 | 0.29 | 0.17 |
| (3,35) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:46:ASN:HB2 | 12 | 0.29 | 0.11 | 0.26 |
| (3,35) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:47:ARG:HD2 | 12 | 0.29 | 0.11 | 0.26 |
| (1,244) | 1:A:18:ILE:H | 1:A:18:ILE:HG12 | 12 | 0.22 | 0.13 | 0.18 |
| (1,1091) | 1:A:44:ASN:HB2 | 1:A:45:ASN:HA | 12 | 0.21 | 0.03 | 0.22 |
| (1,715) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HB3 | 12 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,248) | 1:A:31:THR:H | 1:A:36:LEU:HA | 12 | 0.16 | 0.04 | 0.15 |
| (3,268) | 1:A:58:ILE:HA | 1:A:55:LEU:H | 12 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (3,268) | 1:A:58:ILE:HA | 1:A:61:TYR:HD2 | 12 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (1,393) | 1:A:22:ASN:H | 1:A:22:ASN:HB3 | 12 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (3,122) | 1:A:47:ARG:HA | 1:A:41:ARG:HA | 12 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (3,122) | 1:A:47:ARG:HA | 1:A:48:GLN:HA | 12 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,219) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:47:ARG:HB3 | 11 | 1.09 | 0.02 | 1.09 |
| (3,286) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:68:LYS:HD2 | 11 | 0.47 | 0.36 | 0.23 |
| (3,286) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:64:LYS:HD2 | 11 | 0.47 | 0.36 | 0.23 |
| (3,286) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:66:LEU:HB3 | 11 | 0.47 | 0.36 | 0.23 |
| (1,744) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:68:LYS:HD2 | 11 | 0.43 | 0.26 | 0.67 |
| (1,595) | 1:A:7:TYR:HA | 1:A:7:TYR:HB2 | 11 | 0.28 | 0.01 | 0.28 |
| (1,90) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HD12 | 11 | 0.24 | 0.16 | 0.14 |
| (1,90) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HD11 | 11 | 0.24 | 0.16 | 0.14 |
| (1,90) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HD13 | 11 | 0.24 | 0.16 | 0.14 |
| (1,180) | 1:A:3:VAL:H | 1:A:3:VAL:HG12 | 11 | 0.23 | 0.09 | 0.2 |
| (1,180) | 1:A:3:VAL:H | 1:A:3:VAL:HG11 | 11 | 0.23 | 0.09 | 0.2 |
| (1,180) | 1:A:3:VAL:H | 1:A:3:VAL:HG13 | 11 | 0.23 | 0.09 | 0.2 |
| (1,169) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 11 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,259) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:60:GLU:HA | 11 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (1,7) | 1:A:23:VAL:CG2 | 1:A:40:ALA:HB2 | 11 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,7) | 1:A:23:VAL:CG2 | 1:A:40:ALA:HB3 | 11 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,7) | 1:A:23:VAL:CG2 | 1:A:40:ALA:HB1 | 11 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,887) | 1:A:59:GLN:HA | 1:A:59:GLN:HB2 | 11 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,675) | 1:A:22:ASN:HA | 1:A:43:LYS:HD2 | 10 | 1.35 | 0.49 | 1.56 |
| (1,391) | 1:A:22:ASN:H | 1:A:43:LYS:HD2 | 10 | 1.24 | 0.58 | 1.64 |
| (1,923) | 1:A:15:GLU:HB3 | 1:A:49:VAL:HG11 | 10 | 1.08 | 0.4 | 1.24 |
| (1,923) | 1:A:15:GLU:HB3 | 1:A:49:VAL:HG13 | 10 | 1.08 | 0.4 | 1.24 |
| (1,923) | 1:A:15:GLU:HB3 | 1:A:49:VAL:HG12 | 10 | 1.08 | 0.4 | 1.24 |
| (1,764) | 1:A:14:PHE:HB2 | 1:A:51:ILE:HA | 10 | 0.85 | 0.6 | 1.04 |
| (1,1204) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:28:ILE:HG12 | 10 | 0.39 | 0.27 | 0.3 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,1204) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:28:ILE:HG12 | 10 | 0.39 | 0.27 | 0.3 |
| (1,1204) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:28:ILE:HG12 | 10 | 0.39 | 0.27 | 0.3 |
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HD11 | 10 | 0.36 | 0.46 | 0.13 |
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HD13 | 10 | 0.36 | 0.46 | 0.13 |
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HD12 | 10 | 0.36 | 0.46 | 0.13 |
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HG | 10 | 0.36 | 0.46 | 0.13 |
| (3,279) | 1:A:22:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD21 | 10 | 0.27 | 0.19 | 0.12 |
| (3,279) | 1:A:22:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD23 | 10 | 0.27 | 0.19 | 0.12 |
| (3,279) | 1:A:22:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD22 | 10 | 0.27 | 0.19 | 0.12 |
| (3,279) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:61:TYR:HD2 | 10 | 0.27 | 0.19 | 0.12 |
| (3,279) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:61:TYR:HD2 | 10 | 0.27 | 0.19 | 0.12 |
| (3,279) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:61:TYR:HD2 | 10 | 0.27 | 0.19 | 0.12 |
| (1,882) | 1:A:54:LYS:HD2 | 1:A:54:LYS:HA | 10 | 0.25 | 0.14 | 0.18 |
| (1,493) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD21 | 10 | 0.24 | 0.05 | 0.22 |
| (1,493) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD23 | 10 | 0.24 | 0.05 | 0.22 |
| (1,493) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD22 | 10 | 0.24 | 0.05 | 0.22 |
| (1,971) | 1:A:43:LYS:HE2 | 1:A:43:LYS:HD2 | 10 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (1,967) | 1:A:24:LYS:HG2 | 1:A:42:LEU:HA | 10 | 0.14 | 0.03 | 0.14 |
| (1,833) | 1:A:28:ILE:H | 1:A:27:LYS:HB3 | 10 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,789) | 1:A:45:ASN:HB3 | 1:A:45:ASN:HA | 10 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,333) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:54:LYS:HG3 | 9 | 0.72 | 0.26 | 0.66 |
| (1,220) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:47:ARG:HG3 | 9 | 0.6 | 0.28 | 0.67 |
| (1,1101) | 1:A:48:GLN:HB3 | 1:A:39:VAL:HG23 | 9 | 0.46 | 0.74 | 0.16 |
| (1,1101) | 1:A:48:GLN:HB3 | 1:A:39:VAL:HG21 | 9 | 0.46 | 0.74 | 0.16 |
| (1,1101) | 1:A:48:GLN:HB3 | 1:A:39:VAL:HG22 | 9 | 0.46 | 0.74 | 0.16 |
| (1,142) | 1:A:8:ARG:H | 1:A:8:ARG:HB2 | 9 | 0.32 | 0.11 | 0.35 |
| (1,416) | 1:A:28:ILE:H | 1:A:27:LYS:HD2 | 9 | 0.32 | 0.13 | 0.24 |
| (1,788) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:45:ASN:HB3 | 9 | 0.3 | 0.01 | 0.3 |
| (1,145) | 1:A:7:TYR:H | 1:A:7:TYR:HB3 | 9 | 0.18 | 0.04 | 0.17 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD13 | 8 | 1.1 | 0.11 | 1.08 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD12 | 8 | 1.1 | 0.11 | 1.08 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD11 | 8 | 1.1 | 0.11 | 1.08 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD13 | 8 | 1.1 | 0.11 | 1.08 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD12 | 8 | 1.1 | 0.11 | 1.08 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD11 | 8 | 1.1 | 0.11 | 1.08 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD13 | 8 | 1.1 | 0.11 | 1.08 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD12 | 8 | 1.1 | 0.11 | 1.08 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD11 | 8 | 1.1 | 0.11 | 1.08 |
| (1,461) | 1:A:37:GLN:HE21 | 1:A:10:PRO:HD3 | 8 | 0.89 | 0.42 | 0.82 |
| (1,233) | 1:A:14:PHE:H | 1:A:13:PHE:HB3 | 8 | 0.68 | 0.09 | 0.67 |
| (1,162) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:68:LYS:HG2 | 8 | 0.56 | 0.3 | 0.52 |
| (1,358) | 1:A:11:CYS:H | 1:A:9:CYS:HB2 | 8 | 0.48 | 0.25 | 0.47 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,312) | 1:A:13:PHE:H | 1:A:13:PHE:HB2 | 8 | 0.46 | 0.01 | 0.47 |
| (1,197) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:49:VAL:HG23 | 8 | 0.31 | 0.03 | 0.3 |
| (1,197) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:49:VAL:HG22 | 8 | 0.31 | 0.03 | 0.3 |
| (1,197) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:49:VAL:HG21 | 8 | 0.31 | 0.03 | 0.3 |
| (1,37) | 1:A:13:PHE:HA | 1:A:13:PHE:HE1 | 8 | 0.3 | 0.01 | 0.3 |
| (1,37) | 1:A:13:PHE:HA | 1:A:13:PHE:HE2 | 8 | 0.3 | 0.01 | 0.3 |
| (1,351) | 1:A:11:CYS:H | 1:A:10:PRO:HB3 | 8 | 0.21 | 0.06 | 0.2 |
| (1,563) | 1:A:49:VAL:HA | 1:A:49:VAL:HB | 8 | 0.21 | 0.02 | 0.21 |
| (1,898) | 1:A:8:ARG:HG3 | 1:A:8:ARG:HD3 | 8 | 0.19 | 0.0 | 0.19 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HD13 | 8 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HD12 | 8 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HD11 | 8 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG21 | 8 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG23 | 8 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG22 | 8 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (1,1022) | 1:A:38:ILE:HG21 | 1:A:28:ILE:HG12 | 8 | 0.17 | 0.04 | 0.17 |
| (1,1022) | 1:A:38:ILE:HG23 | 1:A:28:ILE:HG12 | 8 | 0.17 | 0.04 | 0.17 |
| (1,1022) | 1:A:38:ILE:HG22 | 1:A:28:ILE:HG12 | 8 | 0.17 | 0.04 | 0.17 |
| (1,635) | 1:A:17:HIS:HA | 1:A:17:HIS:HB3 | 8 | 0.16 | 0.0 | 0.16 |
| (3,48) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:20:ARG:HG3 | 8 | 0.16 | 0.03 | 0.17 |
| (3,48) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 8 | 0.16 | 0.03 | 0.17 |
| (3,48) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 8 | 0.16 | 0.03 | 0.17 |
| (3,48) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 8 | 0.16 | 0.03 | 0.17 |
| (3,18) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:20:ARG:HG3 | 8 | 0.15 | 0.04 | 0.13 |
| (3,18) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 8 | 0.15 | 0.04 | 0.13 |
| (3,18) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 8 | 0.15 | 0.04 | 0.13 |
| (3,18) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 8 | 0.15 | 0.04 | 0.13 |
| (1,282) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:64:LYS:H | 8 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (3,55) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:55:LEU:HB2 | 8 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (3,55) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:55:LEU:HD21 | 8 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (3,55) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:55:LEU:HD22 | 8 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (3,55) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:55:LEU:HD23 | 8 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (3,41) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:59:GLN:HB2 | 8 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (3,41) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:60:GLU:HB3 | 8 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,720) | 1:A:47:ARG:HD2 | 1:A:42:LEU:HD12 | 7 | 1.23 | 0.47 | 1.42 |
| (1,720) | 1:A:47:ARG:HD2 | 1:A:42:LEU:HD11 | 7 | 1.23 | 0.47 | 1.42 |
| (1,720) | 1:A:47:ARG:HD2 | 1:A:42:LEU:HD13 | 7 | 1.23 | 0.47 | 1.42 |
| (1,47) | 1:A:57:TRP:HZ3 | 1:A:20:ARG:HG3 | 7 | 0.86 | 0.11 | 0.85 |
| (1,494) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:47:ARG:HB3 | 7 | 0.73 | 0.55 | 0.5 |
| (3,260) | 1:A:54:LYS:HB2 | 1:A:54:LYS:HE3 | 7 | 0.57 | 0.35 | 0.8 |
| (3,260) | 1:A:54:LYS:HB3 | 1:A:54:LYS:HE3 | 7 | 0.57 | 0.35 | 0.8 |
| (1,869) | 1:A:8:ARG:HB3 | 1:A:8:ARG:HD3 | 7 | 0.53 | 0.24 | 0.68 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,278) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:67:ASN:HB2 | 7 | 0.52 | 0.13 | 0.48 |
| (1,531) | 1:A:57:TRP:HE1 | 1:A:20:ARG:HB3 | 7 | 0.33 | 0.11 | 0.32 |
| (3,134) | 1:A:41:ARG:HA | 1:A:42:LEU:HB3 | 7 | 0.27 | 0.07 | 0.27 |
| (3,134) | 1:A:41:ARG:HA | 1:A:48:GLN:HG2 | 7 | 0.27 | 0.07 | 0.27 |
| (3,134) | 1:A:41:ARG:HA | 1:A:48:GLN:HG3 | 7 | 0.27 | 0.07 | 0.27 |
| (1,103) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:20:ARG:HB3 | 7 | 0.26 | 0.06 | 0.27 |
| (3,139) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:29:LEU:HD13 | 7 | 0.24 | 0.05 | 0.24 |
| (3,139) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:29:LEU:HD12 | 7 | 0.24 | 0.05 | 0.24 |
| (3,139) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:29:LEU:HD11 | 7 | 0.24 | 0.05 | 0.24 |
| (3,139) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:29:LEU:HD13 | 7 | 0.24 | 0.05 | 0.24 |
| (3,139) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:29:LEU:HD12 | 7 | 0.24 | 0.05 | 0.24 |
| (3,139) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:29:LEU:HD11 | 7 | 0.24 | 0.05 | 0.24 |
| (1,217) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:45:ASN:HB2 | 7 | 0.23 | 0.13 | 0.13 |
| (3,108) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:56:LYS:HD2 | 7 | 0.21 | 0.04 | 0.23 |
| (3,108) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:55:LEU:HG | 7 | 0.21 | 0.04 | 0.23 |
| (1,300) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:20:ARG:HB3 | 7 | 0.2 | 0.03 | 0.19 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD13 | 7 | 0.18 | 0.05 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD12 | 7 | 0.18 | 0.05 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD11 | 7 | 0.18 | 0.05 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD13 | 7 | 0.18 | 0.05 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD12 | 7 | 0.18 | 0.05 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD11 | 7 | 0.18 | 0.05 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD13 | 7 | 0.18 | 0.05 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD12 | 7 | 0.18 | 0.05 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD11 | 7 | 0.18 | 0.05 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 7 | 0.18 | 0.05 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 7 | 0.18 | 0.05 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 7 | 0.18 | 0.05 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:62:LEU:HD11 | 7 | 0.18 | 0.05 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:62:LEU:HD13 | 7 | 0.18 | 0.05 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:62:LEU:HD12 | 7 | 0.18 | 0.05 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:62:LEU:HD11 | 7 | 0.18 | 0.05 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:62:LEU:HD13 | 7 | 0.18 | 0.05 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:62:LEU:HD12 | 7 | 0.18 | 0.05 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 7 | 0.18 | 0.05 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 7 | 0.18 | 0.05 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 7 | 0.18 | 0.05 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:66:LEU:HD11 | 7 | 0.18 | 0.05 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:66:LEU:HD12 | 7 | 0.18 | 0.05 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:66:LEU:HD13 | 7 | 0.18 | 0.05 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:66:LEU:HD11 | 7 | 0.18 | 0.05 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:66:LEU:HD12 | 7 | 0.18 | 0.05 | 0.17 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:66:LEU:HD13 | 7 | 0.18 | 0.05 | 0.17 |
| (1,1206) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:67:ASN:HD22 | 7 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,1008) | 1:A:32:PRO:HG3 | 1:A:31:THR:HG23 | 7 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1008) | 1:A:32:PRO:HG3 | 1:A:31:THR:HG21 | 7 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1008) | 1:A:32:PRO:HG3 | 1:A:31:THR:HG22 | 7 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,963) | 1:A:24:LYS:HA | 1:A:23:VAL:HG13 | 7 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,963) | 1:A:24:LYS:HA | 1:A:23:VAL:HG11 | 7 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,963) | 1:A:24:LYS:HA | 1:A:23:VAL:HG12 | 7 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,289) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:66:LEU:HD11 | 6 | 0.93 | 0.05 | 0.94 |
| (1,289) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:66:LEU:HD12 | 6 | 0.93 | 0.05 | 0.94 |
| (1,289) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:66:LEU:HD13 | 6 | 0.93 | 0.05 | 0.94 |
| (1,723) | 1:A:20:ARG:HD3 | 1:A:20:ARG:HB2 | 6 | 0.7 | 0.18 | 0.64 |
| (1,158) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HD22 | 6 | 0.67 | 0.26 | 0.76 |
| (1,158) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HD23 | 6 | 0.67 | 0.26 | 0.76 |
| (1,158) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HD21 | 6 | 0.67 | 0.26 | 0.76 |
| (3,115) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HD11 | 6 | 0.63 | 0.15 | 0.66 |
| (3,115) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HD12 | 6 | 0.63 | 0.15 | 0.66 |
| (3,115) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HD13 | 6 | 0.63 | 0.15 | 0.66 |
| (3,115) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HG | 6 | 0.63 | 0.15 | 0.66 |
| (1,150) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:15:GLU:HG2 | 6 | 0.6 | 0.36 | 0.6 |
| (1,149) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:14:PHE:HB2 | 6 | 0.56 | 0.28 | 0.6 |
| (1,286) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:67:ASN:HB2 | 6 | 0.43 | 0.16 | 0.45 |
| (1,513) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:14:PHE:HB2 | 6 | 0.38 | 0.21 | 0.4 |
| (1,607) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HD2 | 6 | 0.36 | 0.25 | 0.26 |
| (1,16) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:26:LEU:HB2 | 6 | 0.21 | 0.06 | 0.22 |
| (1,763) | 1:A:14:PHE:HA | 1:A:14:PHE:HB2 | 6 | 0.16 | 0.02 | 0.17 |
| (1,120) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:37:GLN:HG3 | 6 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (3,93) | 1:A:41:ARG:H | 1:A:24:LYS:HG3 | 6 | 0.14 | 0.03 | 0.12 |
| (3,93) | 1:A:41:ARG:H | 1:A:51:ILE:HG13 | 6 | 0.14 | 0.03 | 0.12 |
| (1,1064) | 1:A:41:ARG:HD3 | 1:A:46:ASN:HA | 5 | 1.63 | 0.09 | 1.62 |
| (1,553) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:26:LEU:HD22 | 5 | 1.34 | 0.62 | 1.54 |
| (1,553) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:26:LEU:HD21 | 5 | 1.34 | 0.62 | 1.54 |
| (1,553) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:26:LEU:HD23 | 5 | 1.34 | 0.62 | 1.54 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD22 | 5 | 0.98 | 0.11 | 0.97 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD23 | 5 | 0.98 | 0.11 | 0.97 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD21 | 5 | 0.98 | 0.11 | 0.97 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD22 | 5 | 0.98 | 0.11 | 0.97 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD23 | 5 | 0.98 | 0.11 | 0.97 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD21 | 5 | 0.98 | 0.11 | 0.97 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD22 | 5 | 0.98 | 0.11 | 0.97 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD23 | 5 | 0.98 | 0.11 | 0.97 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD21 | 5 | 0.98 | 0.11 | 0.97 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 5 | 0.98 | 0.11 | 0.97 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 5 | 0.98 | 0.11 | 0.97 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 5 | 0.98 | 0.11 | 0.97 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:66:LEU:HD11 | 5 | 0.98 | 0.11 | 0.97 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:66:LEU:HD12 | 5 | 0.98 | 0.11 | 0.97 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:66:LEU:HD13 | 5 | 0.98 | 0.11 | 0.97 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:66:LEU:HD11 | 5 | 0.98 | 0.11 | 0.97 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:66:LEU:HD12 | 5 | 0.98 | 0.11 | 0.97 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:66:LEU:HD13 | 5 | 0.98 | 0.11 | 0.97 |
| (1,726) | 1:A:42:LEU:H | 1:A:41:ARG:HD3 | 5 | 0.93 | 0.38 | 1.03 |
| (1,922) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:49:VAL:HG11 | 5 | 0.92 | 0.4 | 0.99 |
| (1,922) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:49:VAL:HG13 | 5 | 0.92 | 0.4 | 0.99 |
| (1,922) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:49:VAL:HG12 | 5 | 0.92 | 0.4 | 0.99 |
| (1,641) | 1:A:5:LEU:HA | 1:A:5:LEU:HD22 | 5 | 0.79 | 0.4 | 1.05 |
| (1,641) | 1:A:5:LEU:HA | 1:A:5:LEU:HD23 | 5 | 0.79 | 0.4 | 1.05 |
| (1,641) | 1:A:5:LEU:HA | 1:A:5:LEU:HD21 | 5 | 0.79 | 0.4 | 1.05 |
| (1,597) | 1:A:64:LYS:HA | 1:A:64:LYS:HG3 | 5 | 0.69 | 0.03 | 0.68 |
| (1,1185) | 1:A:61:TYR:HA | 1:A:64:LYS:HD2 | 5 | 0.48 | 0.14 | 0.5 |
| (1,34) | 1:A:25:HIS:HE1 | 1:A:41:ARG:HG3 | 5 | 0.42 | 0.59 | 0.13 |
| (3,265) | 1:A:56:LYS:HG3 | 1:A:56:LYS:HE3 | 5 | 0.42 | 0.09 | 0.48 |
| (3,265) | 1:A:56:LYS:HG2 | 1:A:56:LYS:HE3 | 5 | 0.42 | 0.09 | 0.48 |
| (1,591) | 1:A:6:SER:HA | 1:A:6:SER:HB2 | 5 | 0.41 | 0.0 | 0.41 |
| (1,62) | 1:A:56:LYS:H | 1:A:56:LYS:HD2 | 5 | 0.32 | 0.11 | 0.34 |
| (1,1001) | 1:A:32:PRO:HG3 | 1:A:32:PRO:HA | 5 | 0.31 | 0.2 | 0.22 |
| (1,592) | 1:A:64:LYS:HA | 1:A:67:ASN:HB2 | 5 | 0.3 | 0.09 | 0.32 |
| (3,138) | 1:A:2:PRO:HD2 | 1:A:2:PRO:HB3 | 5 | 0.21 | 0.03 | 0.2 |
| (3,138) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:10:PRO:HB2 | 5 | 0.21 | 0.03 | 0.2 |
| (3,138) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:32:PRO:HB2 | 5 | 0.21 | 0.03 | 0.2 |
| (1,703) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:14:PHE:HA | 5 | 0.21 | 0.05 | 0.2 |
| (1,69) | 1:A:35:ALA:H | 1:A:34:CYS:HB2 | 5 | 0.17 | 0.04 | 0.15 |
| (1,377) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:18:ILE:H | 5 | 0.15 | 0.05 | 0.13 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:18:ILE:HG23 | 5 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:18:ILE:HG22 | 5 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:18:ILE:HG21 | 5 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:39:VAL:HG23 | 5 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:39:VAL:HG21 | 5 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:39:VAL:HG22 | 5 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:49:VAL:HG11 | 5 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:49:VAL:HG13 | 5 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:49:VAL:HG12 | 5 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,265) | 1:A:41:ARG:H | 1:A:26:LEU:HD12 | 4 | 1.3 | 0.04 | 1.3 |
| (1,265) | 1:A:41:ARG:H | 1:A:26:LEU:HD11 | 4 | 1.3 | 0.04 | 1.3 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,265) | 1:A:41:ARG:H | 1:A:26:LEU:HD13 | 4 | 1.3 | 0.04 | 1.3 |
| (1,1190) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:61:TYR:HB2 | 4 | 0.99 | 0.15 | 0.96 |
| (1,1190) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:61:TYR:HB2 | 4 | 0.99 | 0.15 | 0.96 |
| (1,1190) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:61:TYR:HB2 | 4 | 0.99 | 0.15 | 0.96 |
| (1,735) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:46:ASN:HA | 4 | 0.92 | 0.74 | 0.9 |
| (1,291) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:64:LYS:HD2 | 4 | 0.76 | 0.09 | 0.75 |
| (1,1049) | 1:A:40:ALA:HA | 1:A:26:LEU:HD12 | 4 | 0.63 | 0.06 | 0.63 |
| (1,1049) | 1:A:40:ALA:HA | 1:A:26:LEU:HD11 | 4 | 0.63 | 0.06 | 0.63 |
| (1,1049) | 1:A:40:ALA:HA | 1:A:26:LEU:HD13 | 4 | 0.63 | 0.06 | 0.63 |
| (1,636) | 1:A:26:LEU:HA | 1:A:26:LEU:HD12 | 4 | 0.62 | 0.01 | 0.62 |
| (1,636) | 1:A:26:LEU:HA | 1:A:26:LEU:HD11 | 4 | 0.62 | 0.01 | 0.62 |
| (1,636) | 1:A:26:LEU:HA | 1:A:26:LEU:HD13 | 4 | 0.62 | 0.01 | 0.62 |
| (1,872) | 1:A:41:ARG:H | 1:A:25:HIS:HB2 | 4 | 0.6 | 0.77 | 0.18 |
| (1,974) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:57:TRP:HH2 | 4 | 0.54 | 0.1 | 0.5 |
| (1,974) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:57:TRP:HH2 | 4 | 0.54 | 0.1 | 0.5 |
| (1,974) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:57:TRP:HH2 | 4 | 0.54 | 0.1 | 0.5 |
| (1,474) | 1:A:39:VAL:H | 1:A:26:LEU:HD12 | 4 | 0.43 | 0.06 | 0.4 |
| (1,474) | 1:A:39:VAL:H | 1:A:26:LEU:HD11 | 4 | 0.43 | 0.06 | 0.4 |
| (1,474) | 1:A:39:VAL:H | 1:A:26:LEU:HD13 | 4 | 0.43 | 0.06 | 0.4 |
| (1,660) | 1:A:41:ARG:HA | 1:A:41:ARG:HD3 | 4 | 0.42 | 0.08 | 0.44 |
| (3,124) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD13 | 4 | 0.4 | 0.03 | 0.42 |
| (3,124) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD12 | 4 | 0.4 | 0.03 | 0.42 |
| (3,124) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD11 | 4 | 0.4 | 0.03 | 0.42 |
| (3,124) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD22 | 4 | 0.4 | 0.03 | 0.42 |
| (3,124) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD23 | 4 | 0.4 | 0.03 | 0.42 |
| (3,124) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD21 | 4 | 0.4 | 0.03 | 0.42 |
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:23:VAL:HG13 | 4 | 0.4 | 0.07 | 0.38 |
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:23:VAL:HG11 | 4 | 0.4 | 0.07 | 0.38 |
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:23:VAL:HG12 | 4 | 0.4 | 0.07 | 0.38 |
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:23:VAL:HG13 | 4 | 0.4 | 0.07 | 0.38 |
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:23:VAL:HG11 | 4 | 0.4 | 0.07 | 0.38 |
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:23:VAL:HG12 | 4 | 0.4 | 0.07 | 0.38 |
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:23:VAL:HG13 | 4 | 0.4 | 0.07 | 0.38 |
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:23:VAL:HG11 | 4 | 0.4 | 0.07 | 0.38 |
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:23:VAL:HG12 | 4 | 0.4 | 0.07 | 0.38 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:26:LEU:HD22 | 4 | 0.4 | 0.07 | 0.38 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:26:LEU:HD21 | 4 | 0.4 | 0.07 | 0.38 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:26:LEU:HD23 | 4 | 0.4 | 0.07 | 0.38 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:26:LEU:HD22 | 4 | 0.4 | 0.07 | 0.38 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:26:LEU:HD21 | 4 | 0.4 | 0.07 | 0.38 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:26:LEU:HD23 | 4 | 0.4 | 0.07 | 0.38 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:26:LEU:HD22 | 4 | 0.4 | 0.07 | 0.38 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:26:LEU:HD21 | 4 | 0.4 | 0.07 | 0.38 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:26:LEU:HD23 | 4 | 0.4 | 0.07 | 0.38 |
| (1,734) | 1:A:56:LYS:HE3 | 1:A:56:LYS:HD2 | 4 | 0.39 | 0.0 | 0.39 |
| (1,848) | 1:A:41:ARG:HD3 | 1:A:41:ARG:HB2 | 4 | 0.38 | 0.02 | 0.38 |
| (1,457) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:9:CYS:HB3 | 4 | 0.38 | 0.08 | 0.41 |
| (1,590) | 1:A:7:TYR:H | 1:A:6:SER:HA | 4 | 0.28 | 0.07 | 0.29 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:18:ILE:HG23 | 4 | 0.26 | 0.06 | 0.26 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:18:ILE:HG22 | 4 | 0.26 | 0.06 | 0.26 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:18:ILE:HG21 | 4 | 0.26 | 0.06 | 0.26 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:23:VAL:HG13 | 4 | 0.26 | 0.06 | 0.26 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:23:VAL:HG11 | 4 | 0.26 | 0.06 | 0.26 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:23:VAL:HG12 | 4 | 0.26 | 0.06 | 0.26 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:42:LEU:HD21 | 4 | 0.26 | 0.06 | 0.26 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:42:LEU:HD23 | 4 | 0.26 | 0.06 | 0.26 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:42:LEU:HD22 | 4 | 0.26 | 0.06 | 0.26 |
| (1,924) | 1:A:16:SER:HB3 | 1:A:55:LEU:HD21 | 4 | 0.24 | 0.13 | 0.2 |
| (1,924) | 1:A:16:SER:HB3 | 1:A:55:LEU:HD22 | 4 | 0.24 | 0.13 | 0.2 |
| (1,924) | 1:A:16:SER:HB3 | 1:A:55:LEU:HD23 | 4 | 0.24 | 0.13 | 0.2 |
| (1,975) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:27:LYS:H | 4 | 0.21 | 0.03 | 0.22 |
| (1,975) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:27:LYS:H | 4 | 0.21 | 0.03 | 0.22 |
| (1,975) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:27:LYS:H | 4 | 0.21 | 0.03 | 0.22 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB2 | 1:A:26:LEU:HD12 | 4 | 0.2 | 0.08 | 0.18 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB2 | 1:A:26:LEU:HD11 | 4 | 0.2 | 0.08 | 0.18 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB2 | 1:A:26:LEU:HD13 | 4 | 0.2 | 0.08 | 0.18 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB3 | 1:A:26:LEU:HD12 | 4 | 0.2 | 0.08 | 0.18 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB3 | 1:A:26:LEU:HD11 | 4 | 0.2 | 0.08 | 0.18 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB3 | 1:A:26:LEU:HD13 | 4 | 0.2 | 0.08 | 0.18 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB1 | 1:A:26:LEU:HD12 | 4 | 0.2 | 0.08 | 0.18 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB1 | 1:A:26:LEU:HD11 | 4 | 0.2 | 0.08 | 0.18 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB1 | 1:A:26:LEU:HD13 | 4 | 0.2 | 0.08 | 0.18 |
| (1,986) | 1:A:28:ILE:HD13 | 1:A:28:ILE:HA | 4 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (1,986) | 1:A:28:ILE:HD12 | 1:A:28:ILE:HA | 4 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (1,986) | 1:A:28:ILE:HD11 | 1:A:28:ILE:HA | 4 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (1,382) | 1:A:18:ILE:H | 1:A:15:GLU:HA | 4 | 0.16 | 0.03 | 0.18 |
| (1,17) | 1:A:25:HIS:HD2 | 1:A:24:LYS:HD2 | 4 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,159) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:ARG:HA | 4 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,443) | 1:A:33:ASN:HD22 | 1:A:32:PRO:HB3 | 4 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,161) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:67:ASN:HA | 4 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (3,107) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:57:TRP:HD1 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (3,107) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:61:TYR:H | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,628) | 1:A:15:GLU:HA | 1:A:15:GLU:HG2 | 3 | 0.44 | 0.03 | 0.42 |
| (1,1023) | 1:A:38:ILE:HG13 | 1:A:38:ILE:HG21 | 3 | 0.43 | 0.02 | 0.42 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,1023) | 1:A:38:ILE:HG13 | 1:A:38:ILE:HG23 | 3 | 0.43 | 0.02 | 0.42 |
| (1,1023) | 1:A:38:ILE:HG13 | 1:A:38:ILE:HG22 | 3 | 0.43 | 0.02 | 0.42 |
| (1,276) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:68:LYS:H | 3 | 0.39 | 0.01 | 0.39 |
| (3,170) | 1:A:16:SER:H | 1:A:15:GLU:HG2 | 3 | 0.29 | 0.04 | 0.32 |
| (3,170) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:50:CYS:H | 3 | 0.29 | 0.04 | 0.32 |
| (1,844) | 1:A:68:LYS:HB3 | 1:A:68:LYS:H | 3 | 0.28 | 0.02 | 0.29 |
| (1,593) | 1:A:8:ARG:H | 1:A:7:TYR:HA | 3 | 0.27 | 0.1 | 0.21 |
| (3,153) | 1:A:41:ARG:HA | 1:A:41:ARG:HD3 | 3 | 0.27 | 0.07 | 0.23 |
| (3,153) | 1:A:41:ARG:HD3 | 1:A:48:GLN:HA | 3 | 0.27 | 0.07 | 0.23 |
| (1,792) | 1:A:45:ASN:HB2 | 1:A:45:ASN:HA | 3 | 0.26 | 0.02 | 0.27 |
| (3,266) | 1:A:57:TRP:HA | 1:A:60:GLU:HG2 | 3 | 0.26 | 0.1 | 0.19 |
| (3,266) | 1:A:57:TRP:HA | 1:A:59:GLN:HB2 | 3 | 0.26 | 0.1 | 0.19 |
| (1,433) | 1:A:31:THR:H | 1:A:34:CYS:HB2 | 3 | 0.26 | 0.1 | 0.33 |
| (3,74) | 1:A:30:ASN:HD21 | 1:A:36:LEU:HD13 | 3 | 0.21 | 0.1 | 0.15 |
| (3,74) | 1:A:30:ASN:HD21 | 1:A:36:LEU:HD12 | 3 | 0.21 | 0.1 | 0.15 |
| (3,74) | 1:A:30:ASN:HD21 | 1:A:36:LEU:HD11 | 3 | 0.21 | 0.1 | 0.15 |
| (3,74) | 1:A:30:ASN:HD21 | 1:A:28:ILE:HG21 | 3 | 0.21 | 0.1 | 0.15 |
| (3,74) | 1:A:30:ASN:HD21 | 1:A:28:ILE:HG23 | 3 | 0.21 | 0.1 | 0.15 |
| (3,74) | 1:A:30:ASN:HD21 | 1:A:28:ILE:HG22 | 3 | 0.21 | 0.1 | 0.15 |
| (3,74) | 1:A:30:ASN:HD21 | 1:A:29:LEU:HD13 | 3 | 0.21 | 0.1 | 0.15 |
| (3,74) | 1:A:30:ASN:HD21 | 1:A:29:LEU:HD12 | 3 | 0.21 | 0.1 | 0.15 |
| (3,74) | 1:A:30:ASN:HD21 | 1:A:29:LEU:HD11 | 3 | 0.21 | 0.1 | 0.15 |
| (1,674) | 1:A:22:ASN:HA | 1:A:22:ASN:HB3 | 3 | 0.19 | 0.04 | 0.2 |
| (1,856) | 1:A:10:PRO:HB3 | 1:A:29:LEU:HG | 3 | 0.19 | 0.05 | 0.17 |
| (1,179) | 1:A:3:VAL:H | 1:A:2:PRO:HB2 | 3 | 0.18 | 0.05 | 0.21 |
| (1,326) | 1:A:6:SER:H | 1:A:5:LEU:HB2 | 3 | 0.17 | 0.04 | 0.19 |
| (1,163) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:67:ASN:HB3 | 3 | 0.17 | 0.05 | 0.14 |
| (1,1164) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:58:ILE:HG23 | 3 | 0.15 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1164) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:58:ILE:HG22 | 3 | 0.15 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1164) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:58:ILE:HG21 | 3 | 0.15 | 0.02 | 0.14 |
| (1,432) | 1:A:31:THR:H | 1:A:32:PRO:HD3 | 3 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,881) | 1:A:20:ARG:HB3 | 1:A:19:ALA:HA | 3 | 0.14 | 0.0 | 0.14 |
| (1,477) | 1:A:42:LEU:H | 1:A:48:GLN:H | 3 | 0.14 | 0.02 | 0.12 |
| (1,53) | 1:A:52:ASP:H | 1:A:16:SER:HA | 3 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,352) | 1:A:11:CYS:H | 1:A:37:GLN:HE21 | 3 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,965) | 1:A:24:LYS:HB3 | 1:A:24:LYS:HG2 | 3 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (3,277) | 1:A:37:GLN:HG3 | 1:A:37:GLN:HB2 | 3 | 0.13 | 0.0 | 0.13 |
| (3,277) | 1:A:59:GLN:HB2 | 1:A:59:GLN:HG2 | 3 | 0.13 | 0.0 | 0.13 |
| (3,237) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:35:ALA:HA | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (3,237) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:35:ALA:HA | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (3,237) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:35:ALA:HA | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (3,237) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD22 | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (3,237) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD23 | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (3,237) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD21 | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1167) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:62:LEU:HD11 | 2 | 1.5 | 0.06 | 1.5 |
| (1,1167) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:62:LEU:HD13 | 2 | 1.5 | 0.06 | 1.5 |
| (1,1167) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:62:LEU:HD12 | 2 | 1.5 | 0.06 | 1.5 |
| (1,1167) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:62:LEU:HD11 | 2 | 1.5 | 0.06 | 1.5 |
| (1,1167) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:62:LEU:HD13 | 2 | 1.5 | 0.06 | 1.5 |
| (1,1167) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:62:LEU:HD12 | 2 | 1.5 | 0.06 | 1.5 |
| (1,1167) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:62:LEU:HD11 | 2 | 1.5 | 0.06 | 1.5 |
| (1,1167) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:62:LEU:HD13 | 2 | 1.5 | 0.06 | 1.5 |
| (1,1167) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:62:LEU:HD12 | 2 | 1.5 | 0.06 | 1.5 |
| (1,561) | 1:A:59:GLN:HA | 1:A:62:LEU:HD11 | 2 | 1.23 | 0.08 | 1.23 |
| (1,561) | 1:A:59:GLN:HA | 1:A:62:LEU:HD13 | 2 | 1.23 | 0.08 | 1.23 |
| (1,561) | 1:A:59:GLN:HA | 1:A:62:LEU:HD12 | 2 | 1.23 | 0.08 | 1.23 |
| (3,46) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:20:ARG:HD3 | 2 | 1.0 | 0.01 | 1.0 |
| (3,46) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:22:ASN:HB2 | 2 | 1.0 | 0.01 | 1.0 |
| (1,225) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HD11 | 2 | 0.98 | 0.02 | 0.98 |
| (1,225) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HD13 | 2 | 0.98 | 0.02 | 0.98 |
| (1,225) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HD12 | 2 | 0.98 | 0.02 | 0.98 |
| (1,770) | 1:A:22:ASN:HB3 | 1:A:42:LEU:HD21 | 2 | 0.86 | 0.31 | 0.86 |
| (1,770) | 1:A:22:ASN:HB3 | 1:A:42:LEU:HD23 | 2 | 0.86 | 0.31 | 0.86 |
| (1,770) | 1:A:22:ASN:HB3 | 1:A:42:LEU:HD22 | 2 | 0.86 | 0.31 | 0.86 |
| (3,189) | 1:A:25:HIS:HB2 | 1:A:24:LYS:HB3 | 2 | 0.74 | 0.57 | 0.74 |
| (3,189) | 1:A:41:ARG:HB2 | 1:A:25:HIS:HB2 | 2 | 0.74 | 0.57 | 0.74 |
| (1,200) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:22:ASN:HB3 | 2 | 0.71 | 0.15 | 0.71 |
| (1,773) | 1:A:22:ASN:H | 1:A:22:ASN:HB2 | 2 | 0.68 | 0.01 | 0.68 |
| (1,502) | 1:A:48:GLN:HE21 | 1:A:39:VAL:HG23 | 2 | 0.62 | 0.46 | 0.62 |
| (1,502) | 1:A:48:GLN:HE21 | 1:A:39:VAL:HG21 | 2 | 0.62 | 0.46 | 0.62 |
| (1,502) | 1:A:48:GLN:HE21 | 1:A:39:VAL:HG22 | 2 | 0.62 | 0.46 | 0.62 |
| (1,860) | 1:A:53:PRO:HB3 | 1:A:62:LEU:HD11 | 2 | 0.58 | 0.29 | 0.58 |
| (1,860) | 1:A:53:PRO:HB3 | 1:A:62:LEU:HD13 | 2 | 0.58 | 0.29 | 0.58 |
| (1,860) | 1:A:53:PRO:HB3 | 1:A:62:LEU:HD12 | 2 | 0.58 | 0.29 | 0.58 |
| (1,786) | 1:A:30:ASN:HB2 | 1:A:29:LEU:HD13 | 2 | 0.54 | 0.34 | 0.54 |
| (1,786) | 1:A:30:ASN:HB2 | 1:A:29:LEU:HD12 | 2 | 0.54 | 0.34 | 0.54 |
| (1,786) | 1:A:30:ASN:HB2 | 1:A:29:LEU:HD11 | 2 | 0.54 | 0.34 | 0.54 |
| (1,973) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:61:TYR:HD2 | 2 | 0.52 | 0.16 | 0.52 |
| (1,973) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:61:TYR:HD2 | 2 | 0.52 | 0.16 | 0.52 |
| (1,973) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:61:TYR:HD2 | 2 | 0.52 | 0.16 | 0.52 |
| (1,981) | 1:A:27:LYS:HG3 | 1:A:27:LYS:HE2 | 2 | 0.52 | 0.0 | 0.52 |
| (1,13) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 2 | 0.5 | 0.03 | 0.5 |
| (1,13) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 2 | 0.5 | 0.03 | 0.5 |
| (1,13) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 2 | 0.5 | 0.03 | 0.5 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,738) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HG3 | 2 | 0.4 | 0.11 | 0.4 |
| (1,139) | 1:A:8:ARG:H | 1:A:8:ARG:HG3 | 2 | 0.38 | 0.01 | 0.38 |
| (1,521) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:54:LYS:HE3 | 2 | 0.34 | 0.04 | 0.34 |
| (3,157) | 1:A:5:LEU:HB3 | 1:A:7:TYR:H | 2 | 0.3 | 0.06 | 0.3 |
| (3,157) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HB2 | 2 | 0.3 | 0.06 | 0.3 |
| (1,790) | 1:A:31:THR:H | 1:A:30:ASN:HB3 | 2 | 0.29 | 0.09 | 0.29 |
| (1,820) | 1:A:44:ASN:HD22 | 1:A:44:ASN:HB2 | 2 | 0.28 | 0.01 | 0.28 |
| (3,219) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HB3 | 2 | 0.27 | 0.12 | 0.27 |
| (3,219) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HB3 | 2 | 0.27 | 0.12 | 0.27 |
| (3,219) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HB3 | 2 | 0.27 | 0.12 | 0.27 |
| (3,219) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:26:LEU:HB3 | 2 | 0.27 | 0.12 | 0.27 |
| (3,219) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:26:LEU:HB3 | 2 | 0.27 | 0.12 | 0.27 |
| (3,219) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:26:LEU:HB3 | 2 | 0.27 | 0.12 | 0.27 |
| (1,235) | 1:A:4:SER:H | 1:A:4:SER:HB3 | 2 | 0.25 | 0.02 | 0.25 |
| (1,644) | 1:A:34:CYS:HA | 1:A:34:CYS:HB3 | 2 | 0.24 | 0.0 | 0.24 |
| (3,135) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:10:PRO:HG2 | 2 | 0.22 | 0.1 | 0.22 |
| (3,135) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:32:PRO:HG2 | 2 | 0.22 | 0.1 | 0.22 |
| (1,775) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:19:ALA:HB2 | 2 | 0.22 | 0.06 | 0.22 |
| (1,775) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:19:ALA:HB3 | 2 | 0.22 | 0.06 | 0.22 |
| (1,775) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:19:ALA:HB1 | 2 | 0.22 | 0.06 | 0.22 |
| (1,825) | 1:A:15:GLU:HG3 | 1:A:18:ILE:HD12 | 2 | 0.2 | 0.06 | 0.2 |
| (1,825) | 1:A:15:GLU:HG3 | 1:A:18:ILE:HD13 | 2 | 0.2 | 0.06 | 0.2 |
| (1,825) | 1:A:15:GLU:HG3 | 1:A:18:ILE:HD11 | 2 | 0.2 | 0.06 | 0.2 |
| (1,102) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:20:ARG:HB2 | 2 | 0.2 | 0.04 | 0.2 |
| (1,1032) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:36:LEU:HB2 | 2 | 0.19 | 0.04 | 0.19 |
| (1,1032) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:36:LEU:HB2 | 2 | 0.19 | 0.04 | 0.19 |
| (1,1032) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:36:LEU:HB2 | 2 | 0.19 | 0.04 | 0.19 |
| (1,686) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:9:CYS:HB3 | 2 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,817) | 1:A:44:ASN:HD22 | 1:A:44:ASN:HB3 | 2 | 0.17 | 0.0 | 0.17 |
| (3,178) | 1:A:37:GLN:HG3 | 1:A:28:ILE:HG21 | 2 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (3,178) | 1:A:37:GLN:HG3 | 1:A:28:ILE:HG23 | 2 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (3,178) | 1:A:37:GLN:HG3 | 1:A:28:ILE:HG22 | 2 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (3,178) | 1:A:37:GLN:HG3 | 1:A:29:LEU:HD13 | 2 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (3,178) | 1:A:37:GLN:HG3 | 1:A:29:LEU:HD12 | 2 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (3,178) | 1:A:37:GLN:HG3 | 1:A:29:LEU:HD11 | 2 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (3,178) | 1:A:37:GLN:HG3 | 1:A:29:LEU:HG | 2 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (3,178) | 1:A:37:GLN:HG3 | 1:A:36:LEU:HD22 | 2 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (3,178) | 1:A:37:GLN:HG3 | 1:A:36:LEU:HD23 | 2 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (3,178) | 1:A:37:GLN:HG3 | 1:A:36:LEU:HD21 | 2 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (3,178) | 1:A:59:GLN:HG2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 2 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (3,178) | 1:A:59:GLN:HG2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 2 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (3,178) | 1:A:59:GLN:HG2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 2 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

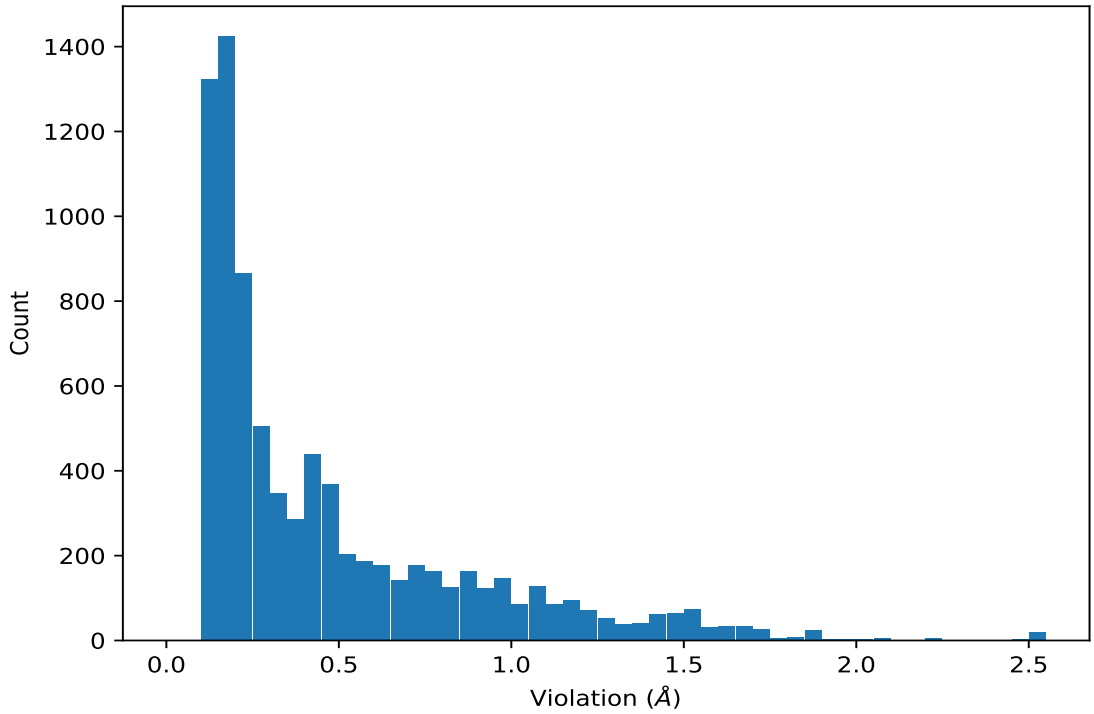
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,196) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:49:VAL:HG11 | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (1,196) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:49:VAL:HG13 | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (1,196) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:49:VAL:HG12 | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (3,8) | 1:A:35:ALA:H | 1:A:28:ILE:HG21 | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (3,8) | 1:A:35:ALA:H | 1:A:28:ILE:HG23 | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (3,8) | 1:A:35:ALA:H | 1:A:28:ILE:HG22 | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (3,8) | 1:A:35:ALA:H | 1:A:36:LEU:HD13 | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (3,8) | 1:A:35:ALA:H | 1:A:36:LEU:HD12 | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (3,8) | 1:A:35:ALA:H | 1:A:36:LEU:HD11 | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (3,8) | 1:A:35:ALA:H | 1:A:36:LEU:HD22 | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (3,8) | 1:A:35:ALA:H | 1:A:36:LEU:HD23 | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (3,8) | 1:A:35:ALA:H | 1:A:36:LEU:HD21 | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (1,941) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:18:ILE:HD12 | 2 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (1,941) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:18:ILE:HD13 | 2 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (1,941) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:18:ILE:HD11 | 2 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (1,827) | 1:A:15:GLU:HG3 | 1:A:15:GLU:HA | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (1,987) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:28:ILE:HD13 | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (1,987) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:28:ILE:HD12 | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (1,987) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:28:ILE:HD11 | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (1,778) | 1:A:19:ALA:H | 1:A:18:ILE:HB | 2 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (1,431) | 1:A:30:ASN:HD21 | 1:A:30:ASN:HA | 2 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,982) | 1:A:28:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG12 | 2 | 0.14 | 0.0 | 0.14 |
| (1,31) | 1:A:14:PHE:HE2 | 1:A:14:PHE:HA | 2 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,31) | 1:A:14:PHE:HE1 | 1:A:14:PHE:HA | 2 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,1054) | 1:A:26:LEU:HA | 1:A:40:ALA:HB2 | 2 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,1054) | 1:A:26:LEU:HA | 1:A:40:ALA:HB3 | 2 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,1054) | 1:A:26:LEU:HA | 1:A:40:ALA:HB1 | 2 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,875) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:60:GLU:HB3 | 2 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,255) | 1:A:16:SER:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1154) | 1:A:58:ILE:HA | 1:A:57:TRP:HZ3 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (3,78) | 1:A:34:CYS:H | 1:A:36:LEU:HD13 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (3,78) | 1:A:34:CYS:H | 1:A:36:LEU:HD12 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (3,78) | 1:A:34:CYS:H | 1:A:36:LEU:HD11 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (3,78) | 1:A:34:CYS:H | 1:A:36:LEU:HD22 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (3,78) | 1:A:34:CYS:H | 1:A:36:LEU:HD23 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (3,78) | 1:A:34:CYS:H | 1:A:36:LEU:HD21 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |

[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) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1101) | 1:A:48:GLN:HB3 | 1:A:39:VAL:HG23 | 2 | 2.53 |
| (1,1101) | 1:A:48:GLN:HB3 | 1:A:39:VAL:HG21 | 2 | 2.53 |
| (1,1101) | 1:A:48:GLN:HB3 | 1:A:39:VAL:HG22 | 2 | 2.53 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HB3 | 14 | 2.51 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HB3 | 14 | 2.51 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HB3 | 14 | 2.51 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 14 | 2.51 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 14 | 2.51 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 14 | 2.51 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HB3 | 19 | 2.51 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HB3 | 19 | 2.51 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HB3 | 19 | 2.51 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 19 | 2.51 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 19 | 2.51 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 19 | 2.51 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HB3 | 8 | 2.5 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HB3 | 8 | 2.5 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HB3 | 8 | 2.5 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 8 | 2.5 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 8 | 2.5 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 8 | 2.5 |
| (1,1039) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:39:VAL:HG23 | 2 | 2.48 |
| (1,1039) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:39:VAL:HG21 | 2 | 2.48 |
| (1,1039) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:39:VAL:HG22 | 2 | 2.48 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HB3 | 11 | 2.2 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HB3 | 11 | 2.2 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HB3 | 11 | 2.2 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 11 | 2.2 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 11 | 2.2 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 11 | 2.2 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HB3 | 18 | 2.07 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HB3 | 18 | 2.07 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HB3 | 18 | 2.07 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 18 | 2.07 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 18 | 2.07 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 18 | 2.07 |
| (1,1046) | 1:A:39:VAL:HG12 | 1:A:27:LYS:HG3 | 2 | 2.02 |
| (1,1046) | 1:A:39:VAL:HG11 | 1:A:27:LYS:HG3 | 2 | 2.02 |
| (1,1046) | 1:A:39:VAL:HG13 | 1:A:27:LYS:HG3 | 2 | 2.02 |
| (1,1047) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:29:LEU:HB3 | 2 | 1.98 |
| (1,849) | 1:A:41:ARG:HB2 | 1:A:25:HIS:HB2 | 14 | 1.96 |
| (1,684) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:10:PRO:HD3 | 16 | 1.96 |
| (1,872) | 1:A:41:ARG:H | 1:A:25:HIS:HB2 | 14 | 1.93 |
| (1,1208) | 1:A:69:GLY:HA2 | 1:A:68:LYS:HB3 | 3 | 1.92 |
| (3,278) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HB3 | 17 | 1.9 |
| (3,278) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:64:LYS:HB3 | 17 | 1.9 |
| (3,278) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HB3 | 9 | 1.89 |
| (3,278) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:64:LYS:HB3 | 9 | 1.89 |
| (3,278) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HB3 | 18 | 1.89 |
| (3,278) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:64:LYS:HB3 | 18 | 1.89 |
| (3,278) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HB3 | 20 | 1.89 |
| (3,278) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:64:LYS:HB3 | 20 | 1.89 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,278) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HB3 | 5 | 1.88 |
| (3,278) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:64:LYS:HB3 | 5 | 1.88 |
| (3,278) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HB3 | 7 | 1.88 |
| (3,278) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:64:LYS:HB3 | 7 | 1.88 |
| (3,278) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HB3 | 15 | 1.88 |
| (3,278) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:64:LYS:HB3 | 15 | 1.88 |
| (3,278) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HB3 | 2 | 1.87 |
| (3,278) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:64:LYS:HB3 | 2 | 1.87 |
| (3,278) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HB3 | 4 | 1.87 |
| (3,278) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:64:LYS:HB3 | 4 | 1.87 |
| (3,278) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HB3 | 11 | 1.85 |
| (3,278) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:64:LYS:HB3 | 11 | 1.85 |
| (3,278) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HB3 | 13 | 1.85 |
| (3,278) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:64:LYS:HB3 | 13 | 1.85 |
| (3,278) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HB3 | 19 | 1.85 |
| (3,278) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:64:LYS:HB3 | 19 | 1.85 |
| (1,831) | 1:A:27:LYS:HB2 | 1:A:39:VAL:HG12 | 2 | 1.85 |
| (1,831) | 1:A:27:LYS:HB2 | 1:A:39:VAL:HG11 | 2 | 1.85 |
| (1,831) | 1:A:27:LYS:HB2 | 1:A:39:VAL:HG13 | 2 | 1.85 |
| (3,278) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HB3 | 12 | 1.84 |
| (3,278) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:64:LYS:HB3 | 12 | 1.84 |
| (3,278) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HB3 | 14 | 1.83 |
| (3,278) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:64:LYS:HB3 | 14 | 1.83 |
| (1,556) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:67:ASN:HD22 | 18 | 1.81 |
| (1,556) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:67:ASN:HD22 | 9 | 1.8 |
| (1,553) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:26:LEU:HD22 | 2 | 1.8 |
| (1,553) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:26:LEU:HD21 | 2 | 1.8 |
| (1,553) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:26:LEU:HD23 | 2 | 1.8 |
| (1,556) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:67:ASN:HD22 | 19 | 1.78 |
| (1,1064) | 1:A:41:ARG:HD3 | 1:A:46:ASN:HA | 8 | 1.78 |
| (1,391) | 1:A:22:ASN:H | 1:A:43:LYS:HD2 | 14 | 1.77 |
| (1,735) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:46:ASN:HA | 4 | 1.76 |
| (1,675) | 1:A:22:ASN:HA | 1:A:43:LYS:HD2 | 20 | 1.76 |
| (1,556) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:67:ASN:HD22 | 13 | 1.75 |
| (1,675) | 1:A:22:ASN:HA | 1:A:43:LYS:HD2 | 14 | 1.73 |
| (1,391) | 1:A:22:ASN:H | 1:A:43:LYS:HD2 | 6 | 1.73 |
| (1,250) | 1:A:31:THR:H | 1:A:29:LEU:HB2 | 2 | 1.73 |
| (1,866) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:13:PHE:HE1 | 15 | 1.72 |
| (1,866) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:13:PHE:HE2 | 15 | 1.72 |
| (1,866) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:13:PHE:HE1 | 16 | 1.72 |
| (1,866) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:13:PHE:HE2 | 16 | 1.72 |
| (1,556) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:67:ASN:HD22 | 2 | 1.72 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,553) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:26:LEU:HD22 | 10 | 1.72 |
| (1,553) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:26:LEU:HD21 | 10 | 1.72 |
| (1,553) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:26:LEU:HD23 | 10 | 1.72 |
| (1,866) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:13:PHE:HE1 | 1 | 1.71 |
| (1,866) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:13:PHE:HE2 | 1 | 1.71 |
| (1,866) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:13:PHE:HE1 | 2 | 1.71 |
| (1,866) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:13:PHE:HE2 | 2 | 1.71 |
| (1,391) | 1:A:22:ASN:H | 1:A:43:LYS:HD2 | 12 | 1.71 |
| (1,1186) | 1:A:61:TYR:HA | 1:A:64:LYS:HB3 | 18 | 1.71 |
| (1,1186) | 1:A:61:TYR:HA | 1:A:64:LYS:HB3 | 20 | 1.71 |
| (3,278) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HB3 | 8 | 1.7 |
| (3,278) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:64:LYS:HB3 | 8 | 1.7 |
| (1,866) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:13:PHE:HE1 | 6 | 1.7 |
| (1,866) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:13:PHE:HE2 | 6 | 1.7 |
| (1,866) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:13:PHE:HE1 | 18 | 1.7 |
| (1,866) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:13:PHE:HE2 | 18 | 1.7 |
| (1,675) | 1:A:22:ASN:HA | 1:A:43:LYS:HD2 | 7 | 1.7 |
| (1,556) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:67:ASN:HD22 | 10 | 1.7 |
| (1,391) | 1:A:22:ASN:H | 1:A:43:LYS:HD2 | 20 | 1.7 |
| (1,250) | 1:A:31:THR:H | 1:A:29:LEU:HB2 | 14 | 1.7 |
| (1,866) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:13:PHE:HE1 | 4 | 1.69 |
| (1,866) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:13:PHE:HE2 | 4 | 1.69 |
| (1,429) | 1:A:48:GLN:HE22 | 1:A:39:VAL:HG23 | 2 | 1.69 |
| (1,429) | 1:A:48:GLN:HE22 | 1:A:39:VAL:HG21 | 2 | 1.69 |
| (1,429) | 1:A:48:GLN:HE22 | 1:A:39:VAL:HG22 | 2 | 1.69 |
| (1,391) | 1:A:22:ASN:H | 1:A:43:LYS:HD2 | 7 | 1.69 |
| (1,250) | 1:A:31:THR:H | 1:A:29:LEU:HB2 | 10 | 1.69 |
| (1,250) | 1:A:31:THR:H | 1:A:29:LEU:HB2 | 16 | 1.69 |
| (1,250) | 1:A:31:THR:H | 1:A:29:LEU:HB2 | 20 | 1.69 |
| (1,1186) | 1:A:61:TYR:HA | 1:A:64:LYS:HB3 | 9 | 1.69 |
| (1,866) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:13:PHE:HE1 | 11 | 1.68 |
| (1,866) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:13:PHE:HE2 | 11 | 1.68 |
| (1,250) | 1:A:31:THR:H | 1:A:29:LEU:HB2 | 1 | 1.68 |
| (1,1186) | 1:A:61:TYR:HA | 1:A:64:LYS:HB3 | 13 | 1.68 |
| (1,1186) | 1:A:61:TYR:HA | 1:A:64:LYS:HB3 | 17 | 1.68 |
| (1,866) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:13:PHE:HE1 | 14 | 1.67 |
| (1,866) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:13:PHE:HE2 | 14 | 1.67 |
| (1,675) | 1:A:22:ASN:HA | 1:A:43:LYS:HD2 | 6 | 1.67 |
| (1,250) | 1:A:31:THR:H | 1:A:29:LEU:HB2 | 9 | 1.67 |
| (1,250) | 1:A:31:THR:H | 1:A:29:LEU:HB2 | 15 | 1.67 |
| (1,1186) | 1:A:61:TYR:HA | 1:A:64:LYS:HB3 | 2 | 1.67 |
| (1,684) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:10:PRO:HD3 | 10 | 1.66 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,556) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:67:ASN:HD22 | 4 | 1.66 |
| (1,250) | 1:A:31:THR:H | 1:A:29:LEU:HB2 | 11 | 1.66 |
| (1,1186) | 1:A:61:TYR:HA | 1:A:64:LYS:HB3 | 5 | 1.66 |
| (1,1186) | 1:A:61:TYR:HA | 1:A:64:LYS:HB3 | 19 | 1.66 |
| (1,250) | 1:A:31:THR:H | 1:A:29:LEU:HB2 | 4 | 1.65 |
| (1,250) | 1:A:31:THR:H | 1:A:29:LEU:HB2 | 5 | 1.65 |
| (1,250) | 1:A:31:THR:H | 1:A:29:LEU:HB2 | 8 | 1.65 |
| (1,250) | 1:A:31:THR:H | 1:A:29:LEU:HB2 | 12 | 1.65 |
| (1,250) | 1:A:31:THR:H | 1:A:29:LEU:HB2 | 17 | 1.65 |
| (1,171) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 10 | 1.65 |
| (1,1186) | 1:A:61:TYR:HA | 1:A:64:LYS:HB3 | 12 | 1.65 |
| (1,1186) | 1:A:61:TYR:HA | 1:A:64:LYS:HB3 | 15 | 1.65 |
| (1,1064) | 1:A:41:ARG:HD3 | 1:A:46:ASN:HA | 17 | 1.65 |
| (1,866) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:13:PHE:HE1 | 7 | 1.64 |
| (1,866) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:13:PHE:HE2 | 7 | 1.64 |
| (1,494) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:47:ARG:HB3 | 1 | 1.64 |
| (1,250) | 1:A:31:THR:H | 1:A:29:LEU:HB2 | 7 | 1.64 |
| (1,250) | 1:A:31:THR:H | 1:A:29:LEU:HB2 | 19 | 1.64 |
| (1,1186) | 1:A:61:TYR:HA | 1:A:64:LYS:HB3 | 7 | 1.64 |
| (1,684) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:10:PRO:HD3 | 1 | 1.63 |
| (1,675) | 1:A:22:ASN:HA | 1:A:43:LYS:HD2 | 12 | 1.63 |
| (1,556) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:67:ASN:HD22 | 17 | 1.63 |
| (1,250) | 1:A:31:THR:H | 1:A:29:LEU:HB2 | 6 | 1.63 |
| (1,1186) | 1:A:61:TYR:HA | 1:A:64:LYS:HB3 | 4 | 1.63 |
| (3,278) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HB3 | 16 | 1.62 |
| (3,278) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:64:LYS:HB3 | 16 | 1.62 |
| (1,866) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:13:PHE:HE1 | 17 | 1.62 |
| (1,866) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:13:PHE:HE2 | 17 | 1.62 |
| (1,556) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:67:ASN:HD22 | 16 | 1.62 |
| (1,510) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 3 | 1.62 |
| (1,250) | 1:A:31:THR:H | 1:A:29:LEU:HB2 | 18 | 1.62 |
| (1,171) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 8 | 1.62 |
| (1,171) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 11 | 1.62 |
| (1,1186) | 1:A:61:TYR:HA | 1:A:64:LYS:HB3 | 14 | 1.62 |
| (1,1064) | 1:A:41:ARG:HD3 | 1:A:46:ASN:HA | 2 | 1.62 |
| (1,764) | 1:A:14:PHE:HB2 | 1:A:51:ILE:HA | 13 | 1.61 |
| (1,34) | 1:A:25:HIS:HE1 | 1:A:41:ARG:HG3 | 2 | 1.61 |
| (1,250) | 1:A:31:THR:H | 1:A:29:LEU:HB2 | 3 | 1.61 |
| (1,250) | 1:A:31:THR:H | 1:A:29:LEU:HB2 | 13 | 1.61 |
| (1,171) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 6 | 1.61 |
| (1,1064) | 1:A:41:ARG:HD3 | 1:A:46:ASN:HA | 6 | 1.61 |
| (1,764) | 1:A:14:PHE:HB2 | 1:A:51:ILE:HA | 12 | 1.6 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,556) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:67:ASN:HD22 | 7 | 1.6 |
| (1,556) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:67:ASN:HD22 | 11 | 1.6 |
| (1,171) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 1 | 1.6 |
| (1,171) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 4 | 1.6 |
| (1,171) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 5 | 1.6 |
| (1,391) | 1:A:22:ASN:H | 1:A:43:LYS:HD2 | 15 | 1.59 |
| (1,171) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 2 | 1.59 |
| (1,1186) | 1:A:61:TYR:HA | 1:A:64:LYS:HB3 | 11 | 1.59 |
| (1,171) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 15 | 1.58 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:62:LEU:HB3 | 6 | 1.58 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:62:LEU:HB3 | 6 | 1.58 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:62:LEU:HB3 | 6 | 1.58 |
| (1,685) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:9:CYS:HB2 | 1 | 1.57 |
| (1,669) | 1:A:21:ALA:HA | 1:A:20:ARG:HB2 | 1 | 1.57 |
| (1,171) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 7 | 1.57 |
| (1,171) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 16 | 1.57 |
| (1,171) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 19 | 1.57 |
| (1,171) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 20 | 1.57 |
| (1,669) | 1:A:21:ALA:HA | 1:A:20:ARG:HB2 | 2 | 1.56 |
| (1,556) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:67:ASN:HD22 | 8 | 1.56 |
| (1,510) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 10 | 1.56 |
| (1,171) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 12 | 1.56 |
| (1,1167) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:62:LEU:HD11 | 10 | 1.56 |
| (1,1167) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:62:LEU:HD13 | 10 | 1.56 |
| (1,1167) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:62:LEU:HD12 | 10 | 1.56 |
| (1,1167) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:62:LEU:HD11 | 10 | 1.56 |
| (1,1167) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:62:LEU:HD13 | 10 | 1.56 |
| (1,1167) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:62:LEU:HD12 | 10 | 1.56 |
| (1,1167) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:62:LEU:HD11 | 10 | 1.56 |
| (1,1167) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:62:LEU:HD13 | 10 | 1.56 |
| (1,1167) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:62:LEU:HD12 | 10 | 1.56 |
| (3,278) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HB3 | 6 | 1.55 |
| (3,278) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:64:LYS:HB3 | 6 | 1.55 |
| (1,735) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:46:ASN:HA | 5 | 1.55 |
| (1,669) | 1:A:21:ALA:HA | 1:A:20:ARG:HB2 | 10 | 1.55 |
| (1,171) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 14 | 1.55 |
| (3,278) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HB3 | 1 | 1.54 |
| (3,278) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:64:LYS:HB3 | 1 | 1.54 |
| (1,669) | 1:A:21:ALA:HA | 1:A:20:ARG:HB2 | 3 | 1.54 |
| (1,669) | 1:A:21:ALA:HA | 1:A:20:ARG:HB2 | 13 | 1.54 |
| (1,669) | 1:A:21:ALA:HA | 1:A:20:ARG:HB2 | 19 | 1.54 |
| (1,669) | 1:A:21:ALA:HA | 1:A:20:ARG:HB2 | 20 | 1.54 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,553) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:26:LEU:HD22 | 6 | 1.54 |
| (1,553) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:26:LEU:HD21 | 6 | 1.54 |
| (1,553) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:26:LEU:HD23 | 6 | 1.54 |
| (1,171) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 9 | 1.54 |
| (1,171) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 18 | 1.54 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:62:LEU:HB3 | 7 | 1.54 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:62:LEU:HB3 | 7 | 1.54 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:62:LEU:HB3 | 7 | 1.54 |
| (1,96) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:39:VAL:HG12 | 2 | 1.53 |
| (1,96) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:39:VAL:HG11 | 2 | 1.53 |
| (1,96) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:39:VAL:HG13 | 2 | 1.53 |
| (1,720) | 1:A:47:ARG:HD2 | 1:A:42:LEU:HD12 | 17 | 1.53 |
| (1,720) | 1:A:47:ARG:HD2 | 1:A:42:LEU:HD11 | 17 | 1.53 |
| (1,720) | 1:A:47:ARG:HD2 | 1:A:42:LEU:HD13 | 17 | 1.53 |
| (1,669) | 1:A:21:ALA:HA | 1:A:20:ARG:HB2 | 6 | 1.53 |
| (1,669) | 1:A:21:ALA:HA | 1:A:20:ARG:HB2 | 9 | 1.53 |
| (1,553) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:26:LEU:HD22 | 16 | 1.53 |
| (1,553) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:26:LEU:HD21 | 16 | 1.53 |
| (1,553) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:26:LEU:HD23 | 16 | 1.53 |
| (1,510) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 17 | 1.53 |
| (3,278) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HB3 | 3 | 1.52 |
| (3,278) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:64:LYS:HB3 | 3 | 1.52 |
| (3,278) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HB3 | 10 | 1.52 |
| (3,278) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:64:LYS:HB3 | 10 | 1.52 |
| (1,669) | 1:A:21:ALA:HA | 1:A:20:ARG:HB2 | 7 | 1.52 |
| (1,510) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 11 | 1.52 |
| (1,171) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 3 | 1.52 |
| (1,171) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 13 | 1.52 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:62:LEU:HB3 | 12 | 1.52 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:62:LEU:HB3 | 12 | 1.52 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:62:LEU:HB3 | 12 | 1.52 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:62:LEU:HB3 | 17 | 1.52 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:62:LEU:HB3 | 17 | 1.52 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:62:LEU:HB3 | 17 | 1.52 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD13 | 10 | 1.51 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD12 | 10 | 1.51 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD11 | 10 | 1.51 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 10 | 1.51 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 10 | 1.51 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 10 | 1.51 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD13 | 11 | 1.51 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD12 | 11 | 1.51 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD11 | 11 | 1.51 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 11 | 1.51 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 11 | 1.51 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 11 | 1.51 |
| (1,685) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:9:CYS:HB2 | 16 | 1.51 |
| (1,684) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:10:PRO:HD3 | 19 | 1.51 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:62:LEU:HB3 | 10 | 1.51 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:62:LEU:HB3 | 10 | 1.51 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:62:LEU:HB3 | 10 | 1.51 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:62:LEU:HB3 | 14 | 1.51 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:62:LEU:HB3 | 14 | 1.51 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:62:LEU:HB3 | 14 | 1.51 |
| (1,720) | 1:A:47:ARG:HD2 | 1:A:42:LEU:HD12 | 6 | 1.5 |
| (1,720) | 1:A:47:ARG:HD2 | 1:A:42:LEU:HD11 | 6 | 1.5 |
| (1,720) | 1:A:47:ARG:HD2 | 1:A:42:LEU:HD13 | 6 | 1.5 |
| (1,720) | 1:A:47:ARG:HD2 | 1:A:42:LEU:HD12 | 8 | 1.5 |
| (1,720) | 1:A:47:ARG:HD2 | 1:A:42:LEU:HD11 | 8 | 1.5 |
| (1,720) | 1:A:47:ARG:HD2 | 1:A:42:LEU:HD13 | 8 | 1.5 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG11 | 15 | 1.5 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG13 | 15 | 1.5 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG12 | 15 | 1.5 |
| (1,556) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:67:ASN:HD22 | 20 | 1.5 |
| (1,510) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 2 | 1.5 |
| (1,171) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 17 | 1.5 |
| (1,1064) | 1:A:41:ARG:HD3 | 1:A:46:ASN:HA | 5 | 1.5 |
| (1,669) | 1:A:21:ALA:HA | 1:A:20:ARG:HB2 | 8 | 1.49 |
| (1,669) | 1:A:21:ALA:HA | 1:A:20:ARG:HB2 | 12 | 1.49 |
| (1,605) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:61:TYR:HB2 | 10 | 1.49 |
| (1,510) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 16 | 1.49 |
| (1,685) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:9:CYS:HB2 | 13 | 1.48 |
| (1,675) | 1:A:22:ASN:HA | 1:A:43:LYS:HD2 | 15 | 1.48 |
| (1,605) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:61:TYR:HB2 | 1 | 1.48 |
| (1,605) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:61:TYR:HB2 | 3 | 1.48 |
| (1,605) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:61:TYR:HB2 | 6 | 1.48 |
| (1,605) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:61:TYR:HB2 | 16 | 1.48 |
| (1,494) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:47:ARG:HB3 | 15 | 1.48 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:62:LEU:HB3 | 16 | 1.48 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:62:LEU:HB3 | 16 | 1.48 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:62:LEU:HB3 | 16 | 1.48 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD22 | 1:A:4:SER:HB3 | 11 | 1.47 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD23 | 1:A:4:SER:HB3 | 11 | 1.47 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD21 | 1:A:4:SER:HB3 | 11 | 1.47 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,231) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:29:LEU:HG | 11 | 1.47 |
| (3,231) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:66:LEU:HG | 11 | 1.47 |
| (1,922) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:49:VAL:HG11 | 15 | 1.47 |
| (1,922) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:49:VAL:HG13 | 15 | 1.47 |
| (1,922) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:49:VAL:HG12 | 15 | 1.47 |
| (1,685) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:9:CYS:HB2 | 8 | 1.47 |
| (1,685) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:9:CYS:HB2 | 10 | 1.47 |
| (1,669) | 1:A:21:ALA:HA | 1:A:20:ARG:HB2 | 16 | 1.47 |
| (1,605) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:61:TYR:HB2 | 11 | 1.47 |
| (1,605) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:61:TYR:HB2 | 14 | 1.47 |
| (1,461) | 1:A:37:GLN:HE21 | 1:A:10:PRO:HD3 | 1 | 1.47 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:62:LEU:HB3 | 8 | 1.47 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:62:LEU:HB3 | 8 | 1.47 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:62:LEU:HB3 | 8 | 1.47 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:62:LEU:HB3 | 13 | 1.47 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:62:LEU:HB3 | 13 | 1.47 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:62:LEU:HB3 | 13 | 1.47 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:62:LEU:HB3 | 15 | 1.47 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:62:LEU:HB3 | 15 | 1.47 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:62:LEU:HB3 | 15 | 1.47 |
| (1,923) | 1:A:15:GLU:HB3 | 1:A:49:VAL:HG11 | 1 | 1.46 |
| (1,923) | 1:A:15:GLU:HB3 | 1:A:49:VAL:HG13 | 1 | 1.46 |
| (1,923) | 1:A:15:GLU:HB3 | 1:A:49:VAL:HG12 | 1 | 1.46 |
| (1,685) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:9:CYS:HB2 | 5 | 1.46 |
| (1,685) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:9:CYS:HB2 | 17 | 1.46 |
| (1,605) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:61:TYR:HB2 | 7 | 1.46 |
| (1,605) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:61:TYR:HB2 | 12 | 1.46 |
| (1,605) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:61:TYR:HB2 | 17 | 1.46 |
| (1,605) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:61:TYR:HB2 | 18 | 1.46 |
| (1,1208) | 1:A:69:GLY:HA2 | 1:A:68:LYS:HB3 | 12 | 1.46 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:62:LEU:HB3 | 1 | 1.46 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:62:LEU:HB3 | 1 | 1.46 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:62:LEU:HB3 | 1 | 1.46 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:62:LEU:HB3 | 18 | 1.46 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:62:LEU:HB3 | 18 | 1.46 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:62:LEU:HB3 | 18 | 1.46 |
| (3,169) | 1:A:7:TYR:HB3 | 1:A:8:ARG:HB2 | 9 | 1.45 |
| (3,169) | 1:A:67:ASN:HB3 | 1:A:68:LYS:HD2 | 9 | 1.45 |
| (1,605) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:61:TYR:HB2 | 9 | 1.45 |
| (1,605) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:61:TYR:HB2 | 15 | 1.45 |
| (1,556) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:67:ASN:HD22 | 1 | 1.45 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:62:LEU:HB3 | 4 | 1.45 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:62:LEU:HB3 | 4 | 1.45 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:62:LEU:HB3 | 4 | 1.45 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:62:LEU:HB3 | 19 | 1.45 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:62:LEU:HB3 | 19 | 1.45 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:62:LEU:HB3 | 19 | 1.45 |
| (1,685) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:9:CYS:HB2 | 2 | 1.44 |
| (1,685) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:9:CYS:HB2 | 11 | 1.44 |
| (1,685) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:9:CYS:HB2 | 14 | 1.44 |
| (1,605) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:61:TYR:HB2 | 2 | 1.44 |
| (1,605) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:61:TYR:HB2 | 4 | 1.44 |
| (1,605) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:61:TYR:HB2 | 5 | 1.44 |
| (1,605) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:61:TYR:HB2 | 19 | 1.44 |
| (1,605) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:61:TYR:HB2 | 20 | 1.44 |
| (1,510) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 20 | 1.44 |
| (1,1210) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:41:ARG:HG2 | 2 | 1.44 |
| (1,1167) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:62:LEU:HD11 | 11 | 1.44 |
| (1,1167) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:62:LEU:HD13 | 11 | 1.44 |
| (1,1167) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:62:LEU:HD12 | 11 | 1.44 |
| (1,1167) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:62:LEU:HD11 | 11 | 1.44 |
| (1,1167) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:62:LEU:HD13 | 11 | 1.44 |
| (1,1167) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:62:LEU:HD12 | 11 | 1.44 |
| (1,1167) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:62:LEU:HD11 | 11 | 1.44 |
| (1,1167) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:62:LEU:HD13 | 11 | 1.44 |
| (1,1167) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:62:LEU:HD12 | 11 | 1.44 |
| (1,764) | 1:A:14:PHE:HB2 | 1:A:51:ILE:HA | 6 | 1.43 |
| (1,605) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:61:TYR:HB2 | 8 | 1.43 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:62:LEU:HB3 | 9 | 1.43 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:62:LEU:HB3 | 9 | 1.43 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:62:LEU:HB3 | 9 | 1.43 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:62:LEU:HB3 | 11 | 1.43 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:62:LEU:HB3 | 11 | 1.43 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:62:LEU:HB3 | 11 | 1.43 |
| (3,169) | 1:A:7:TYR:HB3 | 1:A:8:ARG:HB2 | 1 | 1.42 |
| (3,169) | 1:A:67:ASN:HB3 | 1:A:68:LYS:HD2 | 1 | 1.42 |
| (1,720) | 1:A:47:ARG:HD2 | 1:A:42:LEU:HD12 | 16 | 1.42 |
| (1,720) | 1:A:47:ARG:HD2 | 1:A:42:LEU:HD11 | 16 | 1.42 |
| (1,720) | 1:A:47:ARG:HD2 | 1:A:42:LEU:HD13 | 16 | 1.42 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG11 | 20 | 1.42 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG13 | 20 | 1.42 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG12 | 20 | 1.42 |
| (1,605) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:61:TYR:HB2 | 13 | 1.42 |
| (1,556) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:67:ASN:HD22 | 12 | 1.42 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,556) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:67:ASN:HD22 | 15 | 1.42 |
| (1,461) | 1:A:37:GLN:HE21 | 1:A:10:PRO:HD3 | 17 | 1.42 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:62:LEU:HB3 | 2 | 1.42 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:62:LEU:HB3 | 2 | 1.42 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:62:LEU:HB3 | 2 | 1.42 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:62:LEU:HB3 | 3 | 1.42 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:62:LEU:HB3 | 3 | 1.42 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:62:LEU:HB3 | 3 | 1.42 |
| (1,685) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:9:CYS:HB2 | 9 | 1.41 |
| (1,685) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:9:CYS:HB2 | 19 | 1.41 |
| (1,556) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:67:ASN:HD22 | 5 | 1.41 |
| (1,556) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:67:ASN:HD22 | 6 | 1.41 |
| (1,556) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:67:ASN:HD22 | 14 | 1.41 |
| (1,549) | 1:A:59:GLN:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 6 | 1.41 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:62:LEU:HB3 | 5 | 1.41 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:62:LEU:HB3 | 5 | 1.41 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:62:LEU:HB3 | 5 | 1.41 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:62:LEU:HB3 | 20 | 1.41 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:62:LEU:HB3 | 20 | 1.41 |
| (1,1165) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:62:LEU:HB3 | 20 | 1.41 |
| (1,720) | 1:A:47:ARG:HD2 | 1:A:42:LEU:HD12 | 9 | 1.4 |
| (1,720) | 1:A:47:ARG:HD2 | 1:A:42:LEU:HD11 | 9 | 1.4 |
| (1,720) | 1:A:47:ARG:HD2 | 1:A:42:LEU:HD13 | 9 | 1.4 |
| (1,685) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:9:CYS:HB2 | 7 | 1.4 |
| (1,556) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:67:ASN:HD22 | 3 | 1.4 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG11 | 7 | 1.39 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG13 | 7 | 1.39 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG12 | 7 | 1.39 |
| (1,549) | 1:A:59:GLN:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 8 | 1.39 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HB3 | 1 | 1.38 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HB3 | 1 | 1.38 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HB3 | 1 | 1.38 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 1 | 1.38 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 1 | 1.38 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 1 | 1.38 |
| (1,923) | 1:A:15:GLU:HB3 | 1:A:49:VAL:HG11 | 2 | 1.38 |
| (1,923) | 1:A:15:GLU:HB3 | 1:A:49:VAL:HG13 | 2 | 1.38 |
| (1,923) | 1:A:15:GLU:HB3 | 1:A:49:VAL:HG12 | 2 | 1.38 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG11 | 3 | 1.38 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG13 | 3 | 1.38 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG12 | 3 | 1.38 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG11 | 16 | 1.38 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG13 | 16 | 1.38 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG12 | 16 | 1.38 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:53:PRO:HB2 | 3 | 1.38 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:53:PRO:HB2 | 3 | 1.38 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:53:PRO:HB2 | 3 | 1.38 |
| (3,69) | 1:A:22:ASN:HD21 | 1:A:42:LEU:HB2 | 12 | 1.37 |
| (3,69) | 1:A:22:ASN:HD21 | 1:A:43:LYS:HD2 | 12 | 1.37 |
| (3,144) | 1:A:50:CYS:HB2 | 1:A:11:CYS:HB2 | 6 | 1.36 |
| (3,144) | 1:A:50:CYS:HB2 | 1:A:14:PHE:HB2 | 6 | 1.36 |
| (1,685) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:9:CYS:HB2 | 18 | 1.36 |
| (1,549) | 1:A:59:GLN:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 1 | 1.36 |
| (1,510) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 1 | 1.36 |
| (1,1186) | 1:A:61:TYR:HA | 1:A:64:LYS:HB3 | 8 | 1.36 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG11 | 14 | 1.35 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG13 | 14 | 1.35 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG12 | 14 | 1.35 |
| (1,685) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:9:CYS:HB2 | 6 | 1.35 |
| (1,685) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:9:CYS:HB2 | 12 | 1.35 |
| (1,684) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:10:PRO:HD3 | 5 | 1.35 |
| (1,684) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:10:PRO:HD3 | 17 | 1.35 |
| (1,265) | 1:A:41:ARG:H | 1:A:26:LEU:HD12 | 6 | 1.35 |
| (1,265) | 1:A:41:ARG:H | 1:A:26:LEU:HD11 | 6 | 1.35 |
| (1,265) | 1:A:41:ARG:H | 1:A:26:LEU:HD13 | 6 | 1.35 |
| (3,144) | 1:A:50:CYS:HB2 | 1:A:11:CYS:HB2 | 13 | 1.33 |
| (3,144) | 1:A:50:CYS:HB2 | 1:A:14:PHE:HB2 | 13 | 1.33 |
| (1,685) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:9:CYS:HB2 | 3 | 1.33 |
| (1,675) | 1:A:22:ASN:HA | 1:A:43:LYS:HD2 | 17 | 1.33 |
| (1,571) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HB3 | 5 | 1.33 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG11 | 10 | 1.32 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG13 | 10 | 1.32 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG12 | 10 | 1.32 |
| (1,549) | 1:A:59:GLN:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 7 | 1.32 |
| (1,265) | 1:A:41:ARG:H | 1:A:26:LEU:HD12 | 2 | 1.32 |
| (1,265) | 1:A:41:ARG:H | 1:A:26:LEU:HD11 | 2 | 1.32 |
| (1,265) | 1:A:41:ARG:H | 1:A:26:LEU:HD13 | 2 | 1.32 |
| (3,189) | 1:A:25:HIS:HB2 | 1:A:24:LYS:HB3 | 14 | 1.31 |
| (3,189) | 1:A:41:ARG:HB2 | 1:A:25:HIS:HB2 | 14 | 1.31 |
| (1,685) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:9:CYS:HB2 | 15 | 1.31 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD13 | 1 | 1.31 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD12 | 1 | 1.31 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD11 | 1 | 1.31 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD13 | 1 | 1.31 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD12 | 1 | 1.31 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD11 | 1 | 1.31 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD13 | 1 | 1.31 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD12 | 1 | 1.31 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD11 | 1 | 1.31 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:53:PRO:HB2 | 11 | 1.31 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:53:PRO:HB2 | 11 | 1.31 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:53:PRO:HB2 | 11 | 1.31 |
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HD11 | 10 | 1.3 |
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HD13 | 10 | 1.3 |
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HD12 | 10 | 1.3 |
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HG | 10 | 1.3 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG11 | 4 | 1.3 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG13 | 4 | 1.3 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG12 | 4 | 1.3 |
| (1,561) | 1:A:59:GLN:HA | 1:A:62:LEU:HD11 | 10 | 1.3 |
| (1,561) | 1:A:59:GLN:HA | 1:A:62:LEU:HD13 | 10 | 1.3 |
| (1,561) | 1:A:59:GLN:HA | 1:A:62:LEU:HD12 | 10 | 1.3 |
| (1,549) | 1:A:59:GLN:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 10 | 1.3 |
| (3,144) | 1:A:50:CYS:HB2 | 1:A:11:CYS:HB2 | 12 | 1.29 |
| (3,144) | 1:A:50:CYS:HB2 | 1:A:14:PHE:HB2 | 12 | 1.29 |
| (1,549) | 1:A:59:GLN:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 16 | 1.29 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:53:PRO:HB2 | 6 | 1.29 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:53:PRO:HB2 | 6 | 1.29 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:53:PRO:HB2 | 6 | 1.29 |
| (1,923) | 1:A:15:GLU:HB3 | 1:A:49:VAL:HG11 | 10 | 1.28 |
| (1,923) | 1:A:15:GLU:HB3 | 1:A:49:VAL:HG13 | 10 | 1.28 |
| (1,923) | 1:A:15:GLU:HB3 | 1:A:49:VAL:HG12 | 10 | 1.28 |
| (1,923) | 1:A:15:GLU:HB3 | 1:A:49:VAL:HG11 | 20 | 1.28 |
| (1,923) | 1:A:15:GLU:HB3 | 1:A:49:VAL:HG13 | 20 | 1.28 |
| (1,923) | 1:A:15:GLU:HB3 | 1:A:49:VAL:HG12 | 20 | 1.28 |
| (1,675) | 1:A:22:ASN:HA | 1:A:43:LYS:HD2 | 11 | 1.28 |
| (1,549) | 1:A:59:GLN:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 12 | 1.28 |
| (1,265) | 1:A:41:ARG:H | 1:A:26:LEU:HD12 | 16 | 1.28 |
| (1,265) | 1:A:41:ARG:H | 1:A:26:LEU:HD11 | 16 | 1.28 |
| (1,265) | 1:A:41:ARG:H | 1:A:26:LEU:HD13 | 16 | 1.28 |
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HD11 | 11 | 1.27 |
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HD13 | 11 | 1.27 |
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HD12 | 11 | 1.27 |
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HG | 11 | 1.27 |
| (1,571) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HB3 | 19 | 1.27 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HB3 | 10 | 1.26 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HB3 | 10 | 1.26 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HB3 | 10 | 1.26 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 10 | 1.26 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 10 | 1.26 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 10 | 1.26 |
| (1,923) | 1:A:15:GLU:HB3 | 1:A:49:VAL:HG11 | 16 | 1.26 |
| (1,923) | 1:A:15:GLU:HB3 | 1:A:49:VAL:HG13 | 16 | 1.26 |
| (1,923) | 1:A:15:GLU:HB3 | 1:A:49:VAL:HG12 | 16 | 1.26 |
| (1,754) | 1:A:54:LYS:HE3 | 1:A:54:LYS:HG3 | 16 | 1.26 |
| (1,549) | 1:A:59:GLN:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 4 | 1.26 |
| (1,455) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:29:LEU:HB2 | 19 | 1.26 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HB3 | 6 | 1.25 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HB3 | 6 | 1.25 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HB3 | 6 | 1.25 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 6 | 1.25 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 6 | 1.25 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 6 | 1.25 |
| (1,684) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:10:PRO:HD3 | 8 | 1.25 |
| (1,575) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:24:LYS:HD2 | 13 | 1.25 |
| (1,549) | 1:A:59:GLN:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 14 | 1.25 |
| (1,265) | 1:A:41:ARG:H | 1:A:26:LEU:HD12 | 10 | 1.25 |
| (1,265) | 1:A:41:ARG:H | 1:A:26:LEU:HD11 | 10 | 1.25 |
| (1,265) | 1:A:41:ARG:H | 1:A:26:LEU:HD13 | 10 | 1.25 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:53:PRO:HB2 | 1 | 1.25 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:53:PRO:HB2 | 1 | 1.25 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:53:PRO:HB2 | 1 | 1.25 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:53:PRO:HB2 | 19 | 1.25 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:53:PRO:HB2 | 19 | 1.25 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:53:PRO:HB2 | 19 | 1.25 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG11 | 2 | 1.24 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG13 | 2 | 1.24 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG12 | 2 | 1.24 |
| (1,575) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:24:LYS:HD2 | 12 | 1.24 |
| (1,549) | 1:A:59:GLN:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 17 | 1.24 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:53:PRO:HB2 | 10 | 1.24 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:53:PRO:HB2 | 10 | 1.24 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:53:PRO:HB2 | 10 | 1.24 |
| (3,69) | 1:A:22:ASN:HD21 | 1:A:42:LEU:HB2 | 11 | 1.23 |
| (3,69) | 1:A:22:ASN:HD21 | 1:A:43:LYS:HD2 | 11 | 1.23 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HB3 | 12 | 1.23 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HB3 | 12 | 1.23 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HB3 | 12 | 1.23 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 12 | 1.23 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 12 | 1.23 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 12 | 1.23 |
| (1,920) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:49:VAL:HG11 | 15 | 1.23 |
| (1,920) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:49:VAL:HG13 | 15 | 1.23 |
| (1,920) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:49:VAL:HG12 | 15 | 1.23 |
| (1,726) | 1:A:42:LEU:H | 1:A:41:ARG:HD3 | 8 | 1.23 |
| (1,719) | 1:A:47:ARG:HD2 | 1:A:47:ARG:HB3 | 8 | 1.23 |
| (1,549) | 1:A:59:GLN:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 19 | 1.23 |
| (1,510) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 6 | 1.23 |
| (1,510) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 8 | 1.23 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD12 | 1:A:38:ILE:CG2 | 6 | 1.23 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD11 | 1:A:38:ILE:CG2 | 6 | 1.23 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD13 | 1:A:38:ILE:CG2 | 6 | 1.23 |
| (1,1208) | 1:A:69:GLY:HA2 | 1:A:68:LYS:HB3 | 9 | 1.23 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:53:PRO:HB2 | 16 | 1.23 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:53:PRO:HB2 | 16 | 1.23 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:53:PRO:HB2 | 16 | 1.23 |
| (3,169) | 1:A:7:TYR:HB3 | 1:A:8:ARG:HB2 | 19 | 1.22 |
| (3,169) | 1:A:67:ASN:HB3 | 1:A:68:LYS:HD2 | 19 | 1.22 |
| (1,923) | 1:A:15:GLU:HB3 | 1:A:49:VAL:HG11 | 11 | 1.22 |
| (1,923) | 1:A:15:GLU:HB3 | 1:A:49:VAL:HG13 | 11 | 1.22 |
| (1,923) | 1:A:15:GLU:HB3 | 1:A:49:VAL:HG12 | 11 | 1.22 |
| (1,549) | 1:A:59:GLN:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 3 | 1.22 |
| (1,726) | 1:A:42:LEU:H | 1:A:41:ARG:HD3 | 6 | 1.21 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG11 | 1 | 1.21 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG13 | 1 | 1.21 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG12 | 1 | 1.21 |
| (1,684) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:10:PRO:HD3 | 13 | 1.21 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG23 | 17 | 1.21 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG22 | 17 | 1.21 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG21 | 17 | 1.21 |
| (1,549) | 1:A:59:GLN:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 13 | 1.21 |
| (1,549) | 1:A:59:GLN:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 15 | 1.21 |
| (1,455) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:29:LEU:HB2 | 1 | 1.21 |
| (1,1190) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:61:TYR:HB2 | 2 | 1.21 |
| (1,1190) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:61:TYR:HB2 | 2 | 1.21 |
| (1,1190) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:61:TYR:HB2 | 2 | 1.21 |
| (3,282) | 1:A:65:ALA:HA | 1:A:28:ILE:HG12 | 4 | 1.2 |
| (3,282) | 1:A:65:ALA:HA | 1:A:66:LEU:HB3 | 4 | 1.2 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HB3 | 4 | 1.2 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HB3 | 4 | 1.2 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HB3 | 4 | 1.2 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 4 | 1.2 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 4 | 1.2 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 4 | 1.2 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HB3 | 15 | 1.2 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HB3 | 15 | 1.2 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HB3 | 15 | 1.2 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 15 | 1.2 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 15 | 1.2 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 15 | 1.2 |
| (1,764) | 1:A:14:PHE:HB2 | 1:A:51:ILE:HA | 18 | 1.2 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG11 | 11 | 1.2 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG13 | 11 | 1.2 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG12 | 11 | 1.2 |
| (1,684) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:10:PRO:HD3 | 14 | 1.2 |
| (1,571) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HB3 | 17 | 1.2 |
| (1,571) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HB3 | 18 | 1.2 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG23 | 4 | 1.19 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG22 | 4 | 1.19 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG21 | 4 | 1.19 |
| (1,575) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:24:LYS:HD2 | 20 | 1.19 |
| (1,549) | 1:A:59:GLN:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 2 | 1.19 |
| (1,549) | 1:A:59:GLN:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 5 | 1.19 |
| (1,549) | 1:A:59:GLN:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 9 | 1.19 |
| (1,549) | 1:A:59:GLN:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 20 | 1.19 |
| (1,461) | 1:A:37:GLN:HE21 | 1:A:10:PRO:HD3 | 14 | 1.19 |
| (1,455) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:29:LEU:HB2 | 10 | 1.19 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD13 | 6 | 1.19 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD12 | 6 | 1.19 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD11 | 6 | 1.19 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD13 | 6 | 1.19 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD12 | 6 | 1.19 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD11 | 6 | 1.19 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD13 | 6 | 1.19 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD12 | 6 | 1.19 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD11 | 6 | 1.19 |
| (1,1047) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:29:LEU:HB3 | 4 | 1.19 |
| (3,255) | 1:A:48:GLN:HG2 | 1:A:39:VAL:HG23 | 2 | 1.18 |
| (3,255) | 1:A:48:GLN:HG2 | 1:A:39:VAL:HG21 | 2 | 1.18 |
| (3,255) | 1:A:48:GLN:HG2 | 1:A:39:VAL:HG22 | 2 | 1.18 |
| (3,255) | 1:A:48:GLN:HG3 | 1:A:39:VAL:HG23 | 2 | 1.18 |
| (3,255) | 1:A:48:GLN:HG3 | 1:A:39:VAL:HG21 | 2 | 1.18 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,255) | 1:A:48:GLN:HG3 | 1:A:39:VAL:HG22 | 2 | 1.18 |
| (1,923) | 1:A:15:GLU:HB3 | 1:A:49:VAL:HG11 | 3 | 1.18 |
| (1,923) | 1:A:15:GLU:HB3 | 1:A:49:VAL:HG13 | 3 | 1.18 |
| (1,923) | 1:A:15:GLU:HB3 | 1:A:49:VAL:HG12 | 3 | 1.18 |
| (1,920) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:49:VAL:HG11 | 7 | 1.18 |
| (1,920) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:49:VAL:HG13 | 7 | 1.18 |
| (1,920) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:49:VAL:HG12 | 7 | 1.18 |
| (1,770) | 1:A:22:ASN:HB3 | 1:A:42:LEU:HD21 | 5 | 1.18 |
| (1,770) | 1:A:22:ASN:HB3 | 1:A:42:LEU:HD23 | 5 | 1.18 |
| (1,770) | 1:A:22:ASN:HB3 | 1:A:42:LEU:HD22 | 5 | 1.18 |
| (1,684) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:10:PRO:HD3 | 9 | 1.18 |
| (1,571) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HB3 | 9 | 1.18 |
| (1,571) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HB3 | 11 | 1.18 |
| (1,549) | 1:A:59:GLN:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 18 | 1.18 |
| (1,465) | 1:A:37:GLN:HE21 | 1:A:29:LEU:HB2 | 2 | 1.18 |
| (1,333) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:54:LYS:HG3 | 9 | 1.18 |
| (3,169) | 1:A:7:TYR:HB3 | 1:A:8:ARG:HB2 | 5 | 1.17 |
| (3,169) | 1:A:67:ASN:HB3 | 1:A:68:LYS:HD2 | 5 | 1.17 |
| (1,712) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:37:GLN:HG3 | 20 | 1.17 |
| (1,641) | 1:A:5:LEU:HA | 1:A:5:LEU:HD22 | 3 | 1.17 |
| (1,641) | 1:A:5:LEU:HA | 1:A:5:LEU:HD23 | 3 | 1.17 |
| (1,641) | 1:A:5:LEU:HA | 1:A:5:LEU:HD21 | 3 | 1.17 |
| (1,575) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:24:LYS:HD2 | 2 | 1.17 |
| (1,575) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:24:LYS:HD2 | 3 | 1.17 |
| (1,575) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:24:LYS:HD2 | 16 | 1.17 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:53:PRO:HB2 | 7 | 1.17 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:53:PRO:HB2 | 7 | 1.17 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:53:PRO:HB2 | 7 | 1.17 |
| (3,282) | 1:A:65:ALA:HA | 1:A:28:ILE:HG12 | 13 | 1.16 |
| (3,282) | 1:A:65:ALA:HA | 1:A:66:LEU:HB3 | 13 | 1.16 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HB3 | 7 | 1.16 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HB3 | 7 | 1.16 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HB3 | 7 | 1.16 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 7 | 1.16 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 7 | 1.16 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 7 | 1.16 |
| (1,719) | 1:A:47:ARG:HD2 | 1:A:47:ARG:HB3 | 17 | 1.16 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG23 | 1 | 1.16 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG22 | 1 | 1.16 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG21 | 1 | 1.16 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG23 | 3 | 1.16 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG22 | 3 | 1.16 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG21 | 3 | 1.16 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG23 | 11 | 1.16 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG22 | 11 | 1.16 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG21 | 11 | 1.16 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG23 | 14 | 1.16 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG22 | 14 | 1.16 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG21 | 14 | 1.16 |
| (1,575) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:24:LYS:HD2 | 18 | 1.16 |
| (1,549) | 1:A:59:GLN:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 11 | 1.16 |
| (1,455) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:29:LEU:HB2 | 20 | 1.16 |
| (1,339) | 1:A:45:ASN:H | 1:A:44:ASN:HD22 | 19 | 1.16 |
| (1,1186) | 1:A:61:TYR:HA | 1:A:64:LYS:HB3 | 16 | 1.16 |
| (1,719) | 1:A:47:ARG:HD2 | 1:A:47:ARG:HB3 | 6 | 1.15 |
| (1,719) | 1:A:47:ARG:HD2 | 1:A:47:ARG:HB3 | 15 | 1.15 |
| (1,575) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:24:LYS:HD2 | 6 | 1.15 |
| (1,561) | 1:A:59:GLN:HA | 1:A:62:LEU:HD11 | 11 | 1.15 |
| (1,561) | 1:A:59:GLN:HA | 1:A:62:LEU:HD13 | 11 | 1.15 |
| (1,561) | 1:A:59:GLN:HA | 1:A:62:LEU:HD12 | 11 | 1.15 |
| (1,339) | 1:A:45:ASN:H | 1:A:44:ASN:HD22 | 8 | 1.15 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD13 | 12 | 1.15 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD12 | 12 | 1.15 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD11 | 12 | 1.15 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD13 | 12 | 1.15 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD12 | 12 | 1.15 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD11 | 12 | 1.15 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD13 | 12 | 1.15 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD12 | 12 | 1.15 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD11 | 12 | 1.15 |
| (3,169) | 1:A:7:TYR:HB3 | 1:A:8:ARG:HB2 | 10 | 1.14 |
| (3,169) | 1:A:67:ASN:HB3 | 1:A:68:LYS:HD2 | 10 | 1.14 |
| (1,719) | 1:A:47:ARG:HD2 | 1:A:47:ARG:HB3 | 16 | 1.14 |
| (1,455) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:29:LEU:HB2 | 8 | 1.14 |
| (1,339) | 1:A:45:ASN:H | 1:A:44:ASN:HD22 | 10 | 1.14 |
| (1,219) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:47:ARG:HB3 | 6 | 1.14 |
| (1,1186) | 1:A:61:TYR:HA | 1:A:64:LYS:HB3 | 6 | 1.14 |
| (3,69) | 1:A:22:ASN:HD21 | 1:A:42:LEU:HB2 | 6 | 1.13 |
| (3,69) | 1:A:22:ASN:HD21 | 1:A:43:LYS:HD2 | 6 | 1.13 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD22 | 15 | 1.13 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD23 | 15 | 1.13 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD21 | 15 | 1.13 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD22 | 15 | 1.13 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD23 | 15 | 1.13 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD21 | 15 | 1.13 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD22 | 15 | 1.13 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD23 | 15 | 1.13 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD21 | 15 | 1.13 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 15 | 1.13 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 15 | 1.13 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 15 | 1.13 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:66:LEU:HD11 | 15 | 1.13 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:66:LEU:HD12 | 15 | 1.13 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:66:LEU:HD13 | 15 | 1.13 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:66:LEU:HD11 | 15 | 1.13 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:66:LEU:HD12 | 15 | 1.13 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:66:LEU:HD13 | 15 | 1.13 |
| (1,719) | 1:A:47:ARG:HD2 | 1:A:47:ARG:HB3 | 9 | 1.13 |
| (1,575) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:24:LYS:HD2 | 9 | 1.13 |
| (1,571) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HB3 | 8 | 1.13 |
| (1,339) | 1:A:45:ASN:H | 1:A:44:ASN:HD22 | 7 | 1.13 |
| (1,1047) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:29:LEU:HB3 | 20 | 1.13 |
| (1,855) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 10 | 1.12 |
| (1,855) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 10 | 1.12 |
| (1,855) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 10 | 1.12 |
| (1,720) | 1:A:47:ARG:HD2 | 1:A:42:LEU:HD12 | 15 | 1.12 |
| (1,720) | 1:A:47:ARG:HD2 | 1:A:42:LEU:HD11 | 15 | 1.12 |
| (1,720) | 1:A:47:ARG:HD2 | 1:A:42:LEU:HD13 | 15 | 1.12 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG23 | 20 | 1.12 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG22 | 20 | 1.12 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG21 | 20 | 1.12 |
| (1,571) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HB3 | 2 | 1.12 |
| (1,333) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:54:LYS:HG3 | 8 | 1.12 |
| (3,69) | 1:A:22:ASN:HD21 | 1:A:42:LEU:HB2 | 7 | 1.11 |
| (3,69) | 1:A:22:ASN:HD21 | 1:A:43:LYS:HD2 | 7 | 1.11 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD13 | 7 | 1.11 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD12 | 7 | 1.11 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD11 | 7 | 1.11 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 7 | 1.11 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 7 | 1.11 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 7 | 1.11 |
| (3,144) | 1:A:50:CYS:HB2 | 1:A:11:CYS:HB2 | 14 | 1.11 |
| (3,144) | 1:A:50:CYS:HB2 | 1:A:14:PHE:HB2 | 14 | 1.11 |
| (1,571) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HB3 | 12 | 1.11 |
| (1,571) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HB3 | 15 | 1.11 |
| (1,571) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HB3 | 16 | 1.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,571) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HB3 | 20 | 1.11 |
| (1,465) | 1:A:37:GLN:HE21 | 1:A:29:LEU:HB2 | 11 | 1.11 |
| (1,455) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:29:LEU:HB2 | 13 | 1.11 |
| (1,339) | 1:A:45:ASN:H | 1:A:44:ASN:HD22 | 14 | 1.11 |
| (1,219) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:47:ARG:HB3 | 16 | 1.11 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD12 | 1:A:38:ILE:CG2 | 16 | 1.11 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD11 | 1:A:38:ILE:CG2 | 16 | 1.11 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD13 | 1:A:38:ILE:CG2 | 16 | 1.11 |
| (1,156) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HB3 | 3 | 1.11 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:53:PRO:HB2 | 17 | 1.11 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:53:PRO:HB2 | 17 | 1.11 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:53:PRO:HB2 | 17 | 1.11 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD13 | 6 | 1.1 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD12 | 6 | 1.1 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD11 | 6 | 1.1 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 6 | 1.1 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 6 | 1.1 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 6 | 1.1 |
| (1,764) | 1:A:14:PHE:HB2 | 1:A:51:ILE:HA | 14 | 1.1 |
| (1,723) | 1:A:20:ARG:HD3 | 1:A:20:ARG:HB2 | 16 | 1.1 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG23 | 16 | 1.1 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG22 | 16 | 1.1 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG21 | 16 | 1.1 |
| (1,575) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:24:LYS:HD2 | 19 | 1.1 |
| (1,510) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 13 | 1.1 |
| (1,339) | 1:A:45:ASN:H | 1:A:44:ASN:HD22 | 4 | 1.1 |
| (1,219) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:47:ARG:HB3 | 10 | 1.1 |
| (1,156) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HB3 | 2 | 1.1 |
| (1,1047) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:29:LEU:HB3 | 15 | 1.1 |
| (1,923) | 1:A:15:GLU:HB3 | 1:A:49:VAL:HG11 | 17 | 1.09 |
| (1,923) | 1:A:15:GLU:HB3 | 1:A:49:VAL:HG13 | 17 | 1.09 |
| (1,923) | 1:A:15:GLU:HB3 | 1:A:49:VAL:HG12 | 17 | 1.09 |
| (1,922) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:49:VAL:HG11 | 14 | 1.09 |
| (1,922) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:49:VAL:HG13 | 14 | 1.09 |
| (1,922) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:49:VAL:HG12 | 14 | 1.09 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG11 | 17 | 1.09 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG13 | 17 | 1.09 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG12 | 17 | 1.09 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG23 | 10 | 1.09 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG22 | 10 | 1.09 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG21 | 10 | 1.09 |
| (1,455) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:29:LEU:HB2 | 4 | 1.09 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,455) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:29:LEU:HB2 | 9 | 1.09 |
| (1,347) | 1:A:11:CYS:H | 1:A:10:PRO:HD3 | 11 | 1.09 |
| (1,219) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:47:ARG:HB3 | 5 | 1.09 |
| (1,219) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:47:ARG:HB3 | 13 | 1.09 |
| (1,219) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:47:ARG:HB3 | 17 | 1.09 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD12 | 1:A:38:ILE:CG2 | 2 | 1.09 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD11 | 1:A:38:ILE:CG2 | 2 | 1.09 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD13 | 1:A:38:ILE:CG2 | 2 | 1.09 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD13 | 19 | 1.09 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD12 | 19 | 1.09 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD11 | 19 | 1.09 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD13 | 19 | 1.09 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD12 | 19 | 1.09 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD11 | 19 | 1.09 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD13 | 19 | 1.09 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD12 | 19 | 1.09 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD11 | 19 | 1.09 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG23 | 15 | 1.08 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG22 | 15 | 1.08 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG21 | 15 | 1.08 |
| (1,575) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:24:LYS:HD2 | 7 | 1.08 |
| (1,502) | 1:A:48:GLN:HE21 | 1:A:39:VAL:HG23 | 2 | 1.08 |
| (1,502) | 1:A:48:GLN:HE21 | 1:A:39:VAL:HG21 | 2 | 1.08 |
| (1,502) | 1:A:48:GLN:HE21 | 1:A:39:VAL:HG22 | 2 | 1.08 |
| (1,465) | 1:A:37:GLN:HE21 | 1:A:29:LEU:HB2 | 12 | 1.08 |
| (1,455) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:29:LEU:HB2 | 11 | 1.08 |
| (1,339) | 1:A:45:ASN:H | 1:A:44:ASN:HD22 | 1 | 1.08 |
| (1,339) | 1:A:45:ASN:H | 1:A:44:ASN:HD22 | 6 | 1.08 |
| (1,339) | 1:A:45:ASN:H | 1:A:44:ASN:HD22 | 13 | 1.08 |
| (1,339) | 1:A:45:ASN:H | 1:A:44:ASN:HD22 | 15 | 1.08 |
| (1,219) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:47:ARG:HB3 | 9 | 1.08 |
| (1,219) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:47:ARG:HB3 | 18 | 1.08 |
| (1,156) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HB3 | 9 | 1.08 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD13 | 8 | 1.08 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD12 | 8 | 1.08 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD11 | 8 | 1.08 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD13 | 8 | 1.08 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD12 | 8 | 1.08 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD11 | 8 | 1.08 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD13 | 8 | 1.08 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD12 | 8 | 1.08 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD11 | 8 | 1.08 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD13 | 13 | 1.08 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD12 | 13 | 1.08 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD11 | 13 | 1.08 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD13 | 13 | 1.08 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD12 | 13 | 1.08 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD11 | 13 | 1.08 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD13 | 13 | 1.08 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD12 | 13 | 1.08 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD11 | 13 | 1.08 |
| (1,12) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:LEU:HB3 | 16 | 1.08 |
| (1,712) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:37:GLN:HG3 | 10 | 1.07 |
| (1,615) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:54:LYS:HG3 | 6 | 1.07 |
| (1,571) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HB3 | 14 | 1.07 |
| (1,510) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 19 | 1.07 |
| (1,455) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:29:LEU:HB2 | 2 | 1.07 |
| (1,339) | 1:A:45:ASN:H | 1:A:44:ASN:HD22 | 9 | 1.07 |
| (1,219) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:47:ARG:HB3 | 15 | 1.07 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD12 | 1:A:38:ILE:CG2 | 10 | 1.07 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD11 | 1:A:38:ILE:CG2 | 10 | 1.07 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD13 | 1:A:38:ILE:CG2 | 10 | 1.07 |
| (1,156) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HB3 | 5 | 1.07 |
| (1,156) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HB3 | 10 | 1.07 |
| (1,1047) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:29:LEU:HB3 | 10 | 1.07 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD22 | 8 | 1.06 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD23 | 8 | 1.06 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD21 | 8 | 1.06 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD22 | 8 | 1.06 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD23 | 8 | 1.06 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD21 | 8 | 1.06 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD22 | 8 | 1.06 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD23 | 8 | 1.06 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD21 | 8 | 1.06 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 8 | 1.06 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 8 | 1.06 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 8 | 1.06 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:66:LEU:HD11 | 8 | 1.06 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:66:LEU:HD12 | 8 | 1.06 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:66:LEU:HD13 | 8 | 1.06 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:66:LEU:HD11 | 8 | 1.06 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:66:LEU:HD12 | 8 | 1.06 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:66:LEU:HD13 | 8 | 1.06 |
| (1,866) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:13:PHE:HE1 | 12 | 1.06 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,866) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:13:PHE:HE2 | 12 | 1.06 |
| (1,712) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:37:GLN:HG3 | 19 | 1.06 |
| (1,641) | 1:A:5:LEU:HA | 1:A:5:LEU:HD22 | 11 | 1.06 |
| (1,641) | 1:A:5:LEU:HA | 1:A:5:LEU:HD23 | 11 | 1.06 |
| (1,641) | 1:A:5:LEU:HA | 1:A:5:LEU:HD21 | 11 | 1.06 |
| (1,455) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:29:LEU:HB2 | 5 | 1.06 |
| (1,339) | 1:A:45:ASN:H | 1:A:44:ASN:HD22 | 16 | 1.06 |
| (1,339) | 1:A:45:ASN:H | 1:A:44:ASN:HD22 | 17 | 1.06 |
| (1,220) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:47:ARG:HG3 | 20 | 1.06 |
| (1,156) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HB3 | 17 | 1.06 |
| (1,1186) | 1:A:61:TYR:HA | 1:A:64:LYS:HB3 | 1 | 1.06 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD11 | 10 | 1.05 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD13 | 10 | 1.05 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD12 | 10 | 1.05 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HG | 10 | 1.05 |
| (3,144) | 1:A:50:CYS:HB2 | 1:A:11:CYS:HB2 | 3 | 1.05 |
| (3,144) | 1:A:50:CYS:HB2 | 1:A:14:PHE:HB2 | 3 | 1.05 |
| (1,641) | 1:A:5:LEU:HA | 1:A:5:LEU:HD22 | 4 | 1.05 |
| (1,641) | 1:A:5:LEU:HA | 1:A:5:LEU:HD23 | 4 | 1.05 |
| (1,641) | 1:A:5:LEU:HA | 1:A:5:LEU:HD21 | 4 | 1.05 |
| (1,615) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:54:LYS:HG3 | 20 | 1.05 |
| (1,219) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:47:ARG:HB3 | 1 | 1.05 |
| (1,219) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:47:ARG:HB3 | 8 | 1.05 |
| (1,162) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:68:LYS:HG2 | 16 | 1.05 |
| (1,156) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HB3 | 4 | 1.05 |
| (1,156) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HB3 | 19 | 1.05 |
| (1,12) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:LEU:HB3 | 3 | 1.05 |
| (1,12) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:LEU:HB3 | 6 | 1.05 |
| (1,1190) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:61:TYR:HB2 | 10 | 1.05 |
| (1,1190) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:61:TYR:HB2 | 10 | 1.05 |
| (1,1190) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:61:TYR:HB2 | 10 | 1.05 |
| (3,69) | 1:A:22:ASN:HD21 | 1:A:42:LEU:HB2 | 20 | 1.04 |
| (3,69) | 1:A:22:ASN:HD21 | 1:A:43:LYS:HD2 | 20 | 1.04 |
| (3,169) | 1:A:7:TYR:HB3 | 1:A:8:ARG:HB2 | 15 | 1.04 |
| (3,169) | 1:A:67:ASN:HB3 | 1:A:68:LYS:HD2 | 15 | 1.04 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD13 | 3 | 1.04 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD12 | 3 | 1.04 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD11 | 3 | 1.04 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 3 | 1.04 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 3 | 1.04 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 3 | 1.04 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG23 | 2 | 1.04 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG22 | 2 | 1.04 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG21 | 2 | 1.04 |
| (1,575) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:24:LYS:HD2 | 14 | 1.04 |
| (1,455) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:29:LEU:HB2 | 16 | 1.04 |
| (1,347) | 1:A:11:CYS:H | 1:A:10:PRO:HD3 | 10 | 1.04 |
| (1,156) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HB3 | 14 | 1.04 |
| (1,156) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HB3 | 15 | 1.04 |
| (1,156) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HB3 | 20 | 1.04 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD13 | 16 | 1.03 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD12 | 16 | 1.03 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD11 | 16 | 1.03 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 16 | 1.03 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 16 | 1.03 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 16 | 1.03 |
| (1,726) | 1:A:42:LEU:H | 1:A:41:ARG:HD3 | 5 | 1.03 |
| (1,510) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 12 | 1.03 |
| (1,12) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:LEU:HB3 | 5 | 1.03 |
| (3,286) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:68:LYS:HD2 | 6 | 1.02 |
| (3,286) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:64:LYS:HD2 | 6 | 1.02 |
| (3,286) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:66:LEU:HB3 | 6 | 1.02 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD22 | 1:A:4:SER:HB3 | 4 | 1.02 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD23 | 1:A:4:SER:HB3 | 4 | 1.02 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD21 | 1:A:4:SER:HB3 | 4 | 1.02 |
| (3,231) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:29:LEU:HG | 4 | 1.02 |
| (3,231) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:66:LEU:HG | 4 | 1.02 |
| (1,866) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:13:PHE:HE1 | 13 | 1.02 |
| (1,866) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:13:PHE:HE2 | 13 | 1.02 |
| (1,615) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:54:LYS:HG3 | 7 | 1.02 |
| (1,455) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:29:LEU:HB2 | 15 | 1.02 |
| (1,12) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:LEU:HB3 | 1 | 1.02 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:53:PRO:HB2 | 5 | 1.02 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:53:PRO:HB2 | 5 | 1.02 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:53:PRO:HB2 | 5 | 1.02 |
| (1,1028) | 1:A:38:ILE:HG12 | 1:A:37:GLN:HA | 5 | 1.02 |
| (3,46) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:20:ARG:HD3 | 8 | 1.01 |
| (3,46) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:22:ASN:HB2 | 8 | 1.01 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HB3 | 16 | 1.01 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HB3 | 16 | 1.01 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HB3 | 16 | 1.01 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 16 | 1.01 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 16 | 1.01 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 16 | 1.01 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,726) | 1:A:42:LEU:H | 1:A:41:ARG:HD3 | 17 | 1.01 |
| (1,712) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:37:GLN:HG3 | 13 | 1.01 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG23 | 7 | 1.01 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG22 | 7 | 1.01 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG21 | 7 | 1.01 |
| (1,575) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:24:LYS:HD2 | 10 | 1.01 |
| (1,339) | 1:A:45:ASN:H | 1:A:44:ASN:HD22 | 18 | 1.01 |
| (1,1208) | 1:A:69:GLY:HA2 | 1:A:68:LYS:HB3 | 7 | 1.01 |
| (1,1186) | 1:A:61:TYR:HA | 1:A:64:LYS:HB3 | 10 | 1.01 |
| (3,46) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:20:ARG:HD3 | 5 | 1.0 |
| (3,46) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:22:ASN:HB2 | 5 | 1.0 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD11 | 11 | 1.0 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD13 | 11 | 1.0 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD12 | 11 | 1.0 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HG | 11 | 1.0 |
| (1,47) | 1:A:57:TRP:HZ3 | 1:A:20:ARG:HG3 | 5 | 1.0 |
| (1,47) | 1:A:57:TRP:HZ3 | 1:A:20:ARG:HG3 | 18 | 1.0 |
| (1,339) | 1:A:45:ASN:H | 1:A:44:ASN:HD22 | 3 | 1.0 |
| (1,339) | 1:A:45:ASN:H | 1:A:44:ASN:HD22 | 20 | 1.0 |
| (1,289) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:66:LEU:HD11 | 18 | 1.0 |
| (1,289) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:66:LEU:HD12 | 18 | 1.0 |
| (1,289) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:66:LEU:HD13 | 18 | 1.0 |
| (1,261) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:63:GLU:HB3 | 7 | 1.0 |
| (1,261) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:63:GLU:HB3 | 15 | 1.0 |
| (1,225) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HD11 | 11 | 1.0 |
| (1,225) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HD13 | 11 | 1.0 |
| (1,225) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HD12 | 11 | 1.0 |
| (1,156) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HB3 | 11 | 1.0 |
| (1,156) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HB3 | 16 | 1.0 |
| (1,156) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HB3 | 18 | 1.0 |
| (1,1204) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:28:ILE:HG12 | 4 | 1.0 |
| (1,1204) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:28:ILE:HG12 | 4 | 1.0 |
| (1,1204) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:28:ILE:HG12 | 4 | 1.0 |
| (1,1186) | 1:A:61:TYR:HA | 1:A:64:LYS:HB3 | 3 | 1.0 |
| (3,286) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:68:LYS:HD2 | 7 | 0.99 |
| (3,286) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:64:LYS:HD2 | 7 | 0.99 |
| (3,286) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:66:LEU:HB3 | 7 | 0.99 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD13 | 1 | 0.99 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD12 | 1 | 0.99 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD11 | 1 | 0.99 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 1 | 0.99 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 1 | 0.99 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 1 | 0.99 |
| (1,922) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:49:VAL:HG11 | 7 | 0.99 |
| (1,922) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:49:VAL:HG13 | 7 | 0.99 |
| (1,922) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:49:VAL:HG12 | 7 | 0.99 |
| (1,712) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:37:GLN:HG3 | 3 | 0.99 |
| (1,712) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:37:GLN:HG3 | 16 | 0.99 |
| (1,615) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:54:LYS:HG3 | 12 | 0.99 |
| (1,465) | 1:A:37:GLN:HE21 | 1:A:29:LEU:HB2 | 15 | 0.99 |
| (1,347) | 1:A:11:CYS:H | 1:A:10:PRO:HD3 | 9 | 0.99 |
| (1,347) | 1:A:11:CYS:H | 1:A:10:PRO:HD3 | 17 | 0.99 |
| (1,261) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:63:GLU:HB3 | 4 | 0.99 |
| (1,261) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:63:GLU:HB3 | 5 | 0.99 |
| (1,261) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:63:GLU:HB3 | 8 | 0.99 |
| (1,261) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:63:GLU:HB3 | 19 | 0.99 |
| (1,12) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:LEU:HB3 | 7 | 0.99 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD13 | 13 | 0.98 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD12 | 13 | 0.98 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD11 | 13 | 0.98 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 13 | 0.98 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 13 | 0.98 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 13 | 0.98 |
| (1,615) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:54:LYS:HG3 | 16 | 0.98 |
| (1,571) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HB3 | 7 | 0.98 |
| (1,455) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:29:LEU:HB2 | 12 | 0.98 |
| (1,261) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:63:GLU:HB3 | 1 | 0.98 |
| (1,261) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:63:GLU:HB3 | 2 | 0.98 |
| (1,261) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:63:GLU:HB3 | 3 | 0.98 |
| (1,261) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:63:GLU:HB3 | 6 | 0.98 |
| (1,261) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:63:GLU:HB3 | 9 | 0.98 |
| (1,261) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:63:GLU:HB3 | 10 | 0.98 |
| (1,261) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:63:GLU:HB3 | 11 | 0.98 |
| (1,261) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:63:GLU:HB3 | 12 | 0.98 |
| (1,261) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:63:GLU:HB3 | 13 | 0.98 |
| (1,261) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:63:GLU:HB3 | 16 | 0.98 |
| (1,261) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:63:GLU:HB3 | 17 | 0.98 |
| (1,150) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:15:GLU:HG2 | 5 | 0.98 |
| (3,260) | 1:A:54:LYS:HB2 | 1:A:54:LYS:HE3 | 16 | 0.97 |
| (3,260) | 1:A:54:LYS:HB3 | 1:A:54:LYS:HE3 | 16 | 0.97 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD22 | 16 | 0.97 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD23 | 16 | 0.97 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD21 | 16 | 0.97 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD22 | 16 | 0.97 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD23 | 16 | 0.97 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD21 | 16 | 0.97 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD22 | 16 | 0.97 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD23 | 16 | 0.97 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD21 | 16 | 0.97 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 16 | 0.97 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 16 | 0.97 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 16 | 0.97 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:66:LEU:HD11 | 16 | 0.97 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:66:LEU:HD12 | 16 | 0.97 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:66:LEU:HD13 | 16 | 0.97 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:66:LEU:HD11 | 16 | 0.97 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:66:LEU:HD12 | 16 | 0.97 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:66:LEU:HD13 | 16 | 0.97 |
| (3,144) | 1:A:50:CYS:HB2 | 1:A:11:CYS:HB2 | 18 | 0.97 |
| (3,144) | 1:A:50:CYS:HB2 | 1:A:14:PHE:HB2 | 18 | 0.97 |
| (1,764) | 1:A:14:PHE:HB2 | 1:A:51:ILE:HA | 3 | 0.97 |
| (1,712) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:37:GLN:HG3 | 9 | 0.97 |
| (1,347) | 1:A:11:CYS:H | 1:A:10:PRO:HD3 | 8 | 0.97 |
| (1,347) | 1:A:11:CYS:H | 1:A:10:PRO:HD3 | 16 | 0.97 |
| (1,261) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:63:GLU:HB3 | 14 | 0.97 |
| (1,261) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:63:GLU:HB3 | 18 | 0.97 |
| (1,225) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HD11 | 10 | 0.97 |
| (1,225) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HD13 | 10 | 0.97 |
| (1,225) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HD12 | 10 | 0.97 |
| (1,162) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:68:LYS:HG2 | 20 | 0.97 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD22 | 19 | 0.96 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD23 | 19 | 0.96 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD21 | 19 | 0.96 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD22 | 19 | 0.96 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD23 | 19 | 0.96 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD21 | 19 | 0.96 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD22 | 19 | 0.96 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD23 | 19 | 0.96 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD21 | 19 | 0.96 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 19 | 0.96 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 19 | 0.96 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 19 | 0.96 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:66:LEU:HD11 | 19 | 0.96 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:66:LEU:HD12 | 19 | 0.96 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:66:LEU:HD13 | 19 | 0.96 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:66:LEU:HD11 | 19 | 0.96 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:66:LEU:HD12 | 19 | 0.96 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:66:LEU:HD13 | 19 | 0.96 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD13 | 12 | 0.96 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD12 | 12 | 0.96 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD11 | 12 | 0.96 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 12 | 0.96 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 12 | 0.96 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 12 | 0.96 |
| (1,347) | 1:A:11:CYS:H | 1:A:10:PRO:HD3 | 1 | 0.96 |
| (1,347) | 1:A:11:CYS:H | 1:A:10:PRO:HD3 | 2 | 0.96 |
| (1,347) | 1:A:11:CYS:H | 1:A:10:PRO:HD3 | 13 | 0.96 |
| (1,347) | 1:A:11:CYS:H | 1:A:10:PRO:HD3 | 14 | 0.96 |
| (1,297) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 6 | 0.96 |
| (1,297) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 14 | 0.96 |
| (1,287) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:66:LEU:HB3 | 9 | 0.96 |
| (1,261) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:63:GLU:HB3 | 20 | 0.96 |
| (1,156) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HB3 | 8 | 0.96 |
| (1,156) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HB3 | 13 | 0.96 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD13 | 16 | 0.96 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD12 | 16 | 0.96 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD11 | 16 | 0.96 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD13 | 16 | 0.96 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD12 | 16 | 0.96 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD11 | 16 | 0.96 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD13 | 16 | 0.96 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD12 | 16 | 0.96 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD11 | 16 | 0.96 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HB3 | 13 | 0.95 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HB3 | 13 | 0.95 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HB3 | 13 | 0.95 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 13 | 0.95 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 13 | 0.95 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 13 | 0.95 |
| (3,144) | 1:A:50:CYS:HB2 | 1:A:11:CYS:HB2 | 9 | 0.95 |
| (3,144) | 1:A:50:CYS:HB2 | 1:A:14:PHE:HB2 | 9 | 0.95 |
| (1,712) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:37:GLN:HG3 | 8 | 0.95 |
| (1,615) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:54:LYS:HG3 | 15 | 0.95 |
| (1,347) | 1:A:11:CYS:H | 1:A:10:PRO:HD3 | 12 | 0.95 |
| (1,289) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:66:LEU:HD11 | 11 | 0.95 |
| (1,289) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:66:LEU:HD12 | 11 | 0.95 |
| (1,289) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:66:LEU:HD13 | 11 | 0.95 |
| (1,289) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:66:LEU:HD11 | 14 | 0.95 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,289) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:66:LEU:HD12 | 14 | 0.95 |
| (1,289) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:66:LEU:HD13 | 14 | 0.95 |
| (1,287) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:66:LEU:HB3 | 5 | 0.95 |
| (1,150) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:15:GLU:HG2 | 4 | 0.95 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD13 | 15 | 0.95 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD12 | 15 | 0.95 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD11 | 15 | 0.95 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD13 | 15 | 0.95 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD12 | 15 | 0.95 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD11 | 15 | 0.95 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD13 | 15 | 0.95 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD12 | 15 | 0.95 |
| (1,1202) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD11 | 15 | 0.95 |
| (3,169) | 1:A:7:TYR:HB3 | 1:A:8:ARG:HB2 | 12 | 0.94 |
| (3,169) | 1:A:67:ASN:HB3 | 1:A:68:LYS:HD2 | 12 | 0.94 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD13 | 14 | 0.94 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD12 | 14 | 0.94 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD11 | 14 | 0.94 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 14 | 0.94 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 14 | 0.94 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 14 | 0.94 |
| (1,920) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:49:VAL:HG11 | 3 | 0.94 |
| (1,920) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:49:VAL:HG13 | 3 | 0.94 |
| (1,920) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:49:VAL:HG12 | 3 | 0.94 |
| (1,297) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 1 | 0.94 |
| (1,297) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 3 | 0.94 |
| (1,297) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 7 | 0.94 |
| (1,297) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 9 | 0.94 |
| (1,297) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 11 | 0.94 |
| (1,297) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 12 | 0.94 |
| (1,297) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 16 | 0.94 |
| (1,297) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 19 | 0.94 |
| (3,75) | 1:A:31:THR:H | 1:A:33:ASN:HD22 | 14 | 0.93 |
| (3,75) | 1:A:31:THR:H | 1:A:37:GLN:HE21 | 14 | 0.93 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD13 | 5 | 0.93 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD12 | 5 | 0.93 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD11 | 5 | 0.93 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 5 | 0.93 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 5 | 0.93 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 5 | 0.93 |
| (3,144) | 1:A:50:CYS:HB2 | 1:A:11:CYS:HB2 | 16 | 0.93 |
| (3,144) | 1:A:50:CYS:HB2 | 1:A:14:PHE:HB2 | 16 | 0.93 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,712) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:37:GLN:HG3 | 4 | 0.93 |
| (1,683) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:32:PRO:HB3 | 8 | 0.93 |
| (1,683) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:32:PRO:HB3 | 13 | 0.93 |
| (1,615) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:54:LYS:HG3 | 1 | 0.93 |
| (1,615) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:54:LYS:HG3 | 8 | 0.93 |
| (1,347) | 1:A:11:CYS:H | 1:A:10:PRO:HD3 | 3 | 0.93 |
| (1,347) | 1:A:11:CYS:H | 1:A:10:PRO:HD3 | 6 | 0.93 |
| (1,339) | 1:A:45:ASN:H | 1:A:44:ASN:HD22 | 12 | 0.93 |
| (1,289) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:66:LEU:HD11 | 19 | 0.93 |
| (1,289) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:66:LEU:HD12 | 19 | 0.93 |
| (1,289) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:66:LEU:HD13 | 19 | 0.93 |
| (1,287) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:66:LEU:HB3 | 12 | 0.93 |
| (1,1038) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:39:VAL:HG23 | 2 | 0.93 |
| (1,1038) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:39:VAL:HG21 | 2 | 0.93 |
| (1,1038) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:39:VAL:HG22 | 2 | 0.93 |
| (3,69) | 1:A:22:ASN:HD21 | 1:A:42:LEU:HB2 | 17 | 0.92 |
| (3,69) | 1:A:22:ASN:HD21 | 1:A:43:LYS:HD2 | 17 | 0.92 |
| (3,260) | 1:A:54:LYS:HB2 | 1:A:54:LYS:HE3 | 6 | 0.92 |
| (3,260) | 1:A:54:LYS:HB3 | 1:A:54:LYS:HE3 | 6 | 0.92 |
| (1,920) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:49:VAL:HG11 | 2 | 0.92 |
| (1,920) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:49:VAL:HG13 | 2 | 0.92 |
| (1,920) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:49:VAL:HG12 | 2 | 0.92 |
| (1,920) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:49:VAL:HG11 | 20 | 0.92 |
| (1,920) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:49:VAL:HG13 | 20 | 0.92 |
| (1,920) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:49:VAL:HG12 | 20 | 0.92 |
| (1,866) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:13:PHE:HE1 | 3 | 0.92 |
| (1,866) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:13:PHE:HE2 | 3 | 0.92 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG11 | 12 | 0.92 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG13 | 12 | 0.92 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG12 | 12 | 0.92 |
| (1,683) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:32:PRO:HB3 | 2 | 0.92 |
| (1,683) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:32:PRO:HB3 | 4 | 0.92 |
| (1,607) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HD2 | 4 | 0.92 |
| (1,510) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 18 | 0.92 |
| (1,347) | 1:A:11:CYS:H | 1:A:10:PRO:HD3 | 7 | 0.92 |
| (1,347) | 1:A:11:CYS:H | 1:A:10:PRO:HD3 | 19 | 0.92 |
| (1,297) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 2 | 0.92 |
| (1,297) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 4 | 0.92 |
| (1,297) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 5 | 0.92 |
| (1,297) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 8 | 0.92 |
| (1,297) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 10 | 0.92 |
| (1,297) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 13 | 0.92 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,297) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 15 | 0.92 |
| (1,297) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 20 | 0.92 |
| (1,287) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:66:LEU:HB3 | 6 | 0.92 |
| (1,150) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:15:GLU:HG2 | 9 | 0.92 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ARG:HB3 | 5 | 0.92 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ARG:HB3 | 5 | 0.92 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ARG:HB3 | 5 | 0.92 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD22 | 1:A:4:SER:HB3 | 3 | 0.91 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD23 | 1:A:4:SER:HB3 | 3 | 0.91 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD21 | 1:A:4:SER:HB3 | 3 | 0.91 |
| (3,231) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:29:LEU:HG | 3 | 0.91 |
| (3,231) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:66:LEU:HG | 3 | 0.91 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD13 | 17 | 0.91 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD12 | 17 | 0.91 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD11 | 17 | 0.91 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 17 | 0.91 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 17 | 0.91 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 17 | 0.91 |
| (1,910) | 1:A:10:PRO:HG2 | 1:A:10:PRO:HA | 4 | 0.91 |
| (1,615) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:54:LYS:HG3 | 9 | 0.91 |
| (1,461) | 1:A:37:GLN:HE21 | 1:A:10:PRO:HD3 | 12 | 0.91 |
| (1,287) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:66:LEU:HB3 | 2 | 0.91 |
| (1,287) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:66:LEU:HB3 | 11 | 0.91 |
| (1,287) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:66:LEU:HB3 | 16 | 0.91 |
| (1,287) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:66:LEU:HB3 | 18 | 0.91 |
| (3,286) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:68:LYS:HD2 | 18 | 0.9 |
| (3,286) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:64:LYS:HD2 | 18 | 0.9 |
| (3,286) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:66:LEU:HB3 | 18 | 0.9 |
| (1,920) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:49:VAL:HG11 | 1 | 0.9 |
| (1,920) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:49:VAL:HG13 | 1 | 0.9 |
| (1,920) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:49:VAL:HG12 | 1 | 0.9 |
| (1,920) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:49:VAL:HG11 | 10 | 0.9 |
| (1,920) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:49:VAL:HG13 | 10 | 0.9 |
| (1,920) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:49:VAL:HG12 | 10 | 0.9 |
| (1,910) | 1:A:10:PRO:HG2 | 1:A:10:PRO:HA | 20 | 0.9 |
| (1,683) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:32:PRO:HB3 | 9 | 0.9 |
| (1,683) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:32:PRO:HB3 | 18 | 0.9 |
| (1,347) | 1:A:11:CYS:H | 1:A:10:PRO:HD3 | 18 | 0.9 |
| (1,297) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 17 | 0.9 |
| (1,291) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:64:LYS:HD2 | 6 | 0.9 |
| (1,287) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:66:LEU:HB3 | 17 | 0.9 |
| (1,287) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:66:LEU:HB3 | 19 | 0.9 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,220) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:47:ARG:HG3 | 2 | 0.9 |
| (1,1208) | 1:A:69:GLY:HA2 | 1:A:68:LYS:HB3 | 8 | 0.9 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD11 | 1 | 0.9 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD12 | 1 | 0.9 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD13 | 1 | 0.9 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD11 | 2 | 0.9 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD12 | 2 | 0.9 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD13 | 2 | 0.9 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD11 | 6 | 0.9 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD12 | 6 | 0.9 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD13 | 6 | 0.9 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD13 | 4 | 0.89 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD12 | 4 | 0.89 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD11 | 4 | 0.89 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 4 | 0.89 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 4 | 0.89 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 4 | 0.89 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD13 | 9 | 0.89 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD12 | 9 | 0.89 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD11 | 9 | 0.89 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 9 | 0.89 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 9 | 0.89 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 9 | 0.89 |
| (1,683) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:32:PRO:HB3 | 1 | 0.89 |
| (1,683) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:32:PRO:HB3 | 5 | 0.89 |
| (1,683) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:32:PRO:HB3 | 14 | 0.89 |
| (1,47) | 1:A:57:TRP:HZ3 | 1:A:20:ARG:HG3 | 4 | 0.89 |
| (1,287) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:66:LEU:HB3 | 3 | 0.89 |
| (1,287) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:66:LEU:HB3 | 4 | 0.89 |
| (1,287) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:66:LEU:HB3 | 8 | 0.89 |
| (1,149) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:14:PHE:HB2 | 13 | 0.89 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD11 | 3 | 0.89 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD12 | 3 | 0.89 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD13 | 3 | 0.89 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD11 | 4 | 0.89 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD12 | 4 | 0.89 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD13 | 4 | 0.89 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD11 | 5 | 0.89 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD12 | 5 | 0.89 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD13 | 5 | 0.89 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD11 | 9 | 0.89 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD12 | 9 | 0.89 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD13 | 9 | 0.89 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD11 | 15 | 0.89 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD12 | 15 | 0.89 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD13 | 15 | 0.89 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD11 | 16 | 0.89 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD12 | 16 | 0.89 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD13 | 16 | 0.89 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD11 | 17 | 0.89 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD12 | 17 | 0.89 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD13 | 17 | 0.89 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD11 | 20 | 0.89 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD12 | 20 | 0.89 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD13 | 20 | 0.89 |
| (1,1047) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:29:LEU:HB3 | 14 | 0.89 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HB3 | 2 | 0.88 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HB3 | 2 | 0.88 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HB3 | 2 | 0.88 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 2 | 0.88 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 2 | 0.88 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 2 | 0.88 |
| (3,144) | 1:A:50:CYS:HB2 | 1:A:11:CYS:HB2 | 15 | 0.88 |
| (3,144) | 1:A:50:CYS:HB2 | 1:A:14:PHE:HB2 | 15 | 0.88 |
| (1,867) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:12:ARG:HD2 | 5 | 0.88 |
| (1,867) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:12:ARG:HD2 | 16 | 0.88 |
| (1,786) | 1:A:30:ASN:HB2 | 1:A:29:LEU:HD13 | 2 | 0.88 |
| (1,786) | 1:A:30:ASN:HB2 | 1:A:29:LEU:HD12 | 2 | 0.88 |
| (1,786) | 1:A:30:ASN:HB2 | 1:A:29:LEU:HD11 | 2 | 0.88 |
| (1,683) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:32:PRO:HB3 | 7 | 0.88 |
| (1,297) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 18 | 0.88 |
| (1,287) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:66:LEU:HB3 | 20 | 0.88 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD11 | 7 | 0.88 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD12 | 7 | 0.88 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD13 | 7 | 0.88 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD11 | 10 | 0.88 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD12 | 10 | 0.88 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD13 | 10 | 0.88 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD11 | 13 | 0.88 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD12 | 13 | 0.88 |
| (1,1193) | 1:A:66:LEU:HB3 | 1:A:66:LEU:HD13 | 13 | 0.88 |
| (1,1028) | 1:A:38:ILE:HG12 | 1:A:37:GLN:HA | 8 | 0.88 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD13 | 2 | 0.87 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD12 | 2 | 0.87 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD11 | 2 | 0.87 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 2 | 0.87 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 2 | 0.87 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 2 | 0.87 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD13 | 18 | 0.87 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD12 | 18 | 0.87 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD11 | 18 | 0.87 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 18 | 0.87 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 18 | 0.87 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 18 | 0.87 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD13 | 19 | 0.87 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD12 | 19 | 0.87 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD11 | 19 | 0.87 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 19 | 0.87 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 19 | 0.87 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 19 | 0.87 |
| (1,860) | 1:A:53:PRO:HB3 | 1:A:62:LEU:HD11 | 10 | 0.87 |
| (1,860) | 1:A:53:PRO:HB3 | 1:A:62:LEU:HD13 | 10 | 0.87 |
| (1,860) | 1:A:53:PRO:HB3 | 1:A:62:LEU:HD12 | 10 | 0.87 |
| (1,683) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:32:PRO:HB3 | 6 | 0.87 |
| (1,683) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:32:PRO:HB3 | 15 | 0.87 |
| (1,654) | 1:A:37:GLN:HA | 1:A:37:GLN:HG3 | 1 | 0.87 |
| (1,347) | 1:A:11:CYS:H | 1:A:10:PRO:HD3 | 5 | 0.87 |
| (1,347) | 1:A:11:CYS:H | 1:A:10:PRO:HD3 | 15 | 0.87 |
| (1,289) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:66:LEU:HD11 | 8 | 0.87 |
| (1,289) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:66:LEU:HD12 | 8 | 0.87 |
| (1,289) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:66:LEU:HD13 | 8 | 0.87 |
| (1,287) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:66:LEU:HB3 | 1 | 0.87 |
| (1,287) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:66:LEU:HB3 | 14 | 0.87 |
| (1,287) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:66:LEU:HB3 | 15 | 0.87 |
| (1,223) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 1 | 0.87 |
| (1,223) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 6 | 0.87 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HB2 | 4 | 0.87 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HB2 | 4 | 0.87 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HB2 | 4 | 0.87 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG23 | 16 | 0.86 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG22 | 16 | 0.86 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG21 | 16 | 0.86 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG11 | 16 | 0.86 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG13 | 16 | 0.86 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG12 | 16 | 0.86 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD13 | 8 | 0.86 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD12 | 8 | 0.86 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD11 | 8 | 0.86 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 8 | 0.86 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 8 | 0.86 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 8 | 0.86 |
| (3,156) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HG2 | 14 | 0.86 |
| (3,156) | 1:A:43:LYS:HE2 | 1:A:43:LYS:HG3 | 14 | 0.86 |
| (1,866) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:13:PHE:HE1 | 5 | 0.86 |
| (1,866) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:13:PHE:HE2 | 5 | 0.86 |
| (1,683) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:32:PRO:HB3 | 10 | 0.86 |
| (1,683) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:32:PRO:HB3 | 11 | 0.86 |
| (1,683) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:32:PRO:HB3 | 20 | 0.86 |
| (1,575) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:24:LYS:HD2 | 15 | 0.86 |
| (1,289) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:66:LEU:HD11 | 12 | 0.86 |
| (1,289) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:66:LEU:HD12 | 12 | 0.86 |
| (1,289) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:66:LEU:HD13 | 12 | 0.86 |
| (1,200) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:22:ASN:HB3 | 5 | 0.86 |
| (1,1190) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:61:TYR:HB2 | 16 | 0.86 |
| (1,1190) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:61:TYR:HB2 | 16 | 0.86 |
| (1,1190) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:61:TYR:HB2 | 16 | 0.86 |
| (3,75) | 1:A:31:THR:H | 1:A:33:ASN:HD22 | 2 | 0.85 |
| (3,75) | 1:A:31:THR:H | 1:A:37:GLN:HE21 | 2 | 0.85 |
| (3,69) | 1:A:22:ASN:HD21 | 1:A:42:LEU:HB2 | 15 | 0.85 |
| (3,69) | 1:A:22:ASN:HD21 | 1:A:43:LYS:HD2 | 15 | 0.85 |
| (3,286) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:68:LYS:HD2 | 9 | 0.85 |
| (3,286) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:64:LYS:HD2 | 9 | 0.85 |
| (3,286) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:66:LEU:HB3 | 9 | 0.85 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HB3 | 20 | 0.85 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HB3 | 20 | 0.85 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HB3 | 20 | 0.85 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 20 | 0.85 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 20 | 0.85 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 20 | 0.85 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD13 | 20 | 0.85 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD12 | 20 | 0.85 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD11 | 20 | 0.85 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 20 | 0.85 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 20 | 0.85 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 20 | 0.85 |
| (1,712) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:37:GLN:HG3 | 5 | 0.85 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG11 | 18 | 0.85 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG13 | 18 | 0.85 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG12 | 18 | 0.85 |
| (1,675) | 1:A:22:ASN:HA | 1:A:43:LYS:HD2 | 9 | 0.85 |
| (1,47) | 1:A:57:TRP:HZ3 | 1:A:20:ARG:HG3 | 14 | 0.85 |
| (1,287) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:66:LEU:HB3 | 13 | 0.85 |
| (1,223) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 5 | 0.85 |
| (1,223) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 7 | 0.85 |
| (1,223) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 16 | 0.85 |
| (1,754) | 1:A:54:LYS:HE3 | 1:A:54:LYS:HG3 | 9 | 0.84 |
| (1,712) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:37:GLN:HG3 | 18 | 0.84 |
| (1,684) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:10:PRO:HD3 | 3 | 0.84 |
| (1,571) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HB3 | 3 | 0.84 |
| (1,571) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HB3 | 13 | 0.84 |
| (1,233) | 1:A:14:PHE:H | 1:A:13:PHE:HB3 | 9 | 0.84 |
| (1,158) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HD22 | 8 | 0.84 |
| (1,158) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HD23 | 8 | 0.84 |
| (1,158) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HD21 | 8 | 0.84 |
| (1,158) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HD22 | 15 | 0.84 |
| (1,158) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HD23 | 15 | 0.84 |
| (1,158) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HD21 | 15 | 0.84 |
| (1,12) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:LEU:HB3 | 15 | 0.84 |
| (1,12) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:LEU:HB3 | 18 | 0.84 |
| (1,1190) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:61:TYR:HB2 | 6 | 0.84 |
| (1,1190) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:61:TYR:HB2 | 6 | 0.84 |
| (1,1190) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:61:TYR:HB2 | 6 | 0.84 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HB3 | 5 | 0.83 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HB3 | 5 | 0.83 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HB3 | 5 | 0.83 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 5 | 0.83 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 5 | 0.83 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 5 | 0.83 |
| (3,143) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:11:CYS:HB2 | 14 | 0.83 |
| (3,143) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:14:PHE:HB2 | 14 | 0.83 |
| (1,615) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:54:LYS:HG3 | 13 | 0.83 |
| (1,571) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HB3 | 10 | 0.83 |
| (1,519) | 1:A:52:ASP:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 20 | 0.83 |
| (1,358) | 1:A:11:CYS:H | 1:A:9:CYS:HB2 | 8 | 0.83 |
| (1,223) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 3 | 0.83 |
| (1,223) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 4 | 0.83 |
| (1,223) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 8 | 0.83 |
| (1,223) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 19 | 0.83 |
| (1,149) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:14:PHE:HB2 | 12 | 0.83 |
| (1,12) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:LEU:HB3 | 10 | 0.83 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ARG:HB3 | 18 | 0.83 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ARG:HB3 | 18 | 0.83 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ARG:HB3 | 18 | 0.83 |
| (3,75) | 1:A:31:THR:H | 1:A:33:ASN:HD22 | 17 | 0.82 |
| (3,75) | 1:A:31:THR:H | 1:A:37:GLN:HE21 | 17 | 0.82 |
| (3,69) | 1:A:22:ASN:HD21 | 1:A:42:LEU:HB2 | 9 | 0.82 |
| (3,69) | 1:A:22:ASN:HD21 | 1:A:43:LYS:HD2 | 9 | 0.82 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:28:ILE:HG12 | 13 | 0.82 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:28:ILE:HG12 | 13 | 0.82 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:28:ILE:HG12 | 13 | 0.82 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:53:PRO:HG2 | 13 | 0.82 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:53:PRO:HG2 | 13 | 0.82 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:53:PRO:HG2 | 13 | 0.82 |
| (3,156) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HG2 | 7 | 0.82 |
| (3,156) | 1:A:43:LYS:HE2 | 1:A:43:LYS:HG3 | 7 | 0.82 |
| (1,76) | 1:A:5:LEU:H | 1:A:5:LEU:HB3 | 20 | 0.82 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG11 | 8 | 0.82 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG13 | 8 | 0.82 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG12 | 8 | 0.82 |
| (1,519) | 1:A:52:ASP:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 8 | 0.82 |
| (1,223) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 2 | 0.82 |
| (1,223) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 10 | 0.82 |
| (1,223) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 12 | 0.82 |
| (1,12) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:LEU:HB3 | 17 | 0.82 |
| (1,1045) | 1:A:27:LYS:HB3 | 1:A:39:VAL:HG12 | 2 | 0.82 |
| (1,1045) | 1:A:27:LYS:HB3 | 1:A:39:VAL:HG11 | 2 | 0.82 |
| (1,1045) | 1:A:27:LYS:HB3 | 1:A:39:VAL:HG13 | 2 | 0.82 |
| (3,75) | 1:A:31:THR:H | 1:A:33:ASN:HD22 | 15 | 0.81 |
| (3,75) | 1:A:31:THR:H | 1:A:37:GLN:HE21 | 15 | 0.81 |
| (3,156) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HG2 | 20 | 0.81 |
| (3,156) | 1:A:43:LYS:HE2 | 1:A:43:LYS:HG3 | 20 | 0.81 |
| (3,144) | 1:A:50:CYS:HB2 | 1:A:11:CYS:HB2 | 5 | 0.81 |
| (3,144) | 1:A:50:CYS:HB2 | 1:A:14:PHE:HB2 | 5 | 0.81 |
| (1,76) | 1:A:5:LEU:H | 1:A:5:LEU:HB3 | 10 | 0.81 |
| (1,76) | 1:A:5:LEU:H | 1:A:5:LEU:HB3 | 18 | 0.81 |
| (1,719) | 1:A:47:ARG:HD2 | 1:A:47:ARG:HB3 | 10 | 0.81 |
| (1,47) | 1:A:57:TRP:HZ3 | 1:A:20:ARG:HG3 | 11 | 0.81 |
| (1,47) | 1:A:57:TRP:HZ3 | 1:A:20:ARG:HG3 | 17 | 0.81 |
| (1,287) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:66:LEU:HB3 | 10 | 0.81 |
| (1,223) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 9 | 0.81 |
| (1,223) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 13 | 0.81 |
| (1,12) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:LEU:HB3 | 14 | 0.81 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1028) | 1:A:38:ILE:HG12 | 1:A:37:GLN:HA | 9 | 0.81 |
| (1,1028) | 1:A:38:ILE:HG12 | 1:A:37:GLN:HA | 13 | 0.81 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG23 | 15 | 0.8 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG22 | 15 | 0.8 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG21 | 15 | 0.8 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG11 | 15 | 0.8 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG13 | 15 | 0.8 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG12 | 15 | 0.8 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG23 | 20 | 0.8 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG22 | 20 | 0.8 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG21 | 20 | 0.8 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG11 | 20 | 0.8 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG13 | 20 | 0.8 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG12 | 20 | 0.8 |
| (3,260) | 1:A:54:LYS:HB2 | 1:A:54:LYS:HE3 | 9 | 0.8 |
| (3,260) | 1:A:54:LYS:HB3 | 1:A:54:LYS:HE3 | 9 | 0.8 |
| (3,260) | 1:A:54:LYS:HB2 | 1:A:54:LYS:HE3 | 18 | 0.8 |
| (3,260) | 1:A:54:LYS:HB3 | 1:A:54:LYS:HE3 | 18 | 0.8 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD22 | 13 | 0.8 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD23 | 13 | 0.8 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD21 | 13 | 0.8 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD22 | 13 | 0.8 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD23 | 13 | 0.8 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD21 | 13 | 0.8 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD22 | 13 | 0.8 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD23 | 13 | 0.8 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD21 | 13 | 0.8 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 13 | 0.8 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 13 | 0.8 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 13 | 0.8 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:66:LEU:HD11 | 13 | 0.8 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:66:LEU:HD12 | 13 | 0.8 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:66:LEU:HD13 | 13 | 0.8 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:66:LEU:HD11 | 13 | 0.8 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:66:LEU:HD12 | 13 | 0.8 |
| (3,236) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:66:LEU:HD13 | 13 | 0.8 |
| (1,922) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:49:VAL:HG11 | 4 | 0.8 |
| (1,922) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:49:VAL:HG13 | 4 | 0.8 |
| (1,922) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:49:VAL:HG12 | 4 | 0.8 |
| (1,754) | 1:A:54:LYS:HE3 | 1:A:54:LYS:HG3 | 4 | 0.8 |
| (1,754) | 1:A:54:LYS:HE3 | 1:A:54:LYS:HG3 | 13 | 0.8 |
| (1,754) | 1:A:54:LYS:HE3 | 1:A:54:LYS:HG3 | 20 | 0.8 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,339) | 1:A:45:ASN:H | 1:A:44:ASN:HD22 | 5 | 0.8 |
| (1,287) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:66:LEU:HB3 | 7 | 0.8 |
| (1,223) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 20 | 0.8 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:53:PRO:HB2 | 14 | 0.8 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:53:PRO:HB2 | 14 | 0.8 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:53:PRO:HB2 | 14 | 0.8 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG23 | 2 | 0.79 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG22 | 2 | 0.79 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG21 | 2 | 0.79 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG11 | 2 | 0.79 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG13 | 2 | 0.79 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG12 | 2 | 0.79 |
| (1,910) | 1:A:10:PRO:HG2 | 1:A:10:PRO:HA | 15 | 0.79 |
| (1,866) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:13:PHE:HE1 | 10 | 0.79 |
| (1,866) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:13:PHE:HE2 | 10 | 0.79 |
| (1,654) | 1:A:37:GLN:HA | 1:A:37:GLN:HG3 | 19 | 0.79 |
| (1,296) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:63:GLU:HB3 | 10 | 0.79 |
| (1,223) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 11 | 0.79 |
| (1,223) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 17 | 0.79 |
| (1,155) | 1:A:65:ALA:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 1 | 0.79 |
| (1,155) | 1:A:65:ALA:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 3 | 0.79 |
| (1,1204) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:28:ILE:HG12 | 13 | 0.79 |
| (1,1204) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:28:ILE:HG12 | 13 | 0.79 |
| (1,1204) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:28:ILE:HG12 | 13 | 0.79 |
| (1,12) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:LEU:HB3 | 12 | 0.79 |
| (3,69) | 1:A:22:ASN:HD21 | 1:A:42:LEU:HB2 | 14 | 0.78 |
| (3,69) | 1:A:22:ASN:HD21 | 1:A:43:LYS:HD2 | 14 | 0.78 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:28:ILE:HG12 | 12 | 0.78 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:28:ILE:HG12 | 12 | 0.78 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:28:ILE:HG12 | 12 | 0.78 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:53:PRO:HG2 | 12 | 0.78 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:53:PRO:HG2 | 12 | 0.78 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:53:PRO:HG2 | 12 | 0.78 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:28:ILE:HG12 | 14 | 0.78 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:28:ILE:HG12 | 14 | 0.78 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:28:ILE:HG12 | 14 | 0.78 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:53:PRO:HG2 | 14 | 0.78 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:53:PRO:HG2 | 14 | 0.78 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:53:PRO:HG2 | 14 | 0.78 |
| (1,455) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:29:LEU:HB2 | 17 | 0.78 |
| (1,339) | 1:A:45:ASN:H | 1:A:44:ASN:HD22 | 2 | 0.78 |
| (1,296) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:63:GLU:HB3 | 6 | 0.78 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,223) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 14 | 0.78 |
| (1,223) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 15 | 0.78 |
| (1,223) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 18 | 0.78 |
| (1,158) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HD22 | 13 | 0.78 |
| (1,158) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HD23 | 13 | 0.78 |
| (1,158) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HD21 | 13 | 0.78 |
| (1,12) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:LEU:HB3 | 11 | 0.78 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG23 | 1 | 0.77 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG22 | 1 | 0.77 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG21 | 1 | 0.77 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG11 | 1 | 0.77 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG13 | 1 | 0.77 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG12 | 1 | 0.77 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG23 | 11 | 0.77 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG22 | 11 | 0.77 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG21 | 11 | 0.77 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG11 | 11 | 0.77 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG13 | 11 | 0.77 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG12 | 11 | 0.77 |
| (3,144) | 1:A:50:CYS:HB2 | 1:A:11:CYS:HB2 | 8 | 0.77 |
| (3,144) | 1:A:50:CYS:HB2 | 1:A:14:PHE:HB2 | 8 | 0.77 |
| (3,115) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HD11 | 18 | 0.77 |
| (3,115) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HD12 | 18 | 0.77 |
| (3,115) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HD13 | 18 | 0.77 |
| (3,115) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HG | 18 | 0.77 |
| (1,910) | 1:A:10:PRO:HG2 | 1:A:10:PRO:HA | 17 | 0.77 |
| (1,910) | 1:A:10:PRO:HG2 | 1:A:10:PRO:HA | 18 | 0.77 |
| (1,866) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:13:PHE:HE1 | 8 | 0.77 |
| (1,866) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:13:PHE:HE2 | 8 | 0.77 |
| (1,847) | 1:A:53:PRO:HB3 | 1:A:54:LYS:H | 6 | 0.77 |
| (1,847) | 1:A:53:PRO:HB3 | 1:A:54:LYS:H | 7 | 0.77 |
| (1,754) | 1:A:54:LYS:HE3 | 1:A:54:LYS:HG3 | 15 | 0.77 |
| (1,654) | 1:A:37:GLN:HA | 1:A:37:GLN:HG3 | 9 | 0.77 |
| (1,654) | 1:A:37:GLN:HA | 1:A:37:GLN:HG3 | 10 | 0.77 |
| (1,567) | 1:A:60:GLU:HA | 1:A:60:GLU:HG3 | 15 | 0.77 |
| (1,519) | 1:A:52:ASP:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 16 | 0.77 |
| (1,455) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:29:LEU:HB2 | 14 | 0.77 |
| (1,291) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:64:LYS:HD2 | 1 | 0.77 |
| (1,278) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:67:ASN:HB2 | 6 | 0.77 |
| (1,220) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:47:ARG:HG3 | 4 | 0.77 |
| (1,218) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:42:LEU:HB3 | 1 | 0.77 |
| (1,155) | 1:A:65:ALA:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 10 | 0.77 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1028) | 1:A:38:ILE:HG12 | 1:A:37:GLN:HA | 18 | 0.77 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:24:LYS:HB3 | 12 | 0.76 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:24:LYS:HD2 | 12 | 0.76 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:41:ARG:HB2 | 12 | 0.76 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG23 | 3 | 0.76 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG22 | 3 | 0.76 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG21 | 3 | 0.76 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG11 | 3 | 0.76 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG13 | 3 | 0.76 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG12 | 3 | 0.76 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:28:ILE:HG12 | 4 | 0.76 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:28:ILE:HG12 | 4 | 0.76 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:28:ILE:HG12 | 4 | 0.76 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:53:PRO:HG2 | 4 | 0.76 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:53:PRO:HG2 | 4 | 0.76 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:53:PRO:HG2 | 4 | 0.76 |
| (3,143) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:11:CYS:HB2 | 3 | 0.76 |
| (3,143) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:14:PHE:HB2 | 3 | 0.76 |
| (1,910) | 1:A:10:PRO:HG2 | 1:A:10:PRO:HA | 2 | 0.76 |
| (1,910) | 1:A:10:PRO:HG2 | 1:A:10:PRO:HA | 5 | 0.76 |
| (1,910) | 1:A:10:PRO:HG2 | 1:A:10:PRO:HA | 7 | 0.76 |
| (1,847) | 1:A:53:PRO:HB3 | 1:A:54:LYS:H | 10 | 0.76 |
| (1,847) | 1:A:53:PRO:HB3 | 1:A:54:LYS:H | 16 | 0.76 |
| (1,847) | 1:A:53:PRO:HB3 | 1:A:54:LYS:H | 19 | 0.76 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG11 | 13 | 0.76 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG13 | 13 | 0.76 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG12 | 13 | 0.76 |
| (1,693) | 1:A:53:PRO:HD2 | 1:A:53:PRO:HB2 | 18 | 0.76 |
| (1,684) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:10:PRO:HD3 | 2 | 0.76 |
| (1,654) | 1:A:37:GLN:HA | 1:A:37:GLN:HG3 | 5 | 0.76 |
| (1,654) | 1:A:37:GLN:HA | 1:A:37:GLN:HG3 | 8 | 0.76 |
| (1,654) | 1:A:37:GLN:HA | 1:A:37:GLN:HG3 | 20 | 0.76 |
| (1,627) | 1:A:48:GLN:HA | 1:A:41:ARG:HG2 | 2 | 0.76 |
| (1,567) | 1:A:60:GLU:HA | 1:A:60:GLU:HG3 | 16 | 0.76 |
| (1,333) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:54:LYS:HG3 | 6 | 0.76 |
| (1,296) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:63:GLU:HB3 | 3 | 0.76 |
| (1,233) | 1:A:14:PHE:H | 1:A:13:PHE:HB3 | 19 | 0.76 |
| (1,218) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:42:LEU:HB3 | 18 | 0.76 |
| (1,149) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:14:PHE:HB2 | 6 | 0.76 |
| (1,1028) | 1:A:38:ILE:HG12 | 1:A:37:GLN:HA | 14 | 0.76 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD22 | 1:A:4:SER:HB3 | 2 | 0.75 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD23 | 1:A:4:SER:HB3 | 2 | 0.75 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD21 | 1:A:4:SER:HB3 | 2 | 0.75 |
| (3,231) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:29:LEU:HG | 2 | 0.75 |
| (3,231) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:66:LEU:HG | 2 | 0.75 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD13 | 15 | 0.75 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD12 | 15 | 0.75 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:28:ILE:HD11 | 15 | 0.75 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 15 | 0.75 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 15 | 0.75 |
| (3,168) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 15 | 0.75 |
| (3,144) | 1:A:50:CYS:HB2 | 1:A:11:CYS:HB2 | 7 | 0.75 |
| (3,144) | 1:A:50:CYS:HB2 | 1:A:14:PHE:HB2 | 7 | 0.75 |
| (3,115) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HD11 | 12 | 0.75 |
| (3,115) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HD12 | 12 | 0.75 |
| (3,115) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HD13 | 12 | 0.75 |
| (3,115) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HG | 12 | 0.75 |
| (1,910) | 1:A:10:PRO:HG2 | 1:A:10:PRO:HA | 1 | 0.75 |
| (1,910) | 1:A:10:PRO:HG2 | 1:A:10:PRO:HA | 3 | 0.75 |
| (1,910) | 1:A:10:PRO:HG2 | 1:A:10:PRO:HA | 14 | 0.75 |
| (1,847) | 1:A:53:PRO:HB3 | 1:A:54:LYS:H | 1 | 0.75 |
| (1,847) | 1:A:53:PRO:HB3 | 1:A:54:LYS:H | 3 | 0.75 |
| (1,847) | 1:A:53:PRO:HB3 | 1:A:54:LYS:H | 17 | 0.75 |
| (1,693) | 1:A:53:PRO:HD2 | 1:A:53:PRO:HB2 | 1 | 0.75 |
| (1,693) | 1:A:53:PRO:HD2 | 1:A:53:PRO:HB2 | 2 | 0.75 |
| (1,693) | 1:A:53:PRO:HD2 | 1:A:53:PRO:HB2 | 3 | 0.75 |
| (1,693) | 1:A:53:PRO:HD2 | 1:A:53:PRO:HB2 | 5 | 0.75 |
| (1,693) | 1:A:53:PRO:HD2 | 1:A:53:PRO:HB2 | 8 | 0.75 |
| (1,693) | 1:A:53:PRO:HD2 | 1:A:53:PRO:HB2 | 9 | 0.75 |
| (1,693) | 1:A:53:PRO:HD2 | 1:A:53:PRO:HB2 | 10 | 0.75 |
| (1,693) | 1:A:53:PRO:HD2 | 1:A:53:PRO:HB2 | 11 | 0.75 |
| (1,693) | 1:A:53:PRO:HD2 | 1:A:53:PRO:HB2 | 12 | 0.75 |
| (1,693) | 1:A:53:PRO:HD2 | 1:A:53:PRO:HB2 | 13 | 0.75 |
| (1,693) | 1:A:53:PRO:HD2 | 1:A:53:PRO:HB2 | 17 | 0.75 |
| (1,693) | 1:A:53:PRO:HD2 | 1:A:53:PRO:HB2 | 19 | 0.75 |
| (1,654) | 1:A:37:GLN:HA | 1:A:37:GLN:HG3 | 3 | 0.75 |
| (1,571) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HB3 | 4 | 0.75 |
| (1,567) | 1:A:60:GLU:HA | 1:A:60:GLU:HG3 | 6 | 0.75 |
| (1,465) | 1:A:37:GLN:HE21 | 1:A:29:LEU:HB2 | 7 | 0.75 |
| (1,391) | 1:A:22:ASN:H | 1:A:43:LYS:HD2 | 17 | 0.75 |
| (1,358) | 1:A:11:CYS:H | 1:A:9:CYS:HB2 | 9 | 0.75 |
| (1,218) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:42:LEU:HB3 | 17 | 0.75 |
| (1,158) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HD22 | 19 | 0.75 |
| (1,158) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HD23 | 19 | 0.75 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,158) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HD21 | 19 | 0.75 |
| (1,1047) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:29:LEU:HB3 | 9 | 0.75 |
| (3,17) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:20:ARG:HD3 | 16 | 0.74 |
| (3,17) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:22:ASN:HB2 | 16 | 0.74 |
| (3,144) | 1:A:50:CYS:HB2 | 1:A:11:CYS:HB2 | 20 | 0.74 |
| (3,144) | 1:A:50:CYS:HB2 | 1:A:14:PHE:HB2 | 20 | 0.74 |
| (3,115) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HD11 | 19 | 0.74 |
| (3,115) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HD12 | 19 | 0.74 |
| (3,115) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HD13 | 19 | 0.74 |
| (3,115) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HG | 19 | 0.74 |
| (1,910) | 1:A:10:PRO:HG2 | 1:A:10:PRO:HA | 6 | 0.74 |
| (1,910) | 1:A:10:PRO:HG2 | 1:A:10:PRO:HA | 8 | 0.74 |
| (1,910) | 1:A:10:PRO:HG2 | 1:A:10:PRO:HA | 12 | 0.74 |
| (1,910) | 1:A:10:PRO:HG2 | 1:A:10:PRO:HA | 19 | 0.74 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 10 | 0.74 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 10 | 0.74 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 10 | 0.74 |
| (1,754) | 1:A:54:LYS:HE3 | 1:A:54:LYS:HG3 | 1 | 0.74 |
| (1,754) | 1:A:54:LYS:HE3 | 1:A:54:LYS:HG3 | 12 | 0.74 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG11 | 6 | 0.74 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG13 | 6 | 0.74 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG12 | 6 | 0.74 |
| (1,693) | 1:A:53:PRO:HD2 | 1:A:53:PRO:HB2 | 6 | 0.74 |
| (1,693) | 1:A:53:PRO:HD2 | 1:A:53:PRO:HB2 | 7 | 0.74 |
| (1,693) | 1:A:53:PRO:HD2 | 1:A:53:PRO:HB2 | 14 | 0.74 |
| (1,693) | 1:A:53:PRO:HD2 | 1:A:53:PRO:HB2 | 16 | 0.74 |
| (1,567) | 1:A:60:GLU:HA | 1:A:60:GLU:HG3 | 19 | 0.74 |
| (1,461) | 1:A:37:GLN:HE21 | 1:A:10:PRO:HD3 | 2 | 0.74 |
| (1,218) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:42:LEU:HB3 | 13 | 0.74 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:53:PRO:HB2 | 4 | 0.74 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:53:PRO:HB2 | 4 | 0.74 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:53:PRO:HB2 | 4 | 0.74 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:28:ILE:HG12 | 15 | 0.73 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:28:ILE:HG12 | 15 | 0.73 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:28:ILE:HG12 | 15 | 0.73 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:53:PRO:HG2 | 15 | 0.73 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:53:PRO:HG2 | 15 | 0.73 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:53:PRO:HG2 | 15 | 0.73 |
| (3,156) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HG2 | 9 | 0.73 |
| (3,156) | 1:A:43:LYS:HE2 | 1:A:43:LYS:HG3 | 9 | 0.73 |
| (3,144) | 1:A:50:CYS:HB2 | 1:A:11:CYS:HB2 | 10 | 0.73 |
| (3,144) | 1:A:50:CYS:HB2 | 1:A:14:PHE:HB2 | 10 | 0.73 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,910) | 1:A:10:PRO:HG2 | 1:A:10:PRO:HA | 9 | 0.73 |
| (1,910) | 1:A:10:PRO:HG2 | 1:A:10:PRO:HA | 10 | 0.73 |
| (1,910) | 1:A:10:PRO:HG2 | 1:A:10:PRO:HA | 16 | 0.73 |
| (1,847) | 1:A:53:PRO:HB3 | 1:A:54:LYS:H | 9 | 0.73 |
| (1,847) | 1:A:53:PRO:HB3 | 1:A:54:LYS:H | 11 | 0.73 |
| (1,847) | 1:A:53:PRO:HB3 | 1:A:54:LYS:H | 14 | 0.73 |
| (1,847) | 1:A:53:PRO:HB3 | 1:A:54:LYS:H | 15 | 0.73 |
| (1,754) | 1:A:54:LYS:HE3 | 1:A:54:LYS:HG3 | 18 | 0.73 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG11 | 9 | 0.73 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG13 | 9 | 0.73 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG12 | 9 | 0.73 |
| (1,693) | 1:A:53:PRO:HD2 | 1:A:53:PRO:HB2 | 4 | 0.73 |
| (1,693) | 1:A:53:PRO:HD2 | 1:A:53:PRO:HB2 | 15 | 0.73 |
| (1,654) | 1:A:37:GLN:HA | 1:A:37:GLN:HG3 | 13 | 0.73 |
| (1,597) | 1:A:64:LYS:HA | 1:A:64:LYS:HG3 | 10 | 0.73 |
| (1,567) | 1:A:60:GLU:HA | 1:A:60:GLU:HG3 | 2 | 0.73 |
| (1,567) | 1:A:60:GLU:HA | 1:A:60:GLU:HG3 | 8 | 0.73 |
| (1,567) | 1:A:60:GLU:HA | 1:A:60:GLU:HG3 | 11 | 0.73 |
| (1,567) | 1:A:60:GLU:HA | 1:A:60:GLU:HG3 | 12 | 0.73 |
| (1,465) | 1:A:37:GLN:HE21 | 1:A:29:LEU:HB2 | 6 | 0.73 |
| (1,333) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:54:LYS:HG3 | 15 | 0.73 |
| (1,291) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:64:LYS:HD2 | 3 | 0.73 |
| (1,269) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:60:GLU:HG3 | 20 | 0.73 |
| (1,233) | 1:A:14:PHE:H | 1:A:13:PHE:HB3 | 8 | 0.73 |
| (1,220) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:47:ARG:HG3 | 11 | 0.73 |
| (1,218) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:42:LEU:HB3 | 11 | 0.73 |
| (1,12) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:LEU:HB3 | 4 | 0.73 |
| (1,12) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:LEU:HB3 | 9 | 0.73 |
| (3,217) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HA | 17 | 0.72 |
| (3,217) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:24:LYS:HE2 | 17 | 0.72 |
| (3,217) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:43:LYS:HE2 | 17 | 0.72 |
| (3,156) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HG2 | 17 | 0.72 |
| (3,156) | 1:A:43:LYS:HE2 | 1:A:43:LYS:HG3 | 17 | 0.72 |
| (3,144) | 1:A:50:CYS:HB2 | 1:A:11:CYS:HB2 | 19 | 0.72 |
| (3,144) | 1:A:50:CYS:HB2 | 1:A:14:PHE:HB2 | 19 | 0.72 |
| (1,974) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:57:TRP:HH2 | 10 | 0.72 |
| (1,974) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:57:TRP:HH2 | 10 | 0.72 |
| (1,974) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:57:TRP:HH2 | 10 | 0.72 |
| (1,910) | 1:A:10:PRO:HG2 | 1:A:10:PRO:HA | 13 | 0.72 |
| (1,847) | 1:A:53:PRO:HB3 | 1:A:54:LYS:H | 8 | 0.72 |
| (1,847) | 1:A:53:PRO:HB3 | 1:A:54:LYS:H | 12 | 0.72 |
| (1,847) | 1:A:53:PRO:HB3 | 1:A:54:LYS:H | 18 | 0.72 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,847) | 1:A:53:PRO:HB3 | 1:A:54:LYS:H | 20 | 0.72 |
| (1,754) | 1:A:54:LYS:HE3 | 1:A:54:LYS:HG3 | 7 | 0.72 |
| (1,719) | 1:A:47:ARG:HD2 | 1:A:47:ARG:HB3 | 19 | 0.72 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG11 | 19 | 0.72 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG13 | 19 | 0.72 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG12 | 19 | 0.72 |
| (1,693) | 1:A:53:PRO:HD2 | 1:A:53:PRO:HB2 | 20 | 0.72 |
| (1,654) | 1:A:37:GLN:HA | 1:A:37:GLN:HG3 | 16 | 0.72 |
| (1,567) | 1:A:60:GLU:HA | 1:A:60:GLU:HG3 | 13 | 0.72 |
| (1,218) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:42:LEU:HB3 | 16 | 0.72 |
| (1,158) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HD22 | 16 | 0.72 |
| (1,158) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HD23 | 16 | 0.72 |
| (1,158) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HD21 | 16 | 0.72 |
| (1,12) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:LEU:HB3 | 8 | 0.72 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ARG:HB3 | 13 | 0.72 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ARG:HB3 | 13 | 0.72 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ARG:HB3 | 13 | 0.72 |
| (3,282) | 1:A:65:ALA:HA | 1:A:28:ILE:HG12 | 9 | 0.71 |
| (3,282) | 1:A:65:ALA:HA | 1:A:66:LEU:HB3 | 9 | 0.71 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:28:ILE:HG12 | 18 | 0.71 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:28:ILE:HG12 | 18 | 0.71 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:28:ILE:HG12 | 18 | 0.71 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:53:PRO:HG2 | 18 | 0.71 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:53:PRO:HG2 | 18 | 0.71 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:53:PRO:HG2 | 18 | 0.71 |
| (1,866) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:13:PHE:HE1 | 19 | 0.71 |
| (1,866) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:13:PHE:HE2 | 19 | 0.71 |
| (1,855) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 11 | 0.71 |
| (1,855) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 11 | 0.71 |
| (1,855) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 11 | 0.71 |
| (1,847) | 1:A:53:PRO:HB3 | 1:A:54:LYS:H | 2 | 0.71 |
| (1,718) | 1:A:47:ARG:HD3 | 1:A:47:ARG:HG3 | 1 | 0.71 |
| (1,718) | 1:A:47:ARG:HD3 | 1:A:47:ARG:HG3 | 5 | 0.71 |
| (1,718) | 1:A:47:ARG:HD3 | 1:A:47:ARG:HG3 | 13 | 0.71 |
| (1,718) | 1:A:47:ARG:HD3 | 1:A:47:ARG:HG3 | 18 | 0.71 |
| (1,718) | 1:A:47:ARG:HD3 | 1:A:47:ARG:HG3 | 19 | 0.71 |
| (1,654) | 1:A:37:GLN:HA | 1:A:37:GLN:HG3 | 4 | 0.71 |
| (1,567) | 1:A:60:GLU:HA | 1:A:60:GLU:HG3 | 5 | 0.71 |
| (1,455) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:29:LEU:HB2 | 3 | 0.71 |
| (1,413) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:25:HIS:HB2 | 14 | 0.71 |
| (1,269) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:60:GLU:HG3 | 7 | 0.71 |
| (1,1208) | 1:A:69:GLY:HA2 | 1:A:68:LYS:HB3 | 20 | 0.71 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,12) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:LEU:HB3 | 19 | 0.71 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:53:PRO:HB2 | 18 | 0.71 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:53:PRO:HB2 | 18 | 0.71 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:53:PRO:HB2 | 18 | 0.71 |
| (1,1028) | 1:A:38:ILE:HG12 | 1:A:37:GLN:HA | 15 | 0.71 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:24:LYS:HB3 | 10 | 0.7 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:24:LYS:HD2 | 10 | 0.7 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:41:ARG:HB2 | 10 | 0.7 |
| (3,73) | 1:A:29:LEU:H | 1:A:28:ILE:HG13 | 13 | 0.7 |
| (3,73) | 1:A:29:LEU:H | 1:A:38:ILE:HG12 | 13 | 0.7 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG23 | 17 | 0.7 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG22 | 17 | 0.7 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG21 | 17 | 0.7 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG11 | 17 | 0.7 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG13 | 17 | 0.7 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG12 | 17 | 0.7 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD11 | 18 | 0.7 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD12 | 18 | 0.7 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD13 | 18 | 0.7 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HG | 18 | 0.7 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:28:ILE:HG12 | 2 | 0.7 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:28:ILE:HG12 | 2 | 0.7 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:28:ILE:HG12 | 2 | 0.7 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:53:PRO:HG2 | 2 | 0.7 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:53:PRO:HG2 | 2 | 0.7 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:53:PRO:HG2 | 2 | 0.7 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:28:ILE:HG12 | 9 | 0.7 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:28:ILE:HG12 | 9 | 0.7 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:28:ILE:HG12 | 9 | 0.7 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:53:PRO:HG2 | 9 | 0.7 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:53:PRO:HG2 | 9 | 0.7 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:53:PRO:HG2 | 9 | 0.7 |
| (3,156) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HG2 | 15 | 0.7 |
| (3,156) | 1:A:43:LYS:HE2 | 1:A:43:LYS:HG3 | 15 | 0.7 |
| (1,910) | 1:A:10:PRO:HG2 | 1:A:10:PRO:HA | 11 | 0.7 |
| (1,869) | 1:A:8:ARG:HB3 | 1:A:8:ARG:HD3 | 12 | 0.7 |
| (1,869) | 1:A:8:ARG:HB3 | 1:A:8:ARG:HD3 | 18 | 0.7 |
| (1,847) | 1:A:53:PRO:HB3 | 1:A:54:LYS:H | 4 | 0.7 |
| (1,847) | 1:A:53:PRO:HB3 | 1:A:54:LYS:H | 5 | 0.7 |
| (1,847) | 1:A:53:PRO:HB3 | 1:A:54:LYS:H | 13 | 0.7 |
| (1,753) | 1:A:54:LYS:HE3 | 1:A:54:LYS:HD2 | 13 | 0.7 |
| (1,597) | 1:A:64:LYS:HA | 1:A:64:LYS:HG3 | 1 | 0.7 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,567) | 1:A:60:GLU:HA | 1:A:60:GLU:HG3 | 3 | 0.7 |
| (1,296) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:63:GLU:HB3 | 16 | 0.7 |
| (1,296) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:63:GLU:HB3 | 18 | 0.7 |
| (1,269) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:60:GLU:HG3 | 1 | 0.7 |
| (1,155) | 1:A:65:ALA:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 15 | 0.7 |
| (1,155) | 1:A:65:ALA:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 20 | 0.7 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HB2 | 17 | 0.7 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HB2 | 17 | 0.7 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HB2 | 17 | 0.7 |
| (1,1049) | 1:A:40:ALA:HA | 1:A:26:LEU:HD12 | 16 | 0.7 |
| (1,1049) | 1:A:40:ALA:HA | 1:A:26:LEU:HD11 | 16 | 0.7 |
| (1,1049) | 1:A:40:ALA:HA | 1:A:26:LEU:HD13 | 16 | 0.7 |
| (1,1001) | 1:A:32:PRO:HG3 | 1:A:32:PRO:HA | 19 | 0.7 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD11 | 14 | 0.69 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD12 | 14 | 0.69 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD13 | 14 | 0.69 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HG | 14 | 0.69 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HB3 | 17 | 0.69 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HB3 | 17 | 0.69 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HB3 | 17 | 0.69 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 17 | 0.69 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 17 | 0.69 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 17 | 0.69 |
| (1,869) | 1:A:8:ARG:HB3 | 1:A:8:ARG:HD3 | 20 | 0.69 |
| (1,753) | 1:A:54:LYS:HE3 | 1:A:54:LYS:HD2 | 15 | 0.69 |
| (1,753) | 1:A:54:LYS:HE3 | 1:A:54:LYS:HD2 | 20 | 0.69 |
| (1,718) | 1:A:47:ARG:HD3 | 1:A:47:ARG:HG3 | 10 | 0.69 |
| (1,567) | 1:A:60:GLU:HA | 1:A:60:GLU:HG3 | 9 | 0.69 |
| (1,567) | 1:A:60:GLU:HA | 1:A:60:GLU:HG3 | 18 | 0.69 |
| (1,519) | 1:A:52:ASP:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 2 | 0.69 |
| (1,391) | 1:A:22:ASN:H | 1:A:43:LYS:HD2 | 9 | 0.69 |
| (1,339) | 1:A:45:ASN:H | 1:A:44:ASN:HD22 | 11 | 0.69 |
| (1,218) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:42:LEU:HB3 | 20 | 0.69 |
| (1,155) | 1:A:65:ALA:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 7 | 0.69 |
| (1,155) | 1:A:65:ALA:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 16 | 0.69 |
| (1,1049) | 1:A:40:ALA:HA | 1:A:26:LEU:HD12 | 6 | 0.69 |
| (1,1049) | 1:A:40:ALA:HA | 1:A:26:LEU:HD11 | 6 | 0.69 |
| (1,1049) | 1:A:40:ALA:HA | 1:A:26:LEU:HD13 | 6 | 0.69 |
| (1,1047) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:29:LEU:HB3 | 17 | 0.69 |
| (1,1028) | 1:A:38:ILE:HG12 | 1:A:37:GLN:HA | 2 | 0.69 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG23 | 10 | 0.68 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG22 | 10 | 0.68 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG21 | 10 | 0.68 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG11 | 10 | 0.68 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG13 | 10 | 0.68 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG12 | 10 | 0.68 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:28:ILE:HG12 | 20 | 0.68 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:28:ILE:HG12 | 20 | 0.68 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:28:ILE:HG12 | 20 | 0.68 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:53:PRO:HG2 | 20 | 0.68 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:53:PRO:HG2 | 20 | 0.68 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:53:PRO:HG2 | 20 | 0.68 |
| (3,156) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HG2 | 10 | 0.68 |
| (3,156) | 1:A:43:LYS:HE2 | 1:A:43:LYS:HG3 | 10 | 0.68 |
| (1,973) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:61:TYR:HD2 | 2 | 0.68 |
| (1,973) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:61:TYR:HD2 | 2 | 0.68 |
| (1,973) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:61:TYR:HD2 | 2 | 0.68 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 6 | 0.68 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 6 | 0.68 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 6 | 0.68 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 16 | 0.68 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 16 | 0.68 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 16 | 0.68 |
| (1,869) | 1:A:8:ARG:HB3 | 1:A:8:ARG:HD3 | 10 | 0.68 |
| (1,773) | 1:A:22:ASN:H | 1:A:22:ASN:HB2 | 8 | 0.68 |
| (1,597) | 1:A:64:LYS:HA | 1:A:64:LYS:HG3 | 3 | 0.68 |
| (1,597) | 1:A:64:LYS:HA | 1:A:64:LYS:HG3 | 16 | 0.68 |
| (1,567) | 1:A:60:GLU:HA | 1:A:60:GLU:HG3 | 17 | 0.68 |
| (1,391) | 1:A:22:ASN:H | 1:A:43:LYS:HD2 | 11 | 0.68 |
| (1,218) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:42:LEU:HB3 | 3 | 0.68 |
| (1,155) | 1:A:65:ALA:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 6 | 0.68 |
| (1,155) | 1:A:65:ALA:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 17 | 0.68 |
| (1,12) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:LEU:HB3 | 2 | 0.68 |
| (3,156) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HG2 | 12 | 0.67 |
| (3,156) | 1:A:43:LYS:HE2 | 1:A:43:LYS:HG3 | 12 | 0.67 |
| (1,809) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:61:TYR:HD2 | 2 | 0.67 |
| (1,809) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:61:TYR:HD2 | 8 | 0.67 |
| (1,809) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:61:TYR:HD2 | 11 | 0.67 |
| (1,809) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:61:TYR:HD2 | 12 | 0.67 |
| (1,809) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:61:TYR:HD2 | 17 | 0.67 |
| (1,773) | 1:A:22:ASN:H | 1:A:22:ASN:HB2 | 5 | 0.67 |
| (1,754) | 1:A:54:LYS:HE3 | 1:A:54:LYS:HG3 | 6 | 0.67 |
| (1,753) | 1:A:54:LYS:HE3 | 1:A:54:LYS:HD2 | 10 | 0.67 |
| (1,753) | 1:A:54:LYS:HE3 | 1:A:54:LYS:HD2 | 11 | 0.67 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,744) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:68:LYS:HD2 | 3 | 0.67 |
| (1,744) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:68:LYS:HD2 | 10 | 0.67 |
| (1,744) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:68:LYS:HD2 | 13 | 0.67 |
| (1,744) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:68:LYS:HD2 | 14 | 0.67 |
| (1,744) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:68:LYS:HD2 | 15 | 0.67 |
| (1,744) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:68:LYS:HD2 | 19 | 0.67 |
| (1,712) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:37:GLN:HG3 | 1 | 0.67 |
| (1,712) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:37:GLN:HG3 | 17 | 0.67 |
| (1,47) | 1:A:57:TRP:HZ3 | 1:A:20:ARG:HG3 | 15 | 0.67 |
| (1,358) | 1:A:11:CYS:H | 1:A:9:CYS:HB2 | 11 | 0.67 |
| (1,233) | 1:A:14:PHE:H | 1:A:13:PHE:HB3 | 10 | 0.67 |
| (1,233) | 1:A:14:PHE:H | 1:A:13:PHE:HB3 | 12 | 0.67 |
| (1,220) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:47:ARG:HG3 | 14 | 0.67 |
| (1,12) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:LEU:HB3 | 20 | 0.67 |
| (1,1028) | 1:A:38:ILE:HG12 | 1:A:37:GLN:HA | 12 | 0.67 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD22 | 1:A:4:SER:HB3 | 14 | 0.66 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD23 | 1:A:4:SER:HB3 | 14 | 0.66 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD21 | 1:A:4:SER:HB3 | 14 | 0.66 |
| (3,231) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:29:LEU:HG | 14 | 0.66 |
| (3,231) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:66:LEU:HG | 14 | 0.66 |
| (1,809) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:61:TYR:HD2 | 10 | 0.66 |
| (1,809) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:61:TYR:HD2 | 14 | 0.66 |
| (1,809) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:61:TYR:HD2 | 15 | 0.66 |
| (1,809) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:61:TYR:HD2 | 19 | 0.66 |
| (1,809) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:61:TYR:HD2 | 20 | 0.66 |
| (1,742) | 1:A:66:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HG | 1 | 0.66 |
| (1,742) | 1:A:66:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HG | 2 | 0.66 |
| (1,742) | 1:A:66:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HG | 3 | 0.66 |
| (1,742) | 1:A:66:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HG | 4 | 0.66 |
| (1,742) | 1:A:66:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HG | 5 | 0.66 |
| (1,742) | 1:A:66:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HG | 6 | 0.66 |
| (1,742) | 1:A:66:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HG | 7 | 0.66 |
| (1,742) | 1:A:66:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HG | 9 | 0.66 |
| (1,742) | 1:A:66:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HG | 13 | 0.66 |
| (1,742) | 1:A:66:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HG | 15 | 0.66 |
| (1,742) | 1:A:66:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HG | 16 | 0.66 |
| (1,742) | 1:A:66:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HG | 17 | 0.66 |
| (1,742) | 1:A:66:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HG | 20 | 0.66 |
| (1,723) | 1:A:20:ARG:HD3 | 1:A:20:ARG:HB2 | 18 | 0.66 |
| (1,615) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:54:LYS:HG3 | 4 | 0.66 |
| (1,567) | 1:A:60:GLU:HA | 1:A:60:GLU:HG3 | 1 | 0.66 |
| (1,567) | 1:A:60:GLU:HA | 1:A:60:GLU:HG3 | 7 | 0.66 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,501) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:48:GLN:HE22 | 20 | 0.66 |
| (1,333) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:54:LYS:HG3 | 12 | 0.66 |
| (1,296) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:63:GLU:HB3 | 1 | 0.66 |
| (1,291) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:64:LYS:HD2 | 16 | 0.66 |
| (1,269) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:60:GLU:HG3 | 9 | 0.66 |
| (1,162) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:68:LYS:HG2 | 18 | 0.66 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:53:PRO:HB2 | 12 | 0.66 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:53:PRO:HB2 | 12 | 0.66 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:53:PRO:HB2 | 12 | 0.66 |
| (3,217) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HA | 9 | 0.65 |
| (3,217) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:24:LYS:HE2 | 9 | 0.65 |
| (3,217) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:43:LYS:HE2 | 9 | 0.65 |
| (3,217) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HA | 14 | 0.65 |
| (3,217) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:24:LYS:HE2 | 14 | 0.65 |
| (3,217) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:43:LYS:HE2 | 14 | 0.65 |
| (1,869) | 1:A:8:ARG:HB3 | 1:A:8:ARG:HD3 | 4 | 0.65 |
| (1,809) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:61:TYR:HD2 | 9 | 0.65 |
| (1,809) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:61:TYR:HD2 | 13 | 0.65 |
| (1,809) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:61:TYR:HD2 | 18 | 0.65 |
| (1,742) | 1:A:66:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HG | 10 | 0.65 |
| (1,571) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HB3 | 1 | 0.65 |
| (1,501) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:48:GLN:HE22 | 8 | 0.65 |
| (1,333) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:54:LYS:HG3 | 20 | 0.65 |
| (1,296) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:63:GLU:HB3 | 9 | 0.65 |
| (1,296) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:63:GLU:HB3 | 14 | 0.65 |
| (1,269) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:60:GLU:HG3 | 17 | 0.65 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ARG:HB3 | 6 | 0.65 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ARG:HB3 | 6 | 0.65 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ARG:HB3 | 6 | 0.65 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD11 | 11 | 0.64 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD12 | 11 | 0.64 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD13 | 11 | 0.64 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HG | 11 | 0.64 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD11 | 12 | 0.64 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD12 | 12 | 0.64 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD13 | 12 | 0.64 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HG | 12 | 0.64 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD11 | 19 | 0.64 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD12 | 19 | 0.64 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD13 | 19 | 0.64 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HG | 19 | 0.64 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HB3 | 9 | 0.64 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HB3 | 9 | 0.64 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HB3 | 9 | 0.64 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 9 | 0.64 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 9 | 0.64 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 9 | 0.64 |
| (1,920) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:49:VAL:HG11 | 16 | 0.64 |
| (1,920) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:49:VAL:HG13 | 16 | 0.64 |
| (1,920) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:49:VAL:HG12 | 16 | 0.64 |
| (1,809) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:61:TYR:HD2 | 4 | 0.64 |
| (1,723) | 1:A:20:ARG:HD3 | 1:A:20:ARG:HB2 | 5 | 0.64 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG11 | 5 | 0.64 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG13 | 5 | 0.64 |
| (1,704) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:49:VAL:HG12 | 5 | 0.64 |
| (1,597) | 1:A:64:LYS:HA | 1:A:64:LYS:HG3 | 6 | 0.64 |
| (1,570) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:63:GLU:HG3 | 20 | 0.64 |
| (1,567) | 1:A:60:GLU:HA | 1:A:60:GLU:HG3 | 20 | 0.64 |
| (1,519) | 1:A:52:ASP:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 6 | 0.64 |
| (1,269) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:60:GLU:HG3 | 3 | 0.64 |
| (1,155) | 1:A:65:ALA:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 8 | 0.64 |
| (1,1185) | 1:A:61:TYR:HA | 1:A:64:LYS:HD2 | 16 | 0.64 |
| (1,1047) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:29:LEU:HB3 | 16 | 0.64 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:53:PRO:HB2 | 13 | 0.64 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:53:PRO:HB2 | 13 | 0.64 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:53:PRO:HB2 | 13 | 0.64 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:53:PRO:HB2 | 15 | 0.64 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:53:PRO:HB2 | 15 | 0.64 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:53:PRO:HB2 | 15 | 0.64 |
| (3,98) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:46:ASN:HB2 | 6 | 0.63 |
| (3,98) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:47:ARG:HD2 | 6 | 0.63 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:24:LYS:HB3 | 9 | 0.63 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:24:LYS:HD2 | 9 | 0.63 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:41:ARG:HB2 | 9 | 0.63 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD22 | 1:A:4:SER:HB3 | 17 | 0.63 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD23 | 1:A:4:SER:HB3 | 17 | 0.63 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD21 | 1:A:4:SER:HB3 | 17 | 0.63 |
| (3,231) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:29:LEU:HG | 17 | 0.63 |
| (3,231) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:66:LEU:HG | 17 | 0.63 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:HG | 8 | 0.63 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 8 | 0.63 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 8 | 0.63 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 8 | 0.63 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:HG | 19 | 0.63 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 19 | 0.63 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 19 | 0.63 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 19 | 0.63 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 2 | 0.63 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 2 | 0.63 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 2 | 0.63 |
| (1,809) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:61:TYR:HD2 | 3 | 0.63 |
| (1,754) | 1:A:54:LYS:HE3 | 1:A:54:LYS:HG3 | 10 | 0.63 |
| (1,723) | 1:A:20:ARG:HD3 | 1:A:20:ARG:HB2 | 17 | 0.63 |
| (1,636) | 1:A:26:LEU:HA | 1:A:26:LEU:HD12 | 6 | 0.63 |
| (1,636) | 1:A:26:LEU:HA | 1:A:26:LEU:HD11 | 6 | 0.63 |
| (1,636) | 1:A:26:LEU:HA | 1:A:26:LEU:HD13 | 6 | 0.63 |
| (1,636) | 1:A:26:LEU:HA | 1:A:26:LEU:HD12 | 10 | 0.63 |
| (1,636) | 1:A:26:LEU:HA | 1:A:26:LEU:HD11 | 10 | 0.63 |
| (1,636) | 1:A:26:LEU:HA | 1:A:26:LEU:HD13 | 10 | 0.63 |
| (1,494) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:47:ARG:HB3 | 8 | 0.63 |
| (1,465) | 1:A:37:GLN:HE21 | 1:A:29:LEU:HB2 | 1 | 0.63 |
| (1,416) | 1:A:28:ILE:H | 1:A:27:LYS:HD2 | 13 | 0.63 |
| (1,286) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:67:ASN:HB2 | 6 | 0.63 |
| (1,278) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:67:ASN:HB2 | 12 | 0.63 |
| (1,269) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:60:GLU:HG3 | 18 | 0.63 |
| (1,233) | 1:A:14:PHE:H | 1:A:13:PHE:HB3 | 5 | 0.63 |
| (1,229) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 10 | 0.63 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:28:ILE:HG12 | 8 | 0.62 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:28:ILE:HG12 | 8 | 0.62 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:28:ILE:HG12 | 8 | 0.62 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:53:PRO:HG2 | 8 | 0.62 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:53:PRO:HG2 | 8 | 0.62 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:53:PRO:HG2 | 8 | 0.62 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:HG | 18 | 0.62 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 18 | 0.62 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 18 | 0.62 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 18 | 0.62 |
| (3,143) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:11:CYS:HB2 | 18 | 0.62 |
| (3,143) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:14:PHE:HB2 | 18 | 0.62 |
| (1,737) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HD2 | 2 | 0.62 |
| (1,737) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HD2 | 3 | 0.62 |
| (1,737) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HD2 | 5 | 0.62 |
| (1,737) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HD2 | 6 | 0.62 |
| (1,737) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HD2 | 7 | 0.62 |
| (1,737) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HD2 | 9 | 0.62 |
| (1,737) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HD2 | 10 | 0.62 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,737) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HD2 | 12 | 0.62 |
| (1,737) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HD2 | 13 | 0.62 |
| (1,737) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HD2 | 14 | 0.62 |
| (1,737) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HD2 | 15 | 0.62 |
| (1,737) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HD2 | 16 | 0.62 |
| (1,737) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HD2 | 19 | 0.62 |
| (1,737) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HD2 | 20 | 0.62 |
| (1,723) | 1:A:20:ARG:HD3 | 1:A:20:ARG:HB2 | 14 | 0.62 |
| (1,636) | 1:A:26:LEU:HA | 1:A:26:LEU:HD12 | 2 | 0.62 |
| (1,636) | 1:A:26:LEU:HA | 1:A:26:LEU:HD11 | 2 | 0.62 |
| (1,636) | 1:A:26:LEU:HA | 1:A:26:LEU:HD13 | 2 | 0.62 |
| (1,501) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:48:GLN:HE22 | 10 | 0.62 |
| (1,501) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:48:GLN:HE22 | 17 | 0.62 |
| (1,269) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:60:GLU:HG3 | 8 | 0.62 |
| (1,269) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:60:GLU:HG3 | 13 | 0.62 |
| (1,155) | 1:A:65:ALA:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 12 | 0.62 |
| (1,155) | 1:A:65:ALA:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 13 | 0.62 |
| (1,1208) | 1:A:69:GLY:HA2 | 1:A:68:LYS:HB3 | 13 | 0.62 |
| (1,1047) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:29:LEU:HB3 | 3 | 0.62 |
| (1,1047) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:29:LEU:HB3 | 19 | 0.62 |
| (3,98) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:46:ASN:HB2 | 17 | 0.61 |
| (3,98) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:47:ARG:HD2 | 17 | 0.61 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD22 | 1:A:4:SER:HB3 | 15 | 0.61 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD23 | 1:A:4:SER:HB3 | 15 | 0.61 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD21 | 1:A:4:SER:HB3 | 15 | 0.61 |
| (3,231) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:29:LEU:HG | 15 | 0.61 |
| (3,231) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:66:LEU:HG | 15 | 0.61 |
| (3,143) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:11:CYS:HB2 | 13 | 0.61 |
| (3,143) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:14:PHE:HB2 | 13 | 0.61 |
| (1,882) | 1:A:54:LYS:HD2 | 1:A:54:LYS:HA | 10 | 0.61 |
| (1,664) | 1:A:41:ARG:HA | 1:A:41:ARG:HG2 | 2 | 0.61 |
| (1,571) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HB3 | 6 | 0.61 |
| (1,519) | 1:A:52:ASP:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 1 | 0.61 |
| (1,519) | 1:A:52:ASP:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 13 | 0.61 |
| (1,513) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:14:PHE:HB2 | 12 | 0.61 |
| (1,508) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:49:VAL:HG23 | 1 | 0.61 |
| (1,508) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:49:VAL:HG22 | 1 | 0.61 |
| (1,508) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:49:VAL:HG21 | 1 | 0.61 |
| (1,508) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:49:VAL:HG23 | 17 | 0.61 |
| (1,508) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:49:VAL:HG22 | 17 | 0.61 |
| (1,508) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:49:VAL:HG21 | 17 | 0.61 |
| (1,229) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 8 | 0.61 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,155) | 1:A:65:ALA:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 11 | 0.61 |
| (1,155) | 1:A:65:ALA:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 19 | 0.61 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HB2 | 15 | 0.61 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HB2 | 15 | 0.61 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HB2 | 15 | 0.61 |
| (1,1047) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:29:LEU:HB3 | 8 | 0.61 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD11 | 8 | 0.6 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD12 | 8 | 0.6 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD13 | 8 | 0.6 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HG | 8 | 0.6 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:36:LEU:HB3 | 3 | 0.6 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:36:LEU:HB3 | 3 | 0.6 |
| (3,280) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:36:LEU:HB3 | 3 | 0.6 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 3 | 0.6 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 3 | 0.6 |
| (3,280) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 3 | 0.6 |
| (1,809) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:61:TYR:HD2 | 1 | 0.6 |
| (1,809) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:61:TYR:HD2 | 5 | 0.6 |
| (1,809) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:61:TYR:HD2 | 7 | 0.6 |
| (1,737) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HD2 | 4 | 0.6 |
| (1,737) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HD2 | 17 | 0.6 |
| (1,636) | 1:A:26:LEU:HA | 1:A:26:LEU:HD12 | 16 | 0.6 |
| (1,636) | 1:A:26:LEU:HA | 1:A:26:LEU:HD11 | 16 | 0.6 |
| (1,636) | 1:A:26:LEU:HA | 1:A:26:LEU:HD13 | 16 | 0.6 |
| (1,519) | 1:A:52:ASP:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 10 | 0.6 |
| (1,508) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:49:VAL:HG23 | 4 | 0.6 |
| (1,508) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:49:VAL:HG22 | 4 | 0.6 |
| (1,508) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:49:VAL:HG21 | 4 | 0.6 |
| (1,501) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:48:GLN:HE22 | 19 | 0.6 |
| (1,358) | 1:A:11:CYS:H | 1:A:9:CYS:HB2 | 17 | 0.6 |
| (1,296) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:63:GLU:HB3 | 8 | 0.6 |
| (1,296) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:63:GLU:HB3 | 12 | 0.6 |
| (1,229) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 1 | 0.6 |
| (1,229) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 4 | 0.6 |
| (1,229) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 6 | 0.6 |
| (1,229) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 11 | 0.6 |
| (1,229) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 14 | 0.6 |
| (1,229) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 20 | 0.6 |
| (1,155) | 1:A:65:ALA:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 5 | 0.6 |
| (3,156) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HG2 | 6 | 0.59 |
| (3,156) | 1:A:43:LYS:HE2 | 1:A:43:LYS:HG3 | 6 | 0.59 |
| (3,115) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HD11 | 11 | 0.59 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,115) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HD12 | 11 | 0.59 |
| (3,115) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HD13 | 11 | 0.59 |
| (3,115) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HG | 11 | 0.59 |
| (3,115) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HD11 | 14 | 0.59 |
| (3,115) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HD12 | 14 | 0.59 |
| (3,115) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HD13 | 14 | 0.59 |
| (3,115) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HG | 14 | 0.59 |
| (1,920) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:49:VAL:HG11 | 11 | 0.59 |
| (1,920) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:49:VAL:HG13 | 11 | 0.59 |
| (1,920) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:49:VAL:HG12 | 11 | 0.59 |
| (1,809) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:61:TYR:HD2 | 16 | 0.59 |
| (1,513) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:14:PHE:HB2 | 6 | 0.59 |
| (1,513) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:14:PHE:HB2 | 13 | 0.59 |
| (1,508) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:49:VAL:HG23 | 3 | 0.59 |
| (1,508) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:49:VAL:HG22 | 3 | 0.59 |
| (1,508) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:49:VAL:HG21 | 3 | 0.59 |
| (1,508) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:49:VAL:HG23 | 15 | 0.59 |
| (1,508) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:49:VAL:HG22 | 15 | 0.59 |
| (1,508) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:49:VAL:HG21 | 15 | 0.59 |
| (1,501) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:48:GLN:HE22 | 1 | 0.59 |
| (1,461) | 1:A:37:GLN:HE21 | 1:A:10:PRO:HD3 | 6 | 0.59 |
| (1,229) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 2 | 0.59 |
| (1,229) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 19 | 0.59 |
| (1,218) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:42:LEU:HB3 | 14 | 0.59 |
| (1,155) | 1:A:65:ALA:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 4 | 0.59 |
| (1,151) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 1 | 0.59 |
| (1,151) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 6 | 0.59 |
| (1,1208) | 1:A:69:GLY:HA2 | 1:A:68:LYS:HB3 | 2 | 0.59 |
| (1,12) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:LEU:HB3 | 13 | 0.59 |
| (1,1047) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:29:LEU:HB3 | 7 | 0.59 |
| (3,282) | 1:A:65:ALA:HA | 1:A:28:ILE:HG12 | 2 | 0.58 |
| (3,282) | 1:A:65:ALA:HA | 1:A:66:LEU:HB3 | 2 | 0.58 |
| (3,233) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:10:PRO:HD3 | 17 | 0.58 |
| (3,233) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:32:PRO:HD2 | 17 | 0.58 |
| (3,17) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:20:ARG:HD3 | 12 | 0.58 |
| (3,17) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:22:ASN:HB2 | 12 | 0.58 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:HG | 12 | 0.58 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 12 | 0.58 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 12 | 0.58 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 12 | 0.58 |
| (1,923) | 1:A:15:GLU:HB3 | 1:A:49:VAL:HG11 | 15 | 0.58 |
| (1,923) | 1:A:15:GLU:HB3 | 1:A:49:VAL:HG13 | 15 | 0.58 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,923) | 1:A:15:GLU:HB3 | 1:A:49:VAL:HG12 | 15 | 0.58 |
| (1,508) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:49:VAL:HG23 | 11 | 0.58 |
| (1,508) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:49:VAL:HG22 | 11 | 0.58 |
| (1,508) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:49:VAL:HG21 | 11 | 0.58 |
| (1,508) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:49:VAL:HG23 | 14 | 0.58 |
| (1,508) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:49:VAL:HG22 | 14 | 0.58 |
| (1,508) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:49:VAL:HG21 | 14 | 0.58 |
| (1,465) | 1:A:37:GLN:HE21 | 1:A:29:LEU:HB2 | 14 | 0.58 |
| (1,296) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:63:GLU:HB3 | 7 | 0.58 |
| (1,269) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:60:GLU:HG3 | 2 | 0.58 |
| (1,269) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:60:GLU:HG3 | 5 | 0.58 |
| (1,229) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 7 | 0.58 |
| (1,229) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 9 | 0.58 |
| (1,229) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 12 | 0.58 |
| (1,229) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 15 | 0.58 |
| (1,151) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 2 | 0.58 |
| (1,151) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 12 | 0.58 |
| (1,151) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 13 | 0.58 |
| (1,151) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 20 | 0.58 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:HG | 1 | 0.57 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 1 | 0.57 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 1 | 0.57 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 1 | 0.57 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:HG | 14 | 0.57 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 14 | 0.57 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 14 | 0.57 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 14 | 0.57 |
| (1,915) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HG3 | 9 | 0.57 |
| (1,641) | 1:A:5:LEU:HA | 1:A:5:LEU:HD22 | 6 | 0.57 |
| (1,641) | 1:A:5:LEU:HA | 1:A:5:LEU:HD23 | 6 | 0.57 |
| (1,641) | 1:A:5:LEU:HA | 1:A:5:LEU:HD21 | 6 | 0.57 |
| (1,508) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:49:VAL:HG23 | 2 | 0.57 |
| (1,508) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:49:VAL:HG22 | 2 | 0.57 |
| (1,508) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:49:VAL:HG21 | 2 | 0.57 |
| (1,508) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:49:VAL:HG23 | 7 | 0.57 |
| (1,508) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:49:VAL:HG22 | 7 | 0.57 |
| (1,508) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:49:VAL:HG21 | 7 | 0.57 |
| (1,508) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:49:VAL:HG23 | 20 | 0.57 |
| (1,508) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:49:VAL:HG22 | 20 | 0.57 |
| (1,508) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:49:VAL:HG21 | 20 | 0.57 |
| (1,296) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:63:GLU:HB3 | 13 | 0.57 |
| (1,229) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 5 | 0.57 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,229) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 13 | 0.57 |
| (1,229) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 16 | 0.57 |
| (1,229) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 18 | 0.57 |
| (1,155) | 1:A:65:ALA:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 18 | 0.57 |
| (1,151) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 3 | 0.57 |
| (1,151) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 8 | 0.57 |
| (1,151) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 10 | 0.57 |
| (1,151) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 16 | 0.57 |
| (1,151) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 18 | 0.57 |
| (1,1208) | 1:A:69:GLY:HA2 | 1:A:68:LYS:HB3 | 19 | 0.57 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HB2 | 13 | 0.57 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HB2 | 13 | 0.57 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HB2 | 13 | 0.57 |
| (1,1049) | 1:A:40:ALA:HA | 1:A:26:LEU:HD12 | 2 | 0.57 |
| (1,1049) | 1:A:40:ALA:HA | 1:A:26:LEU:HD11 | 2 | 0.57 |
| (1,1049) | 1:A:40:ALA:HA | 1:A:26:LEU:HD13 | 2 | 0.57 |
| (1,1049) | 1:A:40:ALA:HA | 1:A:26:LEU:HD12 | 10 | 0.57 |
| (1,1049) | 1:A:40:ALA:HA | 1:A:26:LEU:HD11 | 10 | 0.57 |
| (1,1049) | 1:A:40:ALA:HA | 1:A:26:LEU:HD13 | 10 | 0.57 |
| (3,98) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:46:ASN:HB2 | 15 | 0.56 |
| (3,98) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:47:ARG:HD2 | 15 | 0.56 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:24:LYS:HB3 | 15 | 0.56 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:24:LYS:HD2 | 15 | 0.56 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:41:ARG:HB2 | 15 | 0.56 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:HG | 16 | 0.56 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 16 | 0.56 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 16 | 0.56 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 16 | 0.56 |
| (1,90) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HD12 | 10 | 0.56 |
| (1,90) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HD11 | 10 | 0.56 |
| (1,90) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HD13 | 10 | 0.56 |
| (1,809) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:61:TYR:HD2 | 6 | 0.56 |
| (1,723) | 1:A:20:ARG:HD3 | 1:A:20:ARG:HB2 | 11 | 0.56 |
| (1,465) | 1:A:37:GLN:HE21 | 1:A:29:LEU:HB2 | 17 | 0.56 |
| (1,461) | 1:A:37:GLN:HE21 | 1:A:10:PRO:HD3 | 11 | 0.56 |
| (1,333) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:54:LYS:HG3 | 7 | 0.56 |
| (1,304) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:20:ARG:HB2 | 8 | 0.56 |
| (1,269) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:60:GLU:HG3 | 19 | 0.56 |
| (1,233) | 1:A:14:PHE:H | 1:A:13:PHE:HB3 | 13 | 0.56 |
| (1,200) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:22:ASN:HB3 | 8 | 0.56 |
| (1,151) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 11 | 0.56 |
| (1,1185) | 1:A:61:TYR:HA | 1:A:64:LYS:HD2 | 3 | 0.56 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ARG:HB3 | 1 | 0.56 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ARG:HB3 | 1 | 0.56 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ARG:HB3 | 1 | 0.56 |
| (1,1047) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:29:LEU:HB3 | 6 | 0.56 |
| (1,1047) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:29:LEU:HB3 | 18 | 0.56 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:53:PRO:HB2 | 2 | 0.56 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:53:PRO:HB2 | 2 | 0.56 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:53:PRO:HB2 | 2 | 0.56 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG23 | 14 | 0.55 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG22 | 14 | 0.55 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG21 | 14 | 0.55 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG11 | 14 | 0.55 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG13 | 14 | 0.55 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG12 | 14 | 0.55 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:HG | 2 | 0.55 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 2 | 0.55 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 2 | 0.55 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 2 | 0.55 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:HG | 3 | 0.55 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 3 | 0.55 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 3 | 0.55 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 3 | 0.55 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:HG | 4 | 0.55 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 4 | 0.55 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 4 | 0.55 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 4 | 0.55 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:HG | 5 | 0.55 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 5 | 0.55 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 5 | 0.55 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 5 | 0.55 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:HG | 15 | 0.55 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 15 | 0.55 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 15 | 0.55 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 15 | 0.55 |
| (1,866) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:13:PHE:HE1 | 9 | 0.55 |
| (1,866) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:13:PHE:HE2 | 9 | 0.55 |
| (1,770) | 1:A:22:ASN:HB3 | 1:A:42:LEU:HD21 | 8 | 0.55 |
| (1,770) | 1:A:22:ASN:HB3 | 1:A:42:LEU:HD23 | 8 | 0.55 |
| (1,770) | 1:A:22:ASN:HB3 | 1:A:42:LEU:HD22 | 8 | 0.55 |
| (1,508) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:49:VAL:HG23 | 10 | 0.55 |
| (1,508) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:49:VAL:HG22 | 10 | 0.55 |
| (1,508) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:49:VAL:HG21 | 10 | 0.55 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,296) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:63:GLU:HB3 | 11 | 0.55 |
| (1,269) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:60:GLU:HG3 | 12 | 0.55 |
| (1,229) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 3 | 0.55 |
| (1,229) | 1:A:62:LEU:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 17 | 0.55 |
| (1,218) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:42:LEU:HB3 | 9 | 0.55 |
| (1,218) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:42:LEU:HB3 | 19 | 0.55 |
| (1,155) | 1:A:65:ALA:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 9 | 0.55 |
| (1,155) | 1:A:65:ALA:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 14 | 0.55 |
| (1,151) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 17 | 0.55 |
| (1,1208) | 1:A:69:GLY:HA2 | 1:A:68:LYS:HB3 | 17 | 0.55 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ARG:HB3 | 17 | 0.55 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ARG:HB3 | 17 | 0.55 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ARG:HB3 | 17 | 0.55 |
| (1,1042) | 1:A:50:CYS:HA | 1:A:39:VAL:HG23 | 2 | 0.55 |
| (1,1042) | 1:A:50:CYS:HA | 1:A:39:VAL:HG21 | 2 | 0.55 |
| (1,1042) | 1:A:50:CYS:HA | 1:A:39:VAL:HG22 | 2 | 0.55 |
| (3,279) | 1:A:22:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD21 | 18 | 0.54 |
| (3,279) | 1:A:22:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD23 | 18 | 0.54 |
| (3,279) | 1:A:22:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD22 | 18 | 0.54 |
| (3,279) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:61:TYR:HD2 | 18 | 0.54 |
| (3,279) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:61:TYR:HD2 | 18 | 0.54 |
| (3,279) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:61:TYR:HD2 | 18 | 0.54 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD22 | 1:A:4:SER:HB3 | 9 | 0.54 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD23 | 1:A:4:SER:HB3 | 9 | 0.54 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD21 | 1:A:4:SER:HB3 | 9 | 0.54 |
| (3,231) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:29:LEU:HG | 9 | 0.54 |
| (3,231) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:66:LEU:HG | 9 | 0.54 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:HG | 9 | 0.54 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 9 | 0.54 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 9 | 0.54 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 9 | 0.54 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:HG | 13 | 0.54 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 13 | 0.54 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 13 | 0.54 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 13 | 0.54 |
| (1,920) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:49:VAL:HG11 | 17 | 0.54 |
| (1,920) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:49:VAL:HG13 | 17 | 0.54 |
| (1,920) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:49:VAL:HG12 | 17 | 0.54 |
| (1,508) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:49:VAL:HG23 | 16 | 0.54 |
| (1,508) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:49:VAL:HG22 | 16 | 0.54 |
| (1,508) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:49:VAL:HG21 | 16 | 0.54 |
| (1,296) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:63:GLU:HB3 | 4 | 0.54 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,296) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:63:GLU:HB3 | 17 | 0.54 |
| (1,269) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:60:GLU:HG3 | 11 | 0.54 |
| (1,233) | 1:A:14:PHE:H | 1:A:13:PHE:HB3 | 3 | 0.54 |
| (1,151) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 19 | 0.54 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:24:LYS:HB3 | 7 | 0.53 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:24:LYS:HD2 | 7 | 0.53 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:41:ARG:HB2 | 7 | 0.53 |
| (3,73) | 1:A:29:LEU:H | 1:A:28:ILE:HG13 | 2 | 0.53 |
| (3,73) | 1:A:29:LEU:H | 1:A:38:ILE:HG12 | 2 | 0.53 |
| (3,279) | 1:A:22:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD21 | 12 | 0.53 |
| (3,279) | 1:A:22:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD23 | 12 | 0.53 |
| (3,279) | 1:A:22:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD22 | 12 | 0.53 |
| (3,279) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:61:TYR:HD2 | 12 | 0.53 |
| (3,279) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:61:TYR:HD2 | 12 | 0.53 |
| (3,279) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:61:TYR:HD2 | 12 | 0.53 |
| (3,279) | 1:A:22:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD21 | 14 | 0.53 |
| (3,279) | 1:A:22:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD23 | 14 | 0.53 |
| (3,279) | 1:A:22:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD22 | 14 | 0.53 |
| (3,279) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:61:TYR:HD2 | 14 | 0.53 |
| (3,279) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:61:TYR:HD2 | 14 | 0.53 |
| (3,279) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:61:TYR:HD2 | 14 | 0.53 |
| (3,217) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HA | 18 | 0.53 |
| (3,217) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:24:LYS:HE2 | 18 | 0.53 |
| (3,217) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:43:LYS:HE2 | 18 | 0.53 |
| (3,217) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HA | 20 | 0.53 |
| (3,217) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:24:LYS:HE2 | 20 | 0.53 |
| (3,217) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:43:LYS:HE2 | 20 | 0.53 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:HG | 6 | 0.53 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 6 | 0.53 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 6 | 0.53 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 6 | 0.53 |
| (1,474) | 1:A:39:VAL:H | 1:A:26:LEU:HD12 | 6 | 0.53 |
| (1,474) | 1:A:39:VAL:H | 1:A:26:LEU:HD11 | 6 | 0.53 |
| (1,474) | 1:A:39:VAL:H | 1:A:26:LEU:HD13 | 6 | 0.53 |
| (1,304) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:20:ARG:HB2 | 13 | 0.53 |
| (1,162) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:68:LYS:HG2 | 3 | 0.53 |
| (1,155) | 1:A:65:ALA:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 2 | 0.53 |
| (1,1208) | 1:A:69:GLY:HA2 | 1:A:68:LYS:HB3 | 16 | 0.53 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:53:PRO:HB2 | 20 | 0.53 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:53:PRO:HB2 | 20 | 0.53 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:53:PRO:HB2 | 20 | 0.53 |
| (3,75) | 1:A:31:THR:H | 1:A:33:ASN:HD22 | 7 | 0.52 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,75) | 1:A:31:THR:H | 1:A:37:GLN:HE21 | 7 | 0.52 |
| (3,69) | 1:A:22:ASN:HD21 | 1:A:42:LEU:HB2 | 19 | 0.52 |
| (3,69) | 1:A:22:ASN:HD21 | 1:A:43:LYS:HD2 | 19 | 0.52 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG23 | 4 | 0.52 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG22 | 4 | 0.52 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG21 | 4 | 0.52 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG11 | 4 | 0.52 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG13 | 4 | 0.52 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG12 | 4 | 0.52 |
| (3,31) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:50:CYS:HB3 | 8 | 0.52 |
| (3,31) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:52:ASP:HA | 8 | 0.52 |
| (3,265) | 1:A:56:LYS:HG3 | 1:A:56:LYS:HE3 | 7 | 0.52 |
| (3,265) | 1:A:56:LYS:HG2 | 1:A:56:LYS:HE3 | 7 | 0.52 |
| (3,233) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:10:PRO:HD3 | 16 | 0.52 |
| (3,233) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:32:PRO:HD2 | 16 | 0.52 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD22 | 1:A:4:SER:HB3 | 12 | 0.52 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD23 | 1:A:4:SER:HB3 | 12 | 0.52 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD21 | 1:A:4:SER:HB3 | 12 | 0.52 |
| (3,231) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:29:LEU:HG | 12 | 0.52 |
| (3,231) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:66:LEU:HG | 12 | 0.52 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:HG | 7 | 0.52 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 7 | 0.52 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 7 | 0.52 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 7 | 0.52 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:HG | 17 | 0.52 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 17 | 0.52 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 17 | 0.52 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 17 | 0.52 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:HG | 20 | 0.52 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 20 | 0.52 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 20 | 0.52 |
| (3,161) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 20 | 0.52 |
| (3,143) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:11:CYS:HB2 | 6 | 0.52 |
| (3,143) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:14:PHE:HB2 | 6 | 0.52 |
| (3,143) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:11:CYS:HB2 | 12 | 0.52 |
| (3,143) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:14:PHE:HB2 | 12 | 0.52 |
| (1,981) | 1:A:27:LYS:HG3 | 1:A:27:LYS:HE2 | 8 | 0.52 |
| (1,981) | 1:A:27:LYS:HG3 | 1:A:27:LYS:HE2 | 14 | 0.52 |
| (1,974) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:57:TRP:HH2 | 6 | 0.52 |
| (1,974) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:57:TRP:HH2 | 6 | 0.52 |
| (1,974) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:57:TRP:HH2 | 6 | 0.52 |
| (1,736) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:24:LYS:HE2 | 18 | 0.52 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,455) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:29:LEU:HB2 | 7 | 0.52 |
| (1,269) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:60:GLU:HG3 | 16 | 0.52 |
| (1,218) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:42:LEU:HB3 | 6 | 0.52 |
| (1,194) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:50:CYS:HB3 | 8 | 0.52 |
| (1,194) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:50:CYS:HB3 | 12 | 0.52 |
| (1,194) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:50:CYS:HB3 | 18 | 0.52 |
| (1,162) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:68:LYS:HG2 | 4 | 0.52 |
| (1,13) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 11 | 0.52 |
| (1,13) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 11 | 0.52 |
| (1,13) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 11 | 0.52 |
| (1,1147) | 1:A:56:LYS:HD2 | 1:A:56:LYS:HA | 2 | 0.52 |
| (1,109) | 1:A:39:VAL:H | 1:A:39:VAL:HG12 | 2 | 0.52 |
| (1,109) | 1:A:39:VAL:H | 1:A:39:VAL:HG11 | 2 | 0.52 |
| (1,109) | 1:A:39:VAL:H | 1:A:39:VAL:HG13 | 2 | 0.52 |
| (3,98) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:46:ASN:HB2 | 9 | 0.51 |
| (3,98) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:47:ARG:HD2 | 9 | 0.51 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:24:LYS:HB3 | 6 | 0.51 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:24:LYS:HD2 | 6 | 0.51 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:41:ARG:HB2 | 6 | 0.51 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:24:LYS:HB3 | 20 | 0.51 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:24:LYS:HD2 | 20 | 0.51 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:41:ARG:HB2 | 20 | 0.51 |
| (3,73) | 1:A:29:LEU:H | 1:A:28:ILE:HG13 | 9 | 0.51 |
| (3,73) | 1:A:29:LEU:H | 1:A:38:ILE:HG12 | 9 | 0.51 |
| (3,73) | 1:A:29:LEU:H | 1:A:28:ILE:HG13 | 12 | 0.51 |
| (3,73) | 1:A:29:LEU:H | 1:A:38:ILE:HG12 | 12 | 0.51 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG23 | 7 | 0.51 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG22 | 7 | 0.51 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG21 | 7 | 0.51 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG11 | 7 | 0.51 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG13 | 7 | 0.51 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG12 | 7 | 0.51 |
| (3,217) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HA | 7 | 0.51 |
| (3,217) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:24:LYS:HE2 | 7 | 0.51 |
| (3,217) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:43:LYS:HE2 | 7 | 0.51 |
| (1,738) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HG3 | 18 | 0.51 |
| (1,712) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:37:GLN:HG3 | 14 | 0.51 |
| (1,654) | 1:A:37:GLN:HA | 1:A:37:GLN:HG3 | 17 | 0.51 |
| (1,608) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HB2 | 2 | 0.51 |
| (1,608) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HB2 | 8 | 0.51 |
| (1,608) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HB2 | 10 | 0.51 |
| (1,608) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HB2 | 11 | 0.51 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,608) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HB2 | 16 | 0.51 |
| (1,608) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HB2 | 18 | 0.51 |
| (1,304) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:20:ARG:HB2 | 1 | 0.51 |
| (1,278) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:67:ASN:HB2 | 3 | 0.51 |
| (1,244) | 1:A:18:ILE:H | 1:A:18:ILE:HG12 | 7 | 0.51 |
| (1,244) | 1:A:18:ILE:H | 1:A:18:ILE:HG12 | 15 | 0.51 |
| (1,194) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:50:CYS:HB3 | 6 | 0.51 |
| (1,122) | 1:A:28:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG13 | 2 | 0.51 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:53:PRO:HB2 | 9 | 0.51 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:53:PRO:HB2 | 9 | 0.51 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:53:PRO:HB2 | 9 | 0.51 |
| (1,1028) | 1:A:38:ILE:HG12 | 1:A:37:GLN:HA | 7 | 0.51 |
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:23:VAL:HG13 | 2 | 0.5 |
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:23:VAL:HG11 | 2 | 0.5 |
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:23:VAL:HG12 | 2 | 0.5 |
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:23:VAL:HG13 | 2 | 0.5 |
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:23:VAL:HG11 | 2 | 0.5 |
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:23:VAL:HG12 | 2 | 0.5 |
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:23:VAL:HG13 | 2 | 0.5 |
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:23:VAL:HG11 | 2 | 0.5 |
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:23:VAL:HG12 | 2 | 0.5 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:26:LEU:HD22 | 2 | 0.5 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:26:LEU:HD21 | 2 | 0.5 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:26:LEU:HD23 | 2 | 0.5 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:26:LEU:HD22 | 2 | 0.5 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:26:LEU:HD21 | 2 | 0.5 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:26:LEU:HD23 | 2 | 0.5 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:26:LEU:HD22 | 2 | 0.5 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:26:LEU:HD21 | 2 | 0.5 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:26:LEU:HD23 | 2 | 0.5 |
| (3,169) | 1:A:7:TYR:HB3 | 1:A:8:ARG:HB2 | 2 | 0.5 |
| (3,169) | 1:A:67:ASN:HB3 | 1:A:68:LYS:HD2 | 2 | 0.5 |
| (1,76) | 1:A:5:LEU:H | 1:A:5:LEU:HB3 | 16 | 0.5 |
| (1,684) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:10:PRO:HD3 | 11 | 0.5 |
| (1,608) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HB2 | 1 | 0.5 |
| (1,608) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HB2 | 4 | 0.5 |
| (1,608) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HB2 | 5 | 0.5 |
| (1,608) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HB2 | 6 | 0.5 |
| (1,608) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HB2 | 14 | 0.5 |
| (1,608) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HB2 | 17 | 0.5 |
| (1,608) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HB2 | 19 | 0.5 |
| (1,494) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:47:ARG:HB3 | 9 | 0.5 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,455) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:29:LEU:HB2 | 6 | 0.5 |
| (1,286) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:67:ASN:HB2 | 3 | 0.5 |
| (1,269) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:60:GLU:HG3 | 15 | 0.5 |
| (1,194) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:50:CYS:HB3 | 9 | 0.5 |
| (1,194) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:50:CYS:HB3 | 13 | 0.5 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HB2 | 18 | 0.5 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HB2 | 18 | 0.5 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HB2 | 18 | 0.5 |
| (1,1185) | 1:A:61:TYR:HA | 1:A:64:LYS:HD2 | 6 | 0.5 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:24:LYS:HB3 | 14 | 0.49 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:24:LYS:HD2 | 14 | 0.49 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:41:ARG:HB2 | 14 | 0.49 |
| (3,31) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:50:CYS:HB3 | 16 | 0.49 |
| (3,31) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:52:ASP:HA | 16 | 0.49 |
| (3,265) | 1:A:56:LYS:HG3 | 1:A:56:LYS:HE3 | 10 | 0.49 |
| (3,265) | 1:A:56:LYS:HG2 | 1:A:56:LYS:HE3 | 10 | 0.49 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:28:ILE:HG12 | 19 | 0.49 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:28:ILE:HG12 | 19 | 0.49 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:28:ILE:HG12 | 19 | 0.49 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:53:PRO:HG2 | 19 | 0.49 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:53:PRO:HG2 | 19 | 0.49 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:53:PRO:HG2 | 19 | 0.49 |
| (3,233) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:10:PRO:HD3 | 12 | 0.49 |
| (3,233) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:32:PRO:HD2 | 12 | 0.49 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB2 | 16 | 0.49 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB3 | 16 | 0.49 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB1 | 16 | 0.49 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB2 | 16 | 0.49 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB3 | 16 | 0.49 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB1 | 16 | 0.49 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB2 | 16 | 0.49 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB3 | 16 | 0.49 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB1 | 16 | 0.49 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HB3 | 16 | 0.49 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HB3 | 16 | 0.49 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HB3 | 16 | 0.49 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB2 | 16 | 0.49 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB3 | 16 | 0.49 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB1 | 16 | 0.49 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB2 | 16 | 0.49 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB3 | 16 | 0.49 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB1 | 16 | 0.49 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB2 | 16 | 0.49 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB3 | 16 | 0.49 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB1 | 16 | 0.49 |
| (3,144) | 1:A:50:CYS:HB2 | 1:A:11:CYS:HB2 | 2 | 0.49 |
| (3,144) | 1:A:50:CYS:HB2 | 1:A:14:PHE:HB2 | 2 | 0.49 |
| (1,915) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HG3 | 14 | 0.49 |
| (1,727) | 1:A:41:ARG:HD3 | 1:A:41:ARG:HG2 | 2 | 0.49 |
| (1,660) | 1:A:41:ARG:HA | 1:A:41:ARG:HD3 | 5 | 0.49 |
| (1,654) | 1:A:37:GLN:HA | 1:A:37:GLN:HG3 | 18 | 0.49 |
| (1,608) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HB2 | 7 | 0.49 |
| (1,608) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HB2 | 9 | 0.49 |
| (1,608) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HB2 | 13 | 0.49 |
| (1,608) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HB2 | 15 | 0.49 |
| (1,519) | 1:A:52:ASP:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 12 | 0.49 |
| (1,304) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:20:ARG:HB2 | 3 | 0.49 |
| (1,218) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:42:LEU:HB3 | 5 | 0.49 |
| (1,194) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:50:CYS:HB3 | 5 | 0.49 |
| (1,1185) | 1:A:61:TYR:HA | 1:A:64:LYS:HD2 | 1 | 0.49 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ARG:HB3 | 16 | 0.49 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ARG:HB3 | 16 | 0.49 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ARG:HB3 | 16 | 0.49 |
| (3,69) | 1:A:22:ASN:HD21 | 1:A:42:LEU:HB2 | 13 | 0.48 |
| (3,69) | 1:A:22:ASN:HD21 | 1:A:43:LYS:HD2 | 13 | 0.48 |
| (3,265) | 1:A:56:LYS:HG3 | 1:A:56:LYS:HE3 | 14 | 0.48 |
| (3,265) | 1:A:56:LYS:HG2 | 1:A:56:LYS:HE3 | 14 | 0.48 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:28:ILE:HG12 | 10 | 0.48 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:28:ILE:HG12 | 10 | 0.48 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:28:ILE:HG12 | 10 | 0.48 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:53:PRO:HG2 | 10 | 0.48 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:53:PRO:HG2 | 10 | 0.48 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:53:PRO:HG2 | 10 | 0.48 |
| (3,226) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:28:ILE:HD13 | 2 | 0.48 |
| (3,226) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:28:ILE:HD12 | 2 | 0.48 |
| (3,226) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:28:ILE:HD11 | 2 | 0.48 |
| (3,226) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:39:VAL:HG12 | 2 | 0.48 |
| (3,226) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:39:VAL:HG11 | 2 | 0.48 |
| (3,226) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:39:VAL:HG13 | 2 | 0.48 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB2 | 6 | 0.48 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB3 | 6 | 0.48 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB1 | 6 | 0.48 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB2 | 6 | 0.48 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB3 | 6 | 0.48 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB1 | 6 | 0.48 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB2 | 6 | 0.48 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB3 | 6 | 0.48 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB1 | 6 | 0.48 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HB3 | 6 | 0.48 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HB3 | 6 | 0.48 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HB3 | 6 | 0.48 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB2 | 6 | 0.48 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB3 | 6 | 0.48 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB1 | 6 | 0.48 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB2 | 6 | 0.48 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB3 | 6 | 0.48 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB1 | 6 | 0.48 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB2 | 6 | 0.48 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB3 | 6 | 0.48 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB1 | 6 | 0.48 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB2 | 12 | 0.48 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB3 | 12 | 0.48 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB1 | 12 | 0.48 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB2 | 12 | 0.48 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB3 | 12 | 0.48 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB1 | 12 | 0.48 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB2 | 12 | 0.48 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB3 | 12 | 0.48 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB1 | 12 | 0.48 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HB3 | 12 | 0.48 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HB3 | 12 | 0.48 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HB3 | 12 | 0.48 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB2 | 12 | 0.48 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB3 | 12 | 0.48 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB1 | 12 | 0.48 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB2 | 12 | 0.48 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB3 | 12 | 0.48 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB1 | 12 | 0.48 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB2 | 12 | 0.48 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB3 | 12 | 0.48 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB1 | 12 | 0.48 |
| (3,144) | 1:A:50:CYS:HB2 | 1:A:11:CYS:HB2 | 1 | 0.48 |
| (3,144) | 1:A:50:CYS:HB2 | 1:A:14:PHE:HB2 | 1 | 0.48 |
| (1,915) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HG3 | 5 | 0.48 |
| (1,915) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HG3 | 16 | 0.48 |
| (1,76) | 1:A:5:LEU:H | 1:A:5:LEU:HB3 | 5 | 0.48 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,639) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:44:ASN:HB2 | 1 | 0.48 |
| (1,639) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:44:ASN:HB2 | 2 | 0.48 |
| (1,639) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:44:ASN:HB2 | 3 | 0.48 |
| (1,639) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:44:ASN:HB2 | 5 | 0.48 |
| (1,639) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:44:ASN:HB2 | 13 | 0.48 |
| (1,639) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:44:ASN:HB2 | 16 | 0.48 |
| (1,639) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:44:ASN:HB2 | 17 | 0.48 |
| (1,639) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:44:ASN:HB2 | 20 | 0.48 |
| (1,628) | 1:A:15:GLU:HA | 1:A:15:GLU:HG2 | 9 | 0.48 |
| (1,608) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HB2 | 3 | 0.48 |
| (1,608) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HB2 | 12 | 0.48 |
| (1,531) | 1:A:57:TRP:HE1 | 1:A:20:ARG:HB3 | 16 | 0.48 |
| (1,304) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:20:ARG:HB2 | 2 | 0.48 |
| (1,304) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:20:ARG:HB2 | 9 | 0.48 |
| (1,298) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:64:LYS:HG3 | 6 | 0.48 |
| (1,296) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:63:GLU:HB3 | 15 | 0.48 |
| (1,286) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:67:ASN:HB2 | 12 | 0.48 |
| (1,278) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:67:ASN:HB2 | 7 | 0.48 |
| (3,73) | 1:A:29:LEU:H | 1:A:28:ILE:HG13 | 8 | 0.47 |
| (3,73) | 1:A:29:LEU:H | 1:A:38:ILE:HG12 | 8 | 0.47 |
| (3,73) | 1:A:29:LEU:H | 1:A:28:ILE:HG13 | 18 | 0.47 |
| (3,73) | 1:A:29:LEU:H | 1:A:38:ILE:HG12 | 18 | 0.47 |
| (3,35) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:46:ASN:HB2 | 6 | 0.47 |
| (3,35) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:47:ARG:HD2 | 6 | 0.47 |
| (3,217) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HA | 10 | 0.47 |
| (3,217) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:24:LYS:HE2 | 10 | 0.47 |
| (3,217) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:43:LYS:HE2 | 10 | 0.47 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB2 | 11 | 0.47 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB3 | 11 | 0.47 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB1 | 11 | 0.47 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB2 | 11 | 0.47 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB3 | 11 | 0.47 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB1 | 11 | 0.47 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB2 | 11 | 0.47 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB3 | 11 | 0.47 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB1 | 11 | 0.47 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HB3 | 11 | 0.47 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HB3 | 11 | 0.47 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HB3 | 11 | 0.47 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB2 | 11 | 0.47 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB3 | 11 | 0.47 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB1 | 11 | 0.47 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB2 | 11 | 0.47 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB3 | 11 | 0.47 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB1 | 11 | 0.47 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB2 | 11 | 0.47 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB3 | 11 | 0.47 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB1 | 11 | 0.47 |
| (1,974) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:57:TRP:HH2 | 2 | 0.47 |
| (1,974) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:57:TRP:HH2 | 2 | 0.47 |
| (1,974) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:57:TRP:HH2 | 2 | 0.47 |
| (1,915) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HG3 | 18 | 0.47 |
| (1,867) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:12:ARG:HD2 | 9 | 0.47 |
| (1,660) | 1:A:41:ARG:HA | 1:A:41:ARG:HD3 | 8 | 0.47 |
| (1,639) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:44:ASN:HB2 | 4 | 0.47 |
| (1,639) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:44:ASN:HB2 | 6 | 0.47 |
| (1,639) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:44:ASN:HB2 | 8 | 0.47 |
| (1,639) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:44:ASN:HB2 | 9 | 0.47 |
| (1,639) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:44:ASN:HB2 | 10 | 0.47 |
| (1,639) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:44:ASN:HB2 | 11 | 0.47 |
| (1,639) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:44:ASN:HB2 | 12 | 0.47 |
| (1,639) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:44:ASN:HB2 | 14 | 0.47 |
| (1,639) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:44:ASN:HB2 | 15 | 0.47 |
| (1,639) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:44:ASN:HB2 | 18 | 0.47 |
| (1,639) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:44:ASN:HB2 | 19 | 0.47 |
| (1,312) | 1:A:13:PHE:H | 1:A:13:PHE:HB2 | 5 | 0.47 |
| (1,312) | 1:A:13:PHE:H | 1:A:13:PHE:HB2 | 8 | 0.47 |
| (1,312) | 1:A:13:PHE:H | 1:A:13:PHE:HB2 | 9 | 0.47 |
| (1,312) | 1:A:13:PHE:H | 1:A:13:PHE:HB2 | 10 | 0.47 |
| (1,312) | 1:A:13:PHE:H | 1:A:13:PHE:HB2 | 12 | 0.47 |
| (1,312) | 1:A:13:PHE:H | 1:A:13:PHE:HB2 | 19 | 0.47 |
| (1,304) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:20:ARG:HB2 | 20 | 0.47 |
| (1,296) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:63:GLU:HB3 | 5 | 0.47 |
| (1,279) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HB3 | 3 | 0.47 |
| (1,142) | 1:A:8:ARG:H | 1:A:8:ARG:HB2 | 1 | 0.47 |
| (1,13) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 10 | 0.47 |
| (1,13) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 10 | 0.47 |
| (1,13) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 10 | 0.47 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ARG:HB3 | 9 | 0.47 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ARG:HB3 | 9 | 0.47 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ARG:HB3 | 9 | 0.47 |
| (1,1047) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:29:LEU:HB3 | 12 | 0.47 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB2 | 4 | 0.46 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB3 | 4 | 0.46 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB1 | 4 | 0.46 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB2 | 4 | 0.46 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB3 | 4 | 0.46 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB1 | 4 | 0.46 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB2 | 4 | 0.46 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB3 | 4 | 0.46 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB1 | 4 | 0.46 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HB3 | 4 | 0.46 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HB3 | 4 | 0.46 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HB3 | 4 | 0.46 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB2 | 4 | 0.46 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB3 | 4 | 0.46 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB1 | 4 | 0.46 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB2 | 4 | 0.46 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB3 | 4 | 0.46 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB1 | 4 | 0.46 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB2 | 4 | 0.46 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB3 | 4 | 0.46 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB1 | 4 | 0.46 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB2 | 17 | 0.46 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB3 | 17 | 0.46 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB1 | 17 | 0.46 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB2 | 17 | 0.46 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB3 | 17 | 0.46 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB1 | 17 | 0.46 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB2 | 17 | 0.46 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB3 | 17 | 0.46 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB1 | 17 | 0.46 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HB3 | 17 | 0.46 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HB3 | 17 | 0.46 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HB3 | 17 | 0.46 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB2 | 17 | 0.46 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB3 | 17 | 0.46 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB1 | 17 | 0.46 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB2 | 17 | 0.46 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB3 | 17 | 0.46 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB1 | 17 | 0.46 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB2 | 17 | 0.46 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB3 | 17 | 0.46 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB1 | 17 | 0.46 |
| (1,974) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:57:TRP:HH2 | 16 | 0.46 |
| (1,974) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:57:TRP:HH2 | 16 | 0.46 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,974) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:57:TRP:HH2 | 16 | 0.46 |
| (1,915) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HG3 | 6 | 0.46 |
| (1,815) | 1:A:33:ASN:HD22 | 1:A:33:ASN:HB2 | 18 | 0.46 |
| (1,690) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HB | 11 | 0.46 |
| (1,654) | 1:A:37:GLN:HA | 1:A:37:GLN:HG3 | 14 | 0.46 |
| (1,639) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:44:ASN:HB2 | 7 | 0.46 |
| (1,457) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:9:CYS:HB3 | 6 | 0.46 |
| (1,333) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:54:LYS:HG3 | 16 | 0.46 |
| (1,304) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:20:ARG:HB2 | 10 | 0.46 |
| (1,278) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:67:ASN:HB2 | 10 | 0.46 |
| (1,194) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:50:CYS:HB3 | 19 | 0.46 |
| (1,180) | 1:A:3:VAL:H | 1:A:3:VAL:HG12 | 19 | 0.46 |
| (1,180) | 1:A:3:VAL:H | 1:A:3:VAL:HG11 | 19 | 0.46 |
| (1,180) | 1:A:3:VAL:H | 1:A:3:VAL:HG13 | 19 | 0.46 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HB2 | 8 | 0.46 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HB2 | 8 | 0.46 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HB2 | 8 | 0.46 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HB2 | 14 | 0.46 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HB2 | 14 | 0.46 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HB2 | 14 | 0.46 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ARG:HB3 | 8 | 0.46 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ARG:HB3 | 8 | 0.46 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ARG:HB3 | 8 | 0.46 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:53:PRO:HB2 | 8 | 0.46 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:53:PRO:HB2 | 8 | 0.46 |
| (1,1034) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:53:PRO:HB2 | 8 | 0.46 |
| (1,1023) | 1:A:38:ILE:HG13 | 1:A:38:ILE:HG21 | 7 | 0.46 |
| (1,1023) | 1:A:38:ILE:HG13 | 1:A:38:ILE:HG23 | 7 | 0.46 |
| (1,1023) | 1:A:38:ILE:HG13 | 1:A:38:ILE:HG22 | 7 | 0.46 |
| (3,282) | 1:A:65:ALA:HA | 1:A:28:ILE:HG12 | 14 | 0.45 |
| (3,282) | 1:A:65:ALA:HA | 1:A:66:LEU:HB3 | 14 | 0.45 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:28:ILE:HG12 | 5 | 0.45 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:28:ILE:HG12 | 5 | 0.45 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:28:ILE:HG12 | 5 | 0.45 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:53:PRO:HG2 | 5 | 0.45 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:53:PRO:HG2 | 5 | 0.45 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:53:PRO:HG2 | 5 | 0.45 |
| (3,233) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:10:PRO:HD3 | 3 | 0.45 |
| (3,233) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:32:PRO:HD2 | 3 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB2 | 1 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB3 | 1 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB1 | 1 | 0.45 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB2 | 1 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB3 | 1 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB1 | 1 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB2 | 1 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB3 | 1 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB1 | 1 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HB3 | 1 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HB3 | 1 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HB3 | 1 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB2 | 1 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB3 | 1 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB1 | 1 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB2 | 1 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB3 | 1 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB1 | 1 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB2 | 1 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB3 | 1 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB1 | 1 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB2 | 3 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB3 | 3 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB1 | 3 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB2 | 3 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB3 | 3 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB1 | 3 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB2 | 3 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB3 | 3 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB1 | 3 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HB3 | 3 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HB3 | 3 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HB3 | 3 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB2 | 3 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB3 | 3 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB1 | 3 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB2 | 3 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB3 | 3 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB1 | 3 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB2 | 3 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB3 | 3 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB1 | 3 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB2 | 5 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB3 | 5 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB1 | 5 | 0.45 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB2 | 5 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB3 | 5 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB1 | 5 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB2 | 5 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB3 | 5 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB1 | 5 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HB3 | 5 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HB3 | 5 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HB3 | 5 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB2 | 5 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB3 | 5 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB1 | 5 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB2 | 5 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB3 | 5 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB1 | 5 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB2 | 5 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB3 | 5 | 0.45 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB1 | 5 | 0.45 |
| (3,202) | 1:A:10:PRO:HB3 | 1:A:10:PRO:HD3 | 3 | 0.45 |
| (3,202) | 1:A:2:PRO:HB2 | 1:A:2:PRO:HD2 | 3 | 0.45 |
| (3,202) | 1:A:10:PRO:HB3 | 1:A:10:PRO:HD3 | 6 | 0.45 |
| (3,202) | 1:A:2:PRO:HB2 | 1:A:2:PRO:HD2 | 6 | 0.45 |
| (3,202) | 1:A:10:PRO:HB3 | 1:A:10:PRO:HD3 | 7 | 0.45 |
| (3,202) | 1:A:2:PRO:HB2 | 1:A:2:PRO:HD2 | 7 | 0.45 |
| (3,202) | 1:A:10:PRO:HB3 | 1:A:10:PRO:HD3 | 18 | 0.45 |
| (3,202) | 1:A:2:PRO:HB2 | 1:A:2:PRO:HD2 | 18 | 0.45 |
| (1,915) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HG3 | 10 | 0.45 |
| (1,815) | 1:A:33:ASN:HD22 | 1:A:33:ASN:HB2 | 13 | 0.45 |
| (1,791) | 1:A:30:ASN:HD22 | 1:A:30:ASN:HB3 | 7 | 0.45 |
| (1,791) | 1:A:30:ASN:HD22 | 1:A:30:ASN:HB3 | 13 | 0.45 |
| (1,519) | 1:A:52:ASP:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 17 | 0.45 |
| (1,312) | 1:A:13:PHE:H | 1:A:13:PHE:HB2 | 3 | 0.45 |
| (1,296) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:63:GLU:HB3 | 2 | 0.45 |
| (1,269) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:60:GLU:HG3 | 6 | 0.45 |
| (1,218) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:42:LEU:HB3 | 4 | 0.45 |
| (1,218) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:42:LEU:HB3 | 12 | 0.45 |
| (1,122) | 1:A:28:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG13 | 12 | 0.45 |
| (1,1208) | 1:A:69:GLY:HA2 | 1:A:68:LYS:HB3 | 5 | 0.45 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HB2 | 11 | 0.45 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HB2 | 11 | 0.45 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HB2 | 11 | 0.45 |
| (3,282) | 1:A:65:ALA:HA | 1:A:28:ILE:HG12 | 18 | 0.44 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,282) | 1:A:65:ALA:HA | 1:A:66:LEU:HB3 | 18 | 0.44 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD22 | 1:A:4:SER:HB3 | 16 | 0.44 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD23 | 1:A:4:SER:HB3 | 16 | 0.44 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD21 | 1:A:4:SER:HB3 | 16 | 0.44 |
| (3,231) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:29:LEU:HG | 16 | 0.44 |
| (3,231) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:66:LEU:HG | 16 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB2 | 9 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB3 | 9 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB1 | 9 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB2 | 9 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB3 | 9 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB1 | 9 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB2 | 9 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB3 | 9 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB1 | 9 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HB3 | 9 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HB3 | 9 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HB3 | 9 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB2 | 9 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB3 | 9 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB1 | 9 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB2 | 9 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB3 | 9 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB1 | 9 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB2 | 9 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB3 | 9 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB1 | 9 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB2 | 13 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB3 | 13 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB1 | 13 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB2 | 13 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB3 | 13 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB1 | 13 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB2 | 13 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB3 | 13 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB1 | 13 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HB3 | 13 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HB3 | 13 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HB3 | 13 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB2 | 13 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB3 | 13 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB1 | 13 | 0.44 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB2 | 13 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB3 | 13 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB1 | 13 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB2 | 13 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB3 | 13 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB1 | 13 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB2 | 14 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB3 | 14 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB1 | 14 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB2 | 14 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB3 | 14 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB1 | 14 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB2 | 14 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB3 | 14 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB1 | 14 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HB3 | 14 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HB3 | 14 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HB3 | 14 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB2 | 14 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB3 | 14 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB1 | 14 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB2 | 14 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB3 | 14 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB1 | 14 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB2 | 14 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB3 | 14 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB1 | 14 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB2 | 15 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB3 | 15 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB1 | 15 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB2 | 15 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB3 | 15 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB1 | 15 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB2 | 15 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB3 | 15 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB1 | 15 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HB3 | 15 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HB3 | 15 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HB3 | 15 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB2 | 15 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB3 | 15 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB1 | 15 | 0.44 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB2 | 15 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB3 | 15 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB1 | 15 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB2 | 15 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB3 | 15 | 0.44 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB1 | 15 | 0.44 |
| (3,202) | 1:A:10:PRO:HB3 | 1:A:10:PRO:HD3 | 19 | 0.44 |
| (3,202) | 1:A:2:PRO:HB2 | 1:A:2:PRO:HD2 | 19 | 0.44 |
| (1,915) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HG3 | 8 | 0.44 |
| (1,915) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HG3 | 11 | 0.44 |
| (1,867) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:12:ARG:HD2 | 15 | 0.44 |
| (1,867) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:12:ARG:HD2 | 17 | 0.44 |
| (1,815) | 1:A:33:ASN:HD22 | 1:A:33:ASN:HB2 | 7 | 0.44 |
| (1,815) | 1:A:33:ASN:HD22 | 1:A:33:ASN:HB2 | 19 | 0.44 |
| (1,791) | 1:A:30:ASN:HD22 | 1:A:30:ASN:HB3 | 2 | 0.44 |
| (1,791) | 1:A:30:ASN:HD22 | 1:A:30:ASN:HB3 | 3 | 0.44 |
| (1,791) | 1:A:30:ASN:HD22 | 1:A:30:ASN:HB3 | 11 | 0.44 |
| (1,791) | 1:A:30:ASN:HD22 | 1:A:30:ASN:HB3 | 16 | 0.44 |
| (1,690) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HB | 10 | 0.44 |
| (1,690) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HB | 18 | 0.44 |
| (1,455) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:29:LEU:HB2 | 18 | 0.44 |
| (1,304) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:20:ARG:HB2 | 19 | 0.44 |
| (1,220) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:47:ARG:HG3 | 3 | 0.44 |
| (1,122) | 1:A:28:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG13 | 10 | 0.44 |
| (1,122) | 1:A:28:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG13 | 13 | 0.44 |
| (1,122) | 1:A:28:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG13 | 20 | 0.44 |
| (3,73) | 1:A:29:LEU:H | 1:A:28:ILE:HG13 | 15 | 0.43 |
| (3,73) | 1:A:29:LEU:H | 1:A:38:ILE:HG12 | 15 | 0.43 |
| (3,35) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:46:ASN:HB2 | 9 | 0.43 |
| (3,35) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:47:ARG:HD2 | 9 | 0.43 |
| (3,35) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:46:ASN:HB2 | 15 | 0.43 |
| (3,35) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:47:ARG:HD2 | 15 | 0.43 |
| (3,31) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:50:CYS:HB3 | 9 | 0.43 |
| (3,31) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:52:ASP:HA | 9 | 0.43 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:28:ILE:HG12 | 11 | 0.43 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:28:ILE:HG12 | 11 | 0.43 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:28:ILE:HG12 | 11 | 0.43 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:53:PRO:HG2 | 11 | 0.43 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:53:PRO:HG2 | 11 | 0.43 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:53:PRO:HG2 | 11 | 0.43 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:28:ILE:HG12 | 17 | 0.43 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:28:ILE:HG12 | 17 | 0.43 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:28:ILE:HG12 | 17 | 0.43 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:53:PRO:HG2 | 17 | 0.43 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:53:PRO:HG2 | 17 | 0.43 |
| (3,243) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:53:PRO:HG2 | 17 | 0.43 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD22 | 1:A:4:SER:HB3 | 18 | 0.43 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD23 | 1:A:4:SER:HB3 | 18 | 0.43 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD21 | 1:A:4:SER:HB3 | 18 | 0.43 |
| (3,231) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:29:LEU:HG | 18 | 0.43 |
| (3,231) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:66:LEU:HG | 18 | 0.43 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB2 | 18 | 0.43 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB3 | 18 | 0.43 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB1 | 18 | 0.43 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB2 | 18 | 0.43 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB3 | 18 | 0.43 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB1 | 18 | 0.43 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB2 | 18 | 0.43 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB3 | 18 | 0.43 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB1 | 18 | 0.43 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HB3 | 18 | 0.43 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HB3 | 18 | 0.43 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HB3 | 18 | 0.43 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB2 | 18 | 0.43 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB3 | 18 | 0.43 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB1 | 18 | 0.43 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB2 | 18 | 0.43 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB3 | 18 | 0.43 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB1 | 18 | 0.43 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB2 | 18 | 0.43 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB3 | 18 | 0.43 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB1 | 18 | 0.43 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB2 | 20 | 0.43 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB3 | 20 | 0.43 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB1 | 20 | 0.43 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB2 | 20 | 0.43 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB3 | 20 | 0.43 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB1 | 20 | 0.43 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB2 | 20 | 0.43 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB3 | 20 | 0.43 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB1 | 20 | 0.43 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HB3 | 20 | 0.43 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HB3 | 20 | 0.43 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HB3 | 20 | 0.43 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB2 | 20 | 0.43 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB3 | 20 | 0.43 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB1 | 20 | 0.43 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB2 | 20 | 0.43 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB3 | 20 | 0.43 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB1 | 20 | 0.43 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB2 | 20 | 0.43 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB3 | 20 | 0.43 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB1 | 20 | 0.43 |
| (3,202) | 1:A:10:PRO:HB3 | 1:A:10:PRO:HD3 | 8 | 0.43 |
| (3,202) | 1:A:2:PRO:HB2 | 1:A:2:PRO:HD2 | 8 | 0.43 |
| (3,202) | 1:A:10:PRO:HB3 | 1:A:10:PRO:HD3 | 13 | 0.43 |
| (3,202) | 1:A:2:PRO:HB2 | 1:A:2:PRO:HD2 | 13 | 0.43 |
| (3,169) | 1:A:7:TYR:HB3 | 1:A:8:ARG:HB2 | 3 | 0.43 |
| (3,169) | 1:A:67:ASN:HB3 | 1:A:68:LYS:HD2 | 3 | 0.43 |
| (1,920) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:49:VAL:HG11 | 14 | 0.43 |
| (1,920) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:49:VAL:HG13 | 14 | 0.43 |
| (1,920) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:49:VAL:HG12 | 14 | 0.43 |
| (1,88) | 1:A:42:LEU:H | 1:A:42:LEU:HB3 | 20 | 0.43 |
| (1,815) | 1:A:33:ASN:HD22 | 1:A:33:ASN:HB2 | 8 | 0.43 |
| (1,791) | 1:A:30:ASN:HD22 | 1:A:30:ASN:HB3 | 4 | 0.43 |
| (1,791) | 1:A:30:ASN:HD22 | 1:A:30:ASN:HB3 | 5 | 0.43 |
| (1,791) | 1:A:30:ASN:HD22 | 1:A:30:ASN:HB3 | 8 | 0.43 |
| (1,791) | 1:A:30:ASN:HD22 | 1:A:30:ASN:HB3 | 9 | 0.43 |
| (1,791) | 1:A:30:ASN:HD22 | 1:A:30:ASN:HB3 | 14 | 0.43 |
| (1,791) | 1:A:30:ASN:HD22 | 1:A:30:ASN:HB3 | 19 | 0.43 |
| (1,687) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG23 | 17 | 0.43 |
| (1,687) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG21 | 17 | 0.43 |
| (1,687) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG22 | 17 | 0.43 |
| (1,684) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:10:PRO:HD3 | 12 | 0.43 |
| (1,531) | 1:A:57:TRP:HE1 | 1:A:20:ARG:HB3 | 9 | 0.43 |
| (1,519) | 1:A:52:ASP:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 19 | 0.43 |
| (1,457) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:9:CYS:HB3 | 7 | 0.43 |
| (1,416) | 1:A:28:ILE:H | 1:A:27:LYS:HD2 | 8 | 0.43 |
| (1,312) | 1:A:13:PHE:H | 1:A:13:PHE:HB2 | 13 | 0.43 |
| (1,304) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:20:ARG:HB2 | 6 | 0.43 |
| (1,304) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:20:ARG:HB2 | 7 | 0.43 |
| (1,298) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:64:LYS:HG3 | 16 | 0.43 |
| (1,286) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:67:ASN:HB2 | 10 | 0.43 |
| (1,218) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:42:LEU:HB3 | 8 | 0.43 |
| (1,194) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:50:CYS:HB3 | 16 | 0.43 |
| (1,149) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:14:PHE:HB2 | 18 | 0.43 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,122) | 1:A:28:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG13 | 14 | 0.43 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HB2 | 19 | 0.43 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HB2 | 19 | 0.43 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HB2 | 19 | 0.43 |
| (3,35) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:46:ASN:HB2 | 19 | 0.42 |
| (3,35) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:47:ARG:HD2 | 19 | 0.42 |
| (3,279) | 1:A:22:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD21 | 19 | 0.42 |
| (3,279) | 1:A:22:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD23 | 19 | 0.42 |
| (3,279) | 1:A:22:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD22 | 19 | 0.42 |
| (3,279) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:61:TYR:HD2 | 19 | 0.42 |
| (3,279) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:61:TYR:HD2 | 19 | 0.42 |
| (3,279) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:61:TYR:HD2 | 19 | 0.42 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD22 | 1:A:4:SER:HB3 | 13 | 0.42 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD23 | 1:A:4:SER:HB3 | 13 | 0.42 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD21 | 1:A:4:SER:HB3 | 13 | 0.42 |
| (3,231) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:29:LEU:HG | 13 | 0.42 |
| (3,231) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:66:LEU:HG | 13 | 0.42 |
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:23:VAL:HG13 | 10 | 0.42 |
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:23:VAL:HG11 | 10 | 0.42 |
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:23:VAL:HG12 | 10 | 0.42 |
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:23:VAL:HG13 | 10 | 0.42 |
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:23:VAL:HG11 | 10 | 0.42 |
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:23:VAL:HG12 | 10 | 0.42 |
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:23:VAL:HG13 | 10 | 0.42 |
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:23:VAL:HG11 | 10 | 0.42 |
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:23:VAL:HG12 | 10 | 0.42 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:26:LEU:HD22 | 10 | 0.42 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:26:LEU:HD21 | 10 | 0.42 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:26:LEU:HD23 | 10 | 0.42 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:26:LEU:HD22 | 10 | 0.42 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:26:LEU:HD21 | 10 | 0.42 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:26:LEU:HD23 | 10 | 0.42 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:26:LEU:HD22 | 10 | 0.42 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:26:LEU:HD21 | 10 | 0.42 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:26:LEU:HD23 | 10 | 0.42 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB2 | 8 | 0.42 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB3 | 8 | 0.42 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB1 | 8 | 0.42 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB2 | 8 | 0.42 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB3 | 8 | 0.42 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB1 | 8 | 0.42 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB2 | 8 | 0.42 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB3 | 8 | 0.42 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB1 | 8 | 0.42 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HB3 | 8 | 0.42 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HB3 | 8 | 0.42 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HB3 | 8 | 0.42 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB2 | 8 | 0.42 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB3 | 8 | 0.42 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB1 | 8 | 0.42 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB2 | 8 | 0.42 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB3 | 8 | 0.42 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB1 | 8 | 0.42 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB2 | 8 | 0.42 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB3 | 8 | 0.42 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB1 | 8 | 0.42 |
| (3,202) | 1:A:10:PRO:HB3 | 1:A:10:PRO:HD3 | 1 | 0.42 |
| (3,202) | 1:A:2:PRO:HB2 | 1:A:2:PRO:HD2 | 1 | 0.42 |
| (3,202) | 1:A:10:PRO:HB3 | 1:A:10:PRO:HD3 | 5 | 0.42 |
| (3,202) | 1:A:2:PRO:HB2 | 1:A:2:PRO:HD2 | 5 | 0.42 |
| (3,202) | 1:A:10:PRO:HB3 | 1:A:10:PRO:HD3 | 9 | 0.42 |
| (3,202) | 1:A:2:PRO:HB2 | 1:A:2:PRO:HD2 | 9 | 0.42 |
| (3,202) | 1:A:10:PRO:HB3 | 1:A:10:PRO:HD3 | 14 | 0.42 |
| (3,202) | 1:A:2:PRO:HB2 | 1:A:2:PRO:HD2 | 14 | 0.42 |
| (3,124) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD13 | 1 | 0.42 |
| (3,124) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD12 | 1 | 0.42 |
| (3,124) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD11 | 1 | 0.42 |
| (3,124) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD22 | 1 | 0.42 |
| (3,124) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD23 | 1 | 0.42 |
| (3,124) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD21 | 1 | 0.42 |
| (3,124) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD13 | 6 | 0.42 |
| (3,124) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD12 | 6 | 0.42 |
| (3,124) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD11 | 6 | 0.42 |
| (3,124) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD22 | 6 | 0.42 |
| (3,124) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD23 | 6 | 0.42 |
| (3,124) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD21 | 6 | 0.42 |
| (3,124) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD13 | 12 | 0.42 |
| (3,124) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD12 | 12 | 0.42 |
| (3,124) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD11 | 12 | 0.42 |
| (3,124) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD22 | 12 | 0.42 |
| (3,124) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD23 | 12 | 0.42 |
| (3,124) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD21 | 12 | 0.42 |
| (1,924) | 1:A:16:SER:HB3 | 1:A:55:LEU:HD21 | 19 | 0.42 |
| (1,924) | 1:A:16:SER:HB3 | 1:A:55:LEU:HD22 | 19 | 0.42 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,924) | 1:A:16:SER:HB3 | 1:A:55:LEU:HD23 | 19 | 0.42 |
| (1,915) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HG3 | 1 | 0.42 |
| (1,90) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HD12 | 6 | 0.42 |
| (1,90) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HD11 | 6 | 0.42 |
| (1,90) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HD13 | 6 | 0.42 |
| (1,690) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HB | 1 | 0.42 |
| (1,690) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HB | 6 | 0.42 |
| (1,690) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HB | 15 | 0.42 |
| (1,687) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG23 | 16 | 0.42 |
| (1,687) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG21 | 16 | 0.42 |
| (1,687) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG22 | 16 | 0.42 |
| (1,685) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:9:CYS:HB2 | 4 | 0.42 |
| (1,628) | 1:A:15:GLU:HA | 1:A:15:GLU:HG2 | 4 | 0.42 |
| (1,62) | 1:A:56:LYS:H | 1:A:56:LYS:HD2 | 11 | 0.42 |
| (1,575) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:24:LYS:HD2 | 17 | 0.42 |
| (1,1023) | 1:A:38:ILE:HG13 | 1:A:38:ILE:HG21 | 4 | 0.42 |
| (1,1023) | 1:A:38:ILE:HG13 | 1:A:38:ILE:HG23 | 4 | 0.42 |
| (1,1023) | 1:A:38:ILE:HG13 | 1:A:38:ILE:HG22 | 4 | 0.42 |
| (1,1023) | 1:A:38:ILE:HG13 | 1:A:38:ILE:HG21 | 20 | 0.42 |
| (1,1023) | 1:A:38:ILE:HG13 | 1:A:38:ILE:HG23 | 20 | 0.42 |
| (1,1023) | 1:A:38:ILE:HG13 | 1:A:38:ILE:HG22 | 20 | 0.42 |
| (3,202) | 1:A:10:PRO:HB3 | 1:A:10:PRO:HD3 | 16 | 0.41 |
| (3,202) | 1:A:2:PRO:HB2 | 1:A:2:PRO:HD2 | 16 | 0.41 |
| (3,143) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:11:CYS:HB2 | 15 | 0.41 |
| (3,143) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:14:PHE:HB2 | 15 | 0.41 |
| (1,882) | 1:A:54:LYS:HD2 | 1:A:54:LYS:HA | 13 | 0.41 |
| (1,88) | 1:A:42:LEU:H | 1:A:42:LEU:HB3 | 10 | 0.41 |
| (1,88) | 1:A:42:LEU:H | 1:A:42:LEU:HB3 | 14 | 0.41 |
| (1,848) | 1:A:41:ARG:HD3 | 1:A:41:ARG:HB2 | 17 | 0.41 |
| (1,690) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HB | 8 | 0.41 |
| (1,685) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:9:CYS:HB2 | 20 | 0.41 |
| (1,660) | 1:A:41:ARG:HA | 1:A:41:ARG:HD3 | 6 | 0.41 |
| (1,628) | 1:A:15:GLU:HA | 1:A:15:GLU:HG2 | 5 | 0.41 |
| (1,593) | 1:A:8:ARG:H | 1:A:7:TYR:HA | 6 | 0.41 |
| (1,591) | 1:A:6:SER:HA | 1:A:6:SER:HB2 | 7 | 0.41 |
| (1,591) | 1:A:6:SER:HA | 1:A:6:SER:HB2 | 14 | 0.41 |
| (1,591) | 1:A:6:SER:HA | 1:A:6:SER:HB2 | 19 | 0.41 |
| (1,304) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:20:ARG:HB2 | 12 | 0.41 |
| (1,298) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:64:LYS:HG3 | 3 | 0.41 |
| (1,296) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:63:GLU:HB3 | 19 | 0.41 |
| (1,276) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:68:LYS:H | 17 | 0.41 |
| (1,254) | 1:A:16:SER:H | 1:A:15:GLU:HB2 | 3 | 0.41 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,254) | 1:A:16:SER:H | 1:A:15:GLU:HB2 | 16 | 0.41 |
| (1,194) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:50:CYS:HB3 | 1 | 0.41 |
| (1,194) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:50:CYS:HB3 | 3 | 0.41 |
| (1,194) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:50:CYS:HB3 | 10 | 0.41 |
| (1,194) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:50:CYS:HB3 | 15 | 0.41 |
| (1,194) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:50:CYS:HB3 | 20 | 0.41 |
| (1,142) | 1:A:8:ARG:H | 1:A:8:ARG:HB2 | 11 | 0.41 |
| (1,122) | 1:A:28:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG13 | 4 | 0.41 |
| (1,122) | 1:A:28:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG13 | 9 | 0.41 |
| (1,1208) | 1:A:69:GLY:HA2 | 1:A:68:LYS:HB3 | 18 | 0.41 |
| (1,1047) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:29:LEU:HB3 | 11 | 0.41 |
| (3,286) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:68:LYS:HD2 | 14 | 0.4 |
| (3,286) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:64:LYS:HD2 | 14 | 0.4 |
| (3,286) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:66:LEU:HB3 | 14 | 0.4 |
| (3,282) | 1:A:65:ALA:HA | 1:A:28:ILE:HG12 | 20 | 0.4 |
| (3,282) | 1:A:65:ALA:HA | 1:A:66:LEU:HB3 | 20 | 0.4 |
| (3,266) | 1:A:57:TRP:HA | 1:A:60:GLU:HG2 | 10 | 0.4 |
| (3,266) | 1:A:57:TRP:HA | 1:A:59:GLN:HB2 | 10 | 0.4 |
| (3,248) | 1:A:39:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HA | 2 | 0.4 |
| (3,248) | 1:A:39:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HA | 2 | 0.4 |
| (3,248) | 1:A:39:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HA | 2 | 0.4 |
| (3,248) | 1:A:39:VAL:HG23 | 1:A:40:ALA:HA | 2 | 0.4 |
| (3,248) | 1:A:39:VAL:HG21 | 1:A:40:ALA:HA | 2 | 0.4 |
| (3,248) | 1:A:39:VAL:HG22 | 1:A:40:ALA:HA | 2 | 0.4 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD22 | 1:A:4:SER:HB3 | 19 | 0.4 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD23 | 1:A:4:SER:HB3 | 19 | 0.4 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD21 | 1:A:4:SER:HB3 | 19 | 0.4 |
| (3,231) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:29:LEU:HG | 19 | 0.4 |
| (3,231) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:66:LEU:HG | 19 | 0.4 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB2 | 10 | 0.4 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB3 | 10 | 0.4 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB1 | 10 | 0.4 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB2 | 10 | 0.4 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB3 | 10 | 0.4 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB1 | 10 | 0.4 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB2 | 10 | 0.4 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB3 | 10 | 0.4 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB1 | 10 | 0.4 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HB3 | 10 | 0.4 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HB3 | 10 | 0.4 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HB3 | 10 | 0.4 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB2 | 10 | 0.4 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB3 | 10 | 0.4 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB1 | 10 | 0.4 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB2 | 10 | 0.4 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB3 | 10 | 0.4 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB1 | 10 | 0.4 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB2 | 10 | 0.4 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB3 | 10 | 0.4 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB1 | 10 | 0.4 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB2 | 19 | 0.4 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB3 | 19 | 0.4 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB1 | 19 | 0.4 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB2 | 19 | 0.4 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB3 | 19 | 0.4 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB1 | 19 | 0.4 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB2 | 19 | 0.4 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB3 | 19 | 0.4 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB1 | 19 | 0.4 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HB3 | 19 | 0.4 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HB3 | 19 | 0.4 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HB3 | 19 | 0.4 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB2 | 19 | 0.4 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB3 | 19 | 0.4 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB1 | 19 | 0.4 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB2 | 19 | 0.4 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB3 | 19 | 0.4 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB1 | 19 | 0.4 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB2 | 19 | 0.4 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB3 | 19 | 0.4 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB1 | 19 | 0.4 |
| (3,121) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HB2 | 2 | 0.4 |
| (3,121) | 1:A:47:ARG:HA | 1:A:47:ARG:HG3 | 2 | 0.4 |
| (1,88) | 1:A:42:LEU:H | 1:A:42:LEU:HB3 | 4 | 0.4 |
| (1,88) | 1:A:42:LEU:H | 1:A:42:LEU:HB3 | 11 | 0.4 |
| (1,88) | 1:A:42:LEU:H | 1:A:42:LEU:HB3 | 12 | 0.4 |
| (1,88) | 1:A:42:LEU:H | 1:A:42:LEU:HB3 | 16 | 0.4 |
| (1,88) | 1:A:42:LEU:H | 1:A:42:LEU:HB3 | 17 | 0.4 |
| (1,867) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:12:ARG:HD2 | 3 | 0.4 |
| (1,848) | 1:A:41:ARG:HD3 | 1:A:41:ARG:HB2 | 6 | 0.4 |
| (1,734) | 1:A:56:LYS:HE3 | 1:A:56:LYS:HD2 | 9 | 0.4 |
| (1,62) | 1:A:56:LYS:H | 1:A:56:LYS:HD2 | 16 | 0.4 |
| (1,591) | 1:A:6:SER:HA | 1:A:6:SER:HB2 | 8 | 0.4 |
| (1,591) | 1:A:6:SER:HA | 1:A:6:SER:HB2 | 12 | 0.4 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,509) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:41:ARG:HD3 | 5 | 0.4 |
| (1,494) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:47:ARG:HB3 | 17 | 0.4 |
| (1,474) | 1:A:39:VAL:H | 1:A:26:LEU:HD12 | 10 | 0.4 |
| (1,474) | 1:A:39:VAL:H | 1:A:26:LEU:HD11 | 10 | 0.4 |
| (1,474) | 1:A:39:VAL:H | 1:A:26:LEU:HD13 | 10 | 0.4 |
| (1,389) | 1:A:19:ALA:H | 1:A:18:ILE:HG13 | 20 | 0.4 |
| (1,334) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:53:PRO:HD3 | 6 | 0.4 |
| (1,286) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:67:ASN:HB2 | 7 | 0.4 |
| (1,279) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HB3 | 7 | 0.4 |
| (1,278) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:67:ASN:HB2 | 18 | 0.4 |
| (1,254) | 1:A:16:SER:H | 1:A:15:GLU:HB2 | 17 | 0.4 |
| (1,220) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:47:ARG:HG3 | 12 | 0.4 |
| (1,217) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:45:ASN:HB2 | 5 | 0.4 |
| (1,217) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:45:ASN:HB2 | 10 | 0.4 |
| (1,194) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:50:CYS:HB3 | 2 | 0.4 |
| (1,142) | 1:A:8:ARG:H | 1:A:8:ARG:HB2 | 13 | 0.4 |
| (1,122) | 1:A:28:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG13 | 8 | 0.4 |
| (1,1158) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:58:ILE:HA | 13 | 0.4 |
| (3,75) | 1:A:31:THR:H | 1:A:33:ASN:HD22 | 6 | 0.39 |
| (3,75) | 1:A:31:THR:H | 1:A:37:GLN:HE21 | 6 | 0.39 |
| (3,75) | 1:A:31:THR:H | 1:A:33:ASN:HD22 | 18 | 0.39 |
| (3,75) | 1:A:31:THR:H | 1:A:37:GLN:HE21 | 18 | 0.39 |
| (3,219) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HB3 | 2 | 0.39 |
| (3,219) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HB3 | 2 | 0.39 |
| (3,219) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HB3 | 2 | 0.39 |
| (3,219) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:26:LEU:HB3 | 2 | 0.39 |
| (3,219) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:26:LEU:HB3 | 2 | 0.39 |
| (3,219) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:26:LEU:HB3 | 2 | 0.39 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB2 | 2 | 0.39 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB3 | 2 | 0.39 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB1 | 2 | 0.39 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB2 | 2 | 0.39 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB3 | 2 | 0.39 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB1 | 2 | 0.39 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB2 | 2 | 0.39 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB3 | 2 | 0.39 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB1 | 2 | 0.39 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HB3 | 2 | 0.39 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HB3 | 2 | 0.39 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HB3 | 2 | 0.39 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB2 | 2 | 0.39 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB3 | 2 | 0.39 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB1 | 2 | 0.39 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB2 | 2 | 0.39 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB3 | 2 | 0.39 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB1 | 2 | 0.39 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB2 | 2 | 0.39 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB3 | 2 | 0.39 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB1 | 2 | 0.39 |
| (3,143) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:11:CYS:HB2 | 7 | 0.39 |
| (3,143) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:14:PHE:HB2 | 7 | 0.39 |
| (3,143) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:11:CYS:HB2 | 9 | 0.39 |
| (3,143) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:14:PHE:HB2 | 9 | 0.39 |
| (1,915) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HG3 | 17 | 0.39 |
| (1,88) | 1:A:42:LEU:H | 1:A:42:LEU:HB3 | 3 | 0.39 |
| (1,88) | 1:A:42:LEU:H | 1:A:42:LEU:HB3 | 5 | 0.39 |
| (1,88) | 1:A:42:LEU:H | 1:A:42:LEU:HB3 | 6 | 0.39 |
| (1,88) | 1:A:42:LEU:H | 1:A:42:LEU:HB3 | 9 | 0.39 |
| (1,88) | 1:A:42:LEU:H | 1:A:42:LEU:HB3 | 13 | 0.39 |
| (1,88) | 1:A:42:LEU:H | 1:A:42:LEU:HB3 | 18 | 0.39 |
| (1,867) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:12:ARG:HD2 | 6 | 0.39 |
| (1,815) | 1:A:33:ASN:HD22 | 1:A:33:ASN:HB2 | 11 | 0.39 |
| (1,76) | 1:A:5:LEU:H | 1:A:5:LEU:HB3 | 17 | 0.39 |
| (1,734) | 1:A:56:LYS:HE3 | 1:A:56:LYS:HD2 | 2 | 0.39 |
| (1,734) | 1:A:56:LYS:HE3 | 1:A:56:LYS:HD2 | 16 | 0.39 |
| (1,734) | 1:A:56:LYS:HE3 | 1:A:56:LYS:HD2 | 20 | 0.39 |
| (1,690) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HB | 20 | 0.39 |
| (1,592) | 1:A:64:LYS:HA | 1:A:67:ASN:HB2 | 7 | 0.39 |
| (1,570) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:63:GLU:HG3 | 10 | 0.39 |
| (1,531) | 1:A:57:TRP:HE1 | 1:A:20:ARG:HB3 | 10 | 0.39 |
| (1,480) | 1:A:44:ASN:H | 1:A:43:LYS:HD2 | 15 | 0.39 |
| (1,474) | 1:A:39:VAL:H | 1:A:26:LEU:HD12 | 2 | 0.39 |
| (1,474) | 1:A:39:VAL:H | 1:A:26:LEU:HD11 | 2 | 0.39 |
| (1,474) | 1:A:39:VAL:H | 1:A:26:LEU:HD13 | 2 | 0.39 |
| (1,457) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:9:CYS:HB3 | 12 | 0.39 |
| (1,334) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:53:PRO:HD3 | 1 | 0.39 |
| (1,334) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:53:PRO:HD3 | 7 | 0.39 |
| (1,334) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:53:PRO:HD3 | 17 | 0.39 |
| (1,279) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HB3 | 10 | 0.39 |
| (1,279) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HB3 | 18 | 0.39 |
| (1,276) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:68:LYS:H | 15 | 0.39 |
| (1,254) | 1:A:16:SER:H | 1:A:15:GLU:HB2 | 8 | 0.39 |
| (1,194) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:50:CYS:HB3 | 7 | 0.39 |
| (1,194) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:50:CYS:HB3 | 14 | 0.39 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,142) | 1:A:8:ARG:H | 1:A:8:ARG:HB2 | 15 | 0.39 |
| (1,139) | 1:A:8:ARG:H | 1:A:8:ARG:HG3 | 4 | 0.39 |
| (1,122) | 1:A:28:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG13 | 15 | 0.39 |
| (1,122) | 1:A:28:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG13 | 17 | 0.39 |
| (1,122) | 1:A:28:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG13 | 18 | 0.39 |
| (1,122) | 1:A:28:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG13 | 19 | 0.39 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HB2 | 2 | 0.39 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HB2 | 2 | 0.39 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HB2 | 2 | 0.39 |
| (3,73) | 1:A:29:LEU:H | 1:A:28:ILE:HG13 | 14 | 0.38 |
| (3,73) | 1:A:29:LEU:H | 1:A:38:ILE:HG12 | 14 | 0.38 |
| (3,69) | 1:A:22:ASN:HD21 | 1:A:42:LEU:HB2 | 2 | 0.38 |
| (3,69) | 1:A:22:ASN:HD21 | 1:A:43:LYS:HD2 | 2 | 0.38 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB2 | 7 | 0.38 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB3 | 7 | 0.38 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:19:ALA:HB1 | 7 | 0.38 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB2 | 7 | 0.38 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB3 | 7 | 0.38 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:19:ALA:HB1 | 7 | 0.38 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB2 | 7 | 0.38 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB3 | 7 | 0.38 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:19:ALA:HB1 | 7 | 0.38 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HB3 | 7 | 0.38 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HB3 | 7 | 0.38 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HB3 | 7 | 0.38 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB2 | 7 | 0.38 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB3 | 7 | 0.38 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:40:ALA:HB1 | 7 | 0.38 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB2 | 7 | 0.38 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB3 | 7 | 0.38 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:40:ALA:HB1 | 7 | 0.38 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB2 | 7 | 0.38 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB3 | 7 | 0.38 |
| (3,215) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:40:ALA:HB1 | 7 | 0.38 |
| (3,134) | 1:A:41:ARG:HA | 1:A:42:LEU:HB3 | 2 | 0.38 |
| (3,134) | 1:A:41:ARG:HA | 1:A:48:GLN:HG2 | 2 | 0.38 |
| (3,134) | 1:A:41:ARG:HA | 1:A:48:GLN:HG3 | 2 | 0.38 |
| (1,90) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HD12 | 2 | 0.38 |
| (1,90) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HD11 | 2 | 0.38 |
| (1,90) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HD13 | 2 | 0.38 |
| (1,90) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HD12 | 16 | 0.38 |
| (1,90) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HD11 | 16 | 0.38 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,90) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HD13 | 16 | 0.38 |
| (1,88) | 1:A:42:LEU:H | 1:A:42:LEU:HB3 | 1 | 0.38 |
| (1,88) | 1:A:42:LEU:H | 1:A:42:LEU:HB3 | 2 | 0.38 |
| (1,88) | 1:A:42:LEU:H | 1:A:42:LEU:HB3 | 8 | 0.38 |
| (1,88) | 1:A:42:LEU:H | 1:A:42:LEU:HB3 | 19 | 0.38 |
| (1,867) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:12:ARG:HD2 | 18 | 0.38 |
| (1,815) | 1:A:33:ASN:HD22 | 1:A:33:ASN:HB2 | 2 | 0.38 |
| (1,790) | 1:A:31:THR:H | 1:A:30:ASN:HB3 | 2 | 0.38 |
| (1,706) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:50:CYS:HB2 | 15 | 0.38 |
| (1,592) | 1:A:64:LYS:HA | 1:A:67:ASN:HB2 | 10 | 0.38 |
| (1,570) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:63:GLU:HG3 | 18 | 0.38 |
| (1,521) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:54:LYS:HE3 | 16 | 0.38 |
| (1,474) | 1:A:39:VAL:H | 1:A:26:LEU:HD12 | 16 | 0.38 |
| (1,474) | 1:A:39:VAL:H | 1:A:26:LEU:HD11 | 16 | 0.38 |
| (1,474) | 1:A:39:VAL:H | 1:A:26:LEU:HD13 | 16 | 0.38 |
| (1,389) | 1:A:19:ALA:H | 1:A:18:ILE:HG13 | 2 | 0.38 |
| (1,334) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:53:PRO:HD3 | 19 | 0.38 |
| (1,333) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:54:LYS:HG3 | 1 | 0.38 |
| (1,278) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:67:ASN:HB2 | 9 | 0.38 |
| (1,276) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:68:LYS:H | 3 | 0.38 |
| (1,254) | 1:A:16:SER:H | 1:A:15:GLU:HB2 | 20 | 0.38 |
| (1,218) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:42:LEU:HB3 | 10 | 0.38 |
| (1,194) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:50:CYS:HB3 | 4 | 0.38 |
| (1,194) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:50:CYS:HB3 | 11 | 0.38 |
| (1,194) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:50:CYS:HB3 | 17 | 0.38 |
| (1,122) | 1:A:28:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG13 | 11 | 0.38 |
| (1,1204) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:28:ILE:HG12 | 2 | 0.38 |
| (1,1204) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:28:ILE:HG12 | 2 | 0.38 |
| (1,1204) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:28:ILE:HG12 | 2 | 0.38 |
| (3,282) | 1:A:65:ALA:HA | 1:A:28:ILE:HG12 | 12 | 0.37 |
| (3,282) | 1:A:65:ALA:HA | 1:A:66:LEU:HB3 | 12 | 0.37 |
| (3,202) | 1:A:10:PRO:HB3 | 1:A:10:PRO:HD3 | 17 | 0.37 |
| (3,202) | 1:A:2:PRO:HB2 | 1:A:2:PRO:HD2 | 17 | 0.37 |
| (3,157) | 1:A:5:LEU:HB3 | 1:A:7:TYR:H | 1 | 0.37 |
| (3,157) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HB2 | 1 | 0.37 |
| (3,153) | 1:A:41:ARG:HA | 1:A:41:ARG:HD3 | 5 | 0.37 |
| (3,153) | 1:A:41:ARG:HD3 | 1:A:48:GLN:HA | 5 | 0.37 |
| (3,144) | 1:A:50:CYS:HB2 | 1:A:11:CYS:HB2 | 4 | 0.37 |
| (3,144) | 1:A:50:CYS:HB2 | 1:A:14:PHE:HB2 | 4 | 0.37 |
| (3,144) | 1:A:50:CYS:HB2 | 1:A:11:CYS:HB2 | 17 | 0.37 |
| (3,144) | 1:A:50:CYS:HB2 | 1:A:14:PHE:HB2 | 17 | 0.37 |
| (3,121) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HB2 | 4 | 0.37 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,121) | 1:A:47:ARG:HA | 1:A:47:ARG:HG3 | 4 | 0.37 |
| (3,121) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HB2 | 14 | 0.37 |
| (3,121) | 1:A:47:ARG:HA | 1:A:47:ARG:HG3 | 14 | 0.37 |
| (1,848) | 1:A:41:ARG:HD3 | 1:A:41:ARG:HB2 | 5 | 0.37 |
| (1,76) | 1:A:5:LEU:H | 1:A:5:LEU:HB3 | 13 | 0.37 |
| (1,76) | 1:A:5:LEU:H | 1:A:5:LEU:HB3 | 14 | 0.37 |
| (1,706) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:50:CYS:HB2 | 19 | 0.37 |
| (1,690) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HB | 7 | 0.37 |
| (1,690) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HB | 9 | 0.37 |
| (1,572) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:43:LYS:HB3 | 4 | 0.37 |
| (1,572) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:43:LYS:HB3 | 5 | 0.37 |
| (1,519) | 1:A:52:ASP:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 11 | 0.37 |
| (1,334) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:53:PRO:HD3 | 3 | 0.37 |
| (1,334) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:53:PRO:HD3 | 10 | 0.37 |
| (1,334) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:53:PRO:HD3 | 16 | 0.37 |
| (1,254) | 1:A:16:SER:H | 1:A:15:GLU:HB2 | 2 | 0.37 |
| (1,254) | 1:A:16:SER:H | 1:A:15:GLU:HB2 | 10 | 0.37 |
| (1,139) | 1:A:8:ARG:H | 1:A:8:ARG:HG3 | 13 | 0.37 |
| (1,1204) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:28:ILE:HG12 | 9 | 0.37 |
| (1,1204) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:28:ILE:HG12 | 9 | 0.37 |
| (1,1204) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:28:ILE:HG12 | 9 | 0.37 |
| (1,1158) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:58:ILE:HA | 9 | 0.37 |
| (1,1101) | 1:A:48:GLN:HB3 | 1:A:39:VAL:HG23 | 15 | 0.37 |
| (1,1101) | 1:A:48:GLN:HB3 | 1:A:39:VAL:HG21 | 15 | 0.37 |
| (1,1101) | 1:A:48:GLN:HB3 | 1:A:39:VAL:HG22 | 15 | 0.37 |
| (1,1047) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:29:LEU:HB3 | 5 | 0.37 |
| (1,1047) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:29:LEU:HB3 | 13 | 0.37 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:24:LYS:HB3 | 16 | 0.36 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:24:LYS:HD2 | 16 | 0.36 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:41:ARG:HB2 | 16 | 0.36 |
| (3,246) | 1:A:39:VAL:HA | 1:A:29:LEU:HB3 | 18 | 0.36 |
| (3,246) | 1:A:39:VAL:HA | 1:A:27:LYS:HB3 | 18 | 0.36 |
| (3,156) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HG2 | 18 | 0.36 |
| (3,156) | 1:A:43:LYS:HE2 | 1:A:43:LYS:HG3 | 18 | 0.36 |
| (3,144) | 1:A:50:CYS:HB2 | 1:A:11:CYS:HB2 | 11 | 0.36 |
| (3,144) | 1:A:50:CYS:HB2 | 1:A:14:PHE:HB2 | 11 | 0.36 |
| (3,143) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:11:CYS:HB2 | 5 | 0.36 |
| (3,143) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:14:PHE:HB2 | 5 | 0.36 |
| (3,121) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HB2 | 3 | 0.36 |
| (3,121) | 1:A:47:ARG:HA | 1:A:47:ARG:HG3 | 3 | 0.36 |
| (3,121) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HB2 | 19 | 0.36 |
| (3,121) | 1:A:47:ARG:HA | 1:A:47:ARG:HG3 | 19 | 0.36 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,973) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:61:TYR:HD2 | 10 | 0.36 |
| (1,973) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:61:TYR:HD2 | 10 | 0.36 |
| (1,973) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:61:TYR:HD2 | 10 | 0.36 |
| (1,867) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:12:ARG:HD2 | 8 | 0.36 |
| (1,867) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:12:ARG:HD2 | 10 | 0.36 |
| (1,867) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:12:ARG:HD2 | 11 | 0.36 |
| (1,76) | 1:A:5:LEU:H | 1:A:5:LEU:HB3 | 2 | 0.36 |
| (1,76) | 1:A:5:LEU:H | 1:A:5:LEU:HB3 | 15 | 0.36 |
| (1,706) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:50:CYS:HB2 | 18 | 0.36 |
| (1,690) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HB | 14 | 0.36 |
| (1,687) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG23 | 12 | 0.36 |
| (1,687) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG21 | 12 | 0.36 |
| (1,687) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG22 | 12 | 0.36 |
| (1,590) | 1:A:7:TYR:H | 1:A:6:SER:HA | 5 | 0.36 |
| (1,572) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:43:LYS:HB3 | 1 | 0.36 |
| (1,572) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:43:LYS:HB3 | 2 | 0.36 |
| (1,572) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:43:LYS:HB3 | 3 | 0.36 |
| (1,572) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:43:LYS:HB3 | 8 | 0.36 |
| (1,572) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:43:LYS:HB3 | 10 | 0.36 |
| (1,572) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:43:LYS:HB3 | 12 | 0.36 |
| (1,572) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:43:LYS:HB3 | 15 | 0.36 |
| (1,572) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:43:LYS:HB3 | 16 | 0.36 |
| (1,572) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:43:LYS:HB3 | 17 | 0.36 |
| (1,572) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:43:LYS:HB3 | 18 | 0.36 |
| (1,572) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:43:LYS:HB3 | 20 | 0.36 |
| (1,495) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:47:ARG:HG3 | 14 | 0.36 |
| (1,416) | 1:A:28:ILE:H | 1:A:27:LYS:HD2 | 4 | 0.36 |
| (1,334) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:53:PRO:HD3 | 11 | 0.36 |
| (1,298) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:64:LYS:HG3 | 1 | 0.36 |
| (1,279) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HB3 | 14 | 0.36 |
| (1,197) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:49:VAL:HG23 | 5 | 0.36 |
| (1,197) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:49:VAL:HG22 | 5 | 0.36 |
| (1,197) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:49:VAL:HG21 | 5 | 0.36 |
| (1,162) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:68:LYS:HG2 | 7 | 0.36 |
| (1,156) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HB3 | 7 | 0.36 |
| (1,1208) | 1:A:69:GLY:HA2 | 1:A:68:LYS:HB3 | 1 | 0.36 |
| (1,1194) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:HG | 1 | 0.36 |
| (1,1194) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:HG | 2 | 0.36 |
| (1,1194) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:HG | 5 | 0.36 |
| (1,1194) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:HG | 8 | 0.36 |
| (1,1194) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:HG | 9 | 0.36 |
| (1,1194) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:HG | 15 | 0.36 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1194) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:HG | 19 | 0.36 |
| (1,1194) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:HG | 20 | 0.36 |
| (1,1158) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:58:ILE:HA | 4 | 0.36 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:24:LYS:HB3 | 19 | 0.35 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:24:LYS:HD2 | 19 | 0.35 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:41:ARG:HB2 | 19 | 0.35 |
| (3,74) | 1:A:30:ASN:HD21 | 1:A:36:LEU:HD13 | 17 | 0.35 |
| (3,74) | 1:A:30:ASN:HD21 | 1:A:36:LEU:HD12 | 17 | 0.35 |
| (3,74) | 1:A:30:ASN:HD21 | 1:A:36:LEU:HD11 | 17 | 0.35 |
| (3,74) | 1:A:30:ASN:HD21 | 1:A:28:ILE:HG21 | 17 | 0.35 |
| (3,74) | 1:A:30:ASN:HD21 | 1:A:28:ILE:HG23 | 17 | 0.35 |
| (3,74) | 1:A:30:ASN:HD21 | 1:A:28:ILE:HG22 | 17 | 0.35 |
| (3,74) | 1:A:30:ASN:HD21 | 1:A:29:LEU:HD13 | 17 | 0.35 |
| (3,74) | 1:A:30:ASN:HD21 | 1:A:29:LEU:HD12 | 17 | 0.35 |
| (3,74) | 1:A:30:ASN:HD21 | 1:A:29:LEU:HD11 | 17 | 0.35 |
| (3,31) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:50:CYS:HB3 | 10 | 0.35 |
| (3,31) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:52:ASP:HA | 10 | 0.35 |
| (3,31) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:50:CYS:HB3 | 20 | 0.35 |
| (3,31) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:52:ASP:HA | 20 | 0.35 |
| (3,169) | 1:A:7:TYR:HB3 | 1:A:8:ARG:HB2 | 13 | 0.35 |
| (3,169) | 1:A:67:ASN:HB3 | 1:A:68:LYS:HD2 | 13 | 0.35 |
| (3,143) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:11:CYS:HB2 | 16 | 0.35 |
| (3,143) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:14:PHE:HB2 | 16 | 0.35 |
| (3,121) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HB2 | 11 | 0.35 |
| (3,121) | 1:A:47:ARG:HA | 1:A:47:ARG:HG3 | 11 | 0.35 |
| (1,88) | 1:A:42:LEU:H | 1:A:42:LEU:HB3 | 7 | 0.35 |
| (1,88) | 1:A:42:LEU:H | 1:A:42:LEU:HB3 | 15 | 0.35 |
| (1,848) | 1:A:41:ARG:HD3 | 1:A:41:ARG:HB2 | 8 | 0.35 |
| (1,76) | 1:A:5:LEU:H | 1:A:5:LEU:HB3 | 6 | 0.35 |
| (1,76) | 1:A:5:LEU:H | 1:A:5:LEU:HB3 | 7 | 0.35 |
| (1,76) | 1:A:5:LEU:H | 1:A:5:LEU:HB3 | 9 | 0.35 |
| (1,745) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:59:GLN:HA | 8 | 0.35 |
| (1,706) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:50:CYS:HB2 | 7 | 0.35 |
| (1,706) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:50:CYS:HB2 | 11 | 0.35 |
| (1,690) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HB | 5 | 0.35 |
| (1,684) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:10:PRO:HD3 | 15 | 0.35 |
| (1,572) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:43:LYS:HB3 | 6 | 0.35 |
| (1,572) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:43:LYS:HB3 | 7 | 0.35 |
| (1,572) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:43:LYS:HB3 | 9 | 0.35 |
| (1,572) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:43:LYS:HB3 | 11 | 0.35 |
| (1,572) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:43:LYS:HB3 | 13 | 0.35 |
| (1,572) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:43:LYS:HB3 | 14 | 0.35 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,334) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:53:PRO:HD3 | 18 | 0.35 |
| (1,254) | 1:A:16:SER:H | 1:A:15:GLU:HB2 | 13 | 0.35 |
| (1,254) | 1:A:16:SER:H | 1:A:15:GLU:HB2 | 19 | 0.35 |
| (1,142) | 1:A:8:ARG:H | 1:A:8:ARG:HB2 | 5 | 0.35 |
| (1,1208) | 1:A:69:GLY:HA2 | 1:A:68:LYS:HB3 | 15 | 0.35 |
| (1,1194) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:HG | 3 | 0.35 |
| (1,1194) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:HG | 4 | 0.35 |
| (1,1194) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:HG | 13 | 0.35 |
| (1,1194) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:HG | 16 | 0.35 |
| (1,1194) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:HG | 18 | 0.35 |
| (1,1047) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:29:LEU:HB3 | 1 | 0.35 |
| (3,98) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:46:ASN:HB2 | 16 | 0.34 |
| (3,98) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:47:ARG:HD2 | 16 | 0.34 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:24:LYS:HB3 | 3 | 0.34 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:24:LYS:HD2 | 3 | 0.34 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:41:ARG:HB2 | 3 | 0.34 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:24:LYS:HB3 | 13 | 0.34 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:24:LYS:HD2 | 13 | 0.34 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:41:ARG:HB2 | 13 | 0.34 |
| (3,69) | 1:A:22:ASN:HD21 | 1:A:42:LEU:HB2 | 3 | 0.34 |
| (3,69) | 1:A:22:ASN:HD21 | 1:A:43:LYS:HD2 | 3 | 0.34 |
| (3,69) | 1:A:22:ASN:HD21 | 1:A:42:LEU:HB2 | 16 | 0.34 |
| (3,69) | 1:A:22:ASN:HD21 | 1:A:43:LYS:HD2 | 16 | 0.34 |
| (3,31) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:50:CYS:HB3 | 5 | 0.34 |
| (3,31) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:52:ASP:HA | 5 | 0.34 |
| (3,282) | 1:A:65:ALA:HA | 1:A:28:ILE:HG12 | 15 | 0.34 |
| (3,282) | 1:A:65:ALA:HA | 1:A:66:LEU:HB3 | 15 | 0.34 |
| (3,246) | 1:A:39:VAL:HA | 1:A:29:LEU:HB3 | 7 | 0.34 |
| (3,246) | 1:A:39:VAL:HA | 1:A:27:LYS:HB3 | 7 | 0.34 |
| (3,246) | 1:A:39:VAL:HA | 1:A:29:LEU:HB3 | 8 | 0.34 |
| (3,246) | 1:A:39:VAL:HA | 1:A:27:LYS:HB3 | 8 | 0.34 |
| (3,246) | 1:A:39:VAL:HA | 1:A:29:LEU:HB3 | 19 | 0.34 |
| (3,246) | 1:A:39:VAL:HA | 1:A:27:LYS:HB3 | 19 | 0.34 |
| (3,233) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:10:PRO:HD3 | 6 | 0.34 |
| (3,233) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:32:PRO:HD2 | 6 | 0.34 |
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:23:VAL:HG13 | 16 | 0.34 |
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:23:VAL:HG11 | 16 | 0.34 |
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:23:VAL:HG12 | 16 | 0.34 |
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:23:VAL:HG13 | 16 | 0.34 |
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:23:VAL:HG11 | 16 | 0.34 |
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:23:VAL:HG12 | 16 | 0.34 |
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:23:VAL:HG13 | 16 | 0.34 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:23:VAL:HG11 | 16 | 0.34 |
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:23:VAL:HG12 | 16 | 0.34 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:26:LEU:HD22 | 16 | 0.34 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:26:LEU:HD21 | 16 | 0.34 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:26:LEU:HD23 | 16 | 0.34 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:26:LEU:HD22 | 16 | 0.34 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:26:LEU:HD21 | 16 | 0.34 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:26:LEU:HD23 | 16 | 0.34 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:26:LEU:HD22 | 16 | 0.34 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:26:LEU:HD21 | 16 | 0.34 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:26:LEU:HD23 | 16 | 0.34 |
| (3,217) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HA | 15 | 0.34 |
| (3,217) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:24:LYS:HE2 | 15 | 0.34 |
| (3,217) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:43:LYS:HE2 | 15 | 0.34 |
| (3,17) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:20:ARG:HD3 | 8 | 0.34 |
| (3,17) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:22:ASN:HB2 | 8 | 0.34 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:18:ILE:HG23 | 16 | 0.34 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:18:ILE:HG22 | 16 | 0.34 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:18:ILE:HG21 | 16 | 0.34 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:23:VAL:HG13 | 16 | 0.34 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:23:VAL:HG11 | 16 | 0.34 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:23:VAL:HG12 | 16 | 0.34 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:42:LEU:HD21 | 16 | 0.34 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:42:LEU:HD23 | 16 | 0.34 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:42:LEU:HD22 | 16 | 0.34 |
| (3,124) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD13 | 7 | 0.34 |
| (3,124) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD12 | 7 | 0.34 |
| (3,124) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD11 | 7 | 0.34 |
| (3,124) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD22 | 7 | 0.34 |
| (3,124) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD23 | 7 | 0.34 |
| (3,124) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD21 | 7 | 0.34 |
| (3,121) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HB2 | 20 | 0.34 |
| (3,121) | 1:A:47:ARG:HA | 1:A:47:ARG:HG3 | 20 | 0.34 |
| (1,706) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:50:CYS:HB2 | 3 | 0.34 |
| (1,706) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:50:CYS:HB2 | 14 | 0.34 |
| (1,706) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:50:CYS:HB2 | 17 | 0.34 |
| (1,687) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG23 | 2 | 0.34 |
| (1,687) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG21 | 2 | 0.34 |
| (1,687) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG22 | 2 | 0.34 |
| (1,62) | 1:A:56:LYS:H | 1:A:56:LYS:HD2 | 3 | 0.34 |
| (1,590) | 1:A:7:TYR:H | 1:A:6:SER:HA | 11 | 0.34 |
| (1,572) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:43:LYS:HB3 | 19 | 0.34 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,389) | 1:A:19:ALA:H | 1:A:18:ILE:HG13 | 13 | 0.34 |
| (1,358) | 1:A:11:CYS:H | 1:A:9:CYS:HB2 | 10 | 0.34 |
| (1,334) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:53:PRO:HD3 | 8 | 0.34 |
| (1,334) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:53:PRO:HD3 | 12 | 0.34 |
| (1,334) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:53:PRO:HD3 | 14 | 0.34 |
| (1,296) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:63:GLU:HB3 | 20 | 0.34 |
| (1,279) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HB3 | 13 | 0.34 |
| (1,218) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:42:LEU:HB3 | 15 | 0.34 |
| (1,217) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:45:ASN:HB2 | 18 | 0.34 |
| (1,197) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:49:VAL:HG23 | 13 | 0.34 |
| (1,197) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:49:VAL:HG22 | 13 | 0.34 |
| (1,197) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:49:VAL:HG21 | 13 | 0.34 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HB2 | 9 | 0.34 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HB2 | 9 | 0.34 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HB2 | 9 | 0.34 |
| (1,1158) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:58:ILE:HA | 5 | 0.34 |
| (1,103) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:20:ARG:HB3 | 5 | 0.34 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:24:LYS:HB3 | 18 | 0.33 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:24:LYS:HD2 | 18 | 0.33 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:41:ARG:HB2 | 18 | 0.33 |
| (3,73) | 1:A:29:LEU:H | 1:A:28:ILE:HG13 | 19 | 0.33 |
| (3,73) | 1:A:29:LEU:H | 1:A:38:ILE:HG12 | 19 | 0.33 |
| (3,35) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:46:ASN:HB2 | 17 | 0.33 |
| (3,35) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:47:ARG:HD2 | 17 | 0.33 |
| (3,246) | 1:A:39:VAL:HA | 1:A:29:LEU:HB3 | 1 | 0.33 |
| (3,246) | 1:A:39:VAL:HA | 1:A:27:LYS:HB3 | 1 | 0.33 |
| (3,217) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HA | 5 | 0.33 |
| (3,217) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:24:LYS:HE2 | 5 | 0.33 |
| (3,217) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:43:LYS:HE2 | 5 | 0.33 |
| (3,170) | 1:A:16:SER:H | 1:A:15:GLU:HG2 | 9 | 0.33 |
| (3,170) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:50:CYS:H | 9 | 0.33 |
| (3,17) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:20:ARG:HD3 | 9 | 0.33 |
| (3,17) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:22:ASN:HB2 | 9 | 0.33 |
| (3,121) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HB2 | 5 | 0.33 |
| (3,121) | 1:A:47:ARG:HA | 1:A:47:ARG:HG3 | 5 | 0.33 |
| (3,115) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HD11 | 8 | 0.33 |
| (3,115) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HD12 | 8 | 0.33 |
| (3,115) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HD13 | 8 | 0.33 |
| (3,115) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:66:LEU:HG | 8 | 0.33 |
| (1,867) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:12:ARG:HD2 | 1 | 0.33 |
| (1,788) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:45:ASN:HB3 | 19 | 0.33 |
| (1,745) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:59:GLN:HA | 6 | 0.33 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,706) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:50:CYS:HB2 | 10 | 0.33 |
| (1,706) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:50:CYS:HB2 | 13 | 0.33 |
| (1,687) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG23 | 13 | 0.33 |
| (1,687) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG21 | 13 | 0.33 |
| (1,687) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG22 | 13 | 0.33 |
| (1,575) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:24:LYS:HD2 | 4 | 0.33 |
| (1,433) | 1:A:31:THR:H | 1:A:34:CYS:HB2 | 1 | 0.33 |
| (1,433) | 1:A:31:THR:H | 1:A:34:CYS:HB2 | 10 | 0.33 |
| (1,389) | 1:A:19:ALA:H | 1:A:18:ILE:HG13 | 11 | 0.33 |
| (1,334) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:53:PRO:HD3 | 2 | 0.33 |
| (1,334) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:53:PRO:HD3 | 9 | 0.33 |
| (1,279) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HB3 | 20 | 0.33 |
| (1,197) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:49:VAL:HG23 | 9 | 0.33 |
| (1,197) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:49:VAL:HG22 | 9 | 0.33 |
| (1,197) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:49:VAL:HG21 | 9 | 0.33 |
| (1,180) | 1:A:3:VAL:H | 1:A:3:VAL:HG12 | 6 | 0.33 |
| (1,180) | 1:A:3:VAL:H | 1:A:3:VAL:HG11 | 6 | 0.33 |
| (1,180) | 1:A:3:VAL:H | 1:A:3:VAL:HG13 | 6 | 0.33 |
| (1,1194) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:HG | 17 | 0.33 |
| (1,1158) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:58:ILE:HA | 20 | 0.33 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB2 | 1:A:26:LEU:HD12 | 2 | 0.33 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB2 | 1:A:26:LEU:HD11 | 2 | 0.33 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB2 | 1:A:26:LEU:HD13 | 2 | 0.33 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB3 | 1:A:26:LEU:HD12 | 2 | 0.33 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB3 | 1:A:26:LEU:HD11 | 2 | 0.33 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB3 | 1:A:26:LEU:HD13 | 2 | 0.33 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB1 | 1:A:26:LEU:HD12 | 2 | 0.33 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB1 | 1:A:26:LEU:HD11 | 2 | 0.33 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB1 | 1:A:26:LEU:HD13 | 2 | 0.33 |
| (3,75) | 1:A:31:THR:H | 1:A:33:ASN:HD22 | 11 | 0.32 |
| (3,75) | 1:A:31:THR:H | 1:A:37:GLN:HE21 | 11 | 0.32 |
| (3,31) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:50:CYS:HB3 | 6 | 0.32 |
| (3,31) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:52:ASP:HA | 6 | 0.32 |
| (3,265) | 1:A:56:LYS:HG3 | 1:A:56:LYS:HE3 | 13 | 0.32 |
| (3,265) | 1:A:56:LYS:HG2 | 1:A:56:LYS:HE3 | 13 | 0.32 |
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:23:VAL:HG13 | 6 | 0.32 |
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:23:VAL:HG11 | 6 | 0.32 |
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:23:VAL:HG12 | 6 | 0.32 |
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:23:VAL:HG13 | 6 | 0.32 |
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:23:VAL:HG11 | 6 | 0.32 |
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:23:VAL:HG12 | 6 | 0.32 |
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:23:VAL:HG13 | 6 | 0.32 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:23:VAL:HG11 | 6 | 0.32 |
| (3,224) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:23:VAL:HG12 | 6 | 0.32 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:26:LEU:HD22 | 6 | 0.32 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:26:LEU:HD21 | 6 | 0.32 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:26:LEU:HD23 | 6 | 0.32 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:26:LEU:HD22 | 6 | 0.32 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:26:LEU:HD21 | 6 | 0.32 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:26:LEU:HD23 | 6 | 0.32 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:26:LEU:HD22 | 6 | 0.32 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:26:LEU:HD21 | 6 | 0.32 |
| (3,224) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:26:LEU:HD23 | 6 | 0.32 |
| (3,20) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:59:GLN:HG2 | 11 | 0.32 |
| (3,20) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:60:GLU:HG3 | 11 | 0.32 |
| (3,170) | 1:A:16:SER:H | 1:A:15:GLU:HG2 | 5 | 0.32 |
| (3,170) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:50:CYS:H | 5 | 0.32 |
| (3,139) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:29:LEU:HD13 | 2 | 0.32 |
| (3,139) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:29:LEU:HD12 | 2 | 0.32 |
| (3,139) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:29:LEU:HD11 | 2 | 0.32 |
| (3,139) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:29:LEU:HD13 | 2 | 0.32 |
| (3,139) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:29:LEU:HD12 | 2 | 0.32 |
| (3,139) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:29:LEU:HD11 | 2 | 0.32 |
| (3,135) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:10:PRO:HG2 | 19 | 0.32 |
| (3,135) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:32:PRO:HG2 | 19 | 0.32 |
| (1,909) | 1:A:10:PRO:HB2 | 1:A:10:PRO:HA | 11 | 0.32 |
| (1,909) | 1:A:10:PRO:HB2 | 1:A:10:PRO:HA | 13 | 0.32 |
| (1,867) | 1:A:12:ARG:HB2 | 1:A:12:ARG:HD2 | 14 | 0.32 |
| (1,788) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:45:ASN:HB3 | 4 | 0.32 |
| (1,690) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HB | 13 | 0.32 |
| (1,683) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:32:PRO:HB3 | 16 | 0.32 |
| (1,683) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:32:PRO:HB3 | 17 | 0.32 |
| (1,646) | 1:A:33:ASN:HA | 1:A:33:ASN:HB2 | 3 | 0.32 |
| (1,646) | 1:A:33:ASN:HA | 1:A:33:ASN:HB2 | 6 | 0.32 |
| (1,646) | 1:A:33:ASN:HA | 1:A:33:ASN:HB2 | 9 | 0.32 |
| (1,646) | 1:A:33:ASN:HA | 1:A:33:ASN:HB2 | 10 | 0.32 |
| (1,646) | 1:A:33:ASN:HA | 1:A:33:ASN:HB2 | 12 | 0.32 |
| (1,646) | 1:A:33:ASN:HA | 1:A:33:ASN:HB2 | 14 | 0.32 |
| (1,646) | 1:A:33:ASN:HA | 1:A:33:ASN:HB2 | 15 | 0.32 |
| (1,646) | 1:A:33:ASN:HA | 1:A:33:ASN:HB2 | 16 | 0.32 |
| (1,646) | 1:A:33:ASN:HA | 1:A:33:ASN:HB2 | 20 | 0.32 |
| (1,592) | 1:A:64:LYS:HA | 1:A:67:ASN:HB2 | 6 | 0.32 |
| (1,531) | 1:A:57:TRP:HE1 | 1:A:20:ARG:HB3 | 7 | 0.32 |
| (1,493) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD21 | 2 | 0.32 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,493) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD23 | 2 | 0.32 |
| (1,493) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD22 | 2 | 0.32 |
| (1,416) | 1:A:28:ILE:H | 1:A:27:LYS:HD2 | 10 | 0.32 |
| (1,389) | 1:A:19:ALA:H | 1:A:18:ILE:HG13 | 9 | 0.32 |
| (1,298) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:64:LYS:HG3 | 10 | 0.32 |
| (1,254) | 1:A:16:SER:H | 1:A:15:GLU:HB2 | 6 | 0.32 |
| (1,218) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:42:LEU:HB3 | 2 | 0.32 |
| (1,1204) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:28:ILE:HG12 | 12 | 0.32 |
| (1,1204) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:28:ILE:HG12 | 12 | 0.32 |
| (1,1204) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:28:ILE:HG12 | 12 | 0.32 |
| (1,1194) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:HG | 6 | 0.32 |
| (1,1194) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:HG | 7 | 0.32 |
| (1,1194) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:HG | 12 | 0.32 |
| (1,1158) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:58:ILE:HA | 2 | 0.32 |
| (3,98) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:46:ASN:HB2 | 8 | 0.31 |
| (3,98) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:47:ARG:HD2 | 8 | 0.31 |
| (3,35) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:46:ASN:HB2 | 7 | 0.31 |
| (3,35) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:47:ARG:HD2 | 7 | 0.31 |
| (3,31) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:50:CYS:HB3 | 13 | 0.31 |
| (3,31) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:52:ASP:HA | 13 | 0.31 |
| (3,265) | 1:A:56:LYS:HG3 | 1:A:56:LYS:HE3 | 1 | 0.31 |
| (3,265) | 1:A:56:LYS:HG2 | 1:A:56:LYS:HE3 | 1 | 0.31 |
| (3,246) | 1:A:39:VAL:HA | 1:A:29:LEU:HB3 | 17 | 0.31 |
| (3,246) | 1:A:39:VAL:HA | 1:A:27:LYS:HB3 | 17 | 0.31 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG21 | 14 | 0.31 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG23 | 14 | 0.31 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG22 | 14 | 0.31 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD13 | 14 | 0.31 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD12 | 14 | 0.31 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD11 | 14 | 0.31 |
| (3,134) | 1:A:41:ARG:HA | 1:A:42:LEU:HB3 | 15 | 0.31 |
| (3,134) | 1:A:41:ARG:HA | 1:A:48:GLN:HG2 | 15 | 0.31 |
| (3,134) | 1:A:41:ARG:HA | 1:A:48:GLN:HG3 | 15 | 0.31 |
| (3,134) | 1:A:41:ARG:HA | 1:A:42:LEU:HB3 | 19 | 0.31 |
| (3,134) | 1:A:41:ARG:HA | 1:A:48:GLN:HG2 | 19 | 0.31 |
| (3,134) | 1:A:41:ARG:HA | 1:A:48:GLN:HG3 | 19 | 0.31 |
| (3,121) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HB2 | 18 | 0.31 |
| (3,121) | 1:A:47:ARG:HA | 1:A:47:ARG:HG3 | 18 | 0.31 |
| (1,909) | 1:A:10:PRO:HB2 | 1:A:10:PRO:HA | 1 | 0.31 |
| (1,909) | 1:A:10:PRO:HB2 | 1:A:10:PRO:HA | 2 | 0.31 |
| (1,909) | 1:A:10:PRO:HB2 | 1:A:10:PRO:HA | 3 | 0.31 |
| (1,909) | 1:A:10:PRO:HB2 | 1:A:10:PRO:HA | 5 | 0.31 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,909) | 1:A:10:PRO:HB2 | 1:A:10:PRO:HA | 6 | 0.31 |
| (1,909) | 1:A:10:PRO:HB2 | 1:A:10:PRO:HA | 7 | 0.31 |
| (1,909) | 1:A:10:PRO:HB2 | 1:A:10:PRO:HA | 8 | 0.31 |
| (1,909) | 1:A:10:PRO:HB2 | 1:A:10:PRO:HA | 9 | 0.31 |
| (1,909) | 1:A:10:PRO:HB2 | 1:A:10:PRO:HA | 10 | 0.31 |
| (1,909) | 1:A:10:PRO:HB2 | 1:A:10:PRO:HA | 12 | 0.31 |
| (1,909) | 1:A:10:PRO:HB2 | 1:A:10:PRO:HA | 14 | 0.31 |
| (1,909) | 1:A:10:PRO:HB2 | 1:A:10:PRO:HA | 16 | 0.31 |
| (1,909) | 1:A:10:PRO:HB2 | 1:A:10:PRO:HA | 19 | 0.31 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 15 | 0.31 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 15 | 0.31 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 15 | 0.31 |
| (1,788) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:45:ASN:HB3 | 11 | 0.31 |
| (1,788) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:45:ASN:HB3 | 12 | 0.31 |
| (1,76) | 1:A:5:LEU:H | 1:A:5:LEU:HB3 | 8 | 0.31 |
| (1,76) | 1:A:5:LEU:H | 1:A:5:LEU:HB3 | 11 | 0.31 |
| (1,745) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:59:GLN:HA | 1 | 0.31 |
| (1,706) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:50:CYS:HB2 | 6 | 0.31 |
| (1,706) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:50:CYS:HB2 | 12 | 0.31 |
| (1,646) | 1:A:33:ASN:HA | 1:A:33:ASN:HB2 | 2 | 0.31 |
| (1,646) | 1:A:33:ASN:HA | 1:A:33:ASN:HB2 | 5 | 0.31 |
| (1,646) | 1:A:33:ASN:HA | 1:A:33:ASN:HB2 | 17 | 0.31 |
| (1,62) | 1:A:56:LYS:H | 1:A:56:LYS:HD2 | 20 | 0.31 |
| (1,531) | 1:A:57:TRP:HE1 | 1:A:20:ARG:HB3 | 6 | 0.31 |
| (1,493) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD21 | 7 | 0.31 |
| (1,493) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD23 | 7 | 0.31 |
| (1,493) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD22 | 7 | 0.31 |
| (1,389) | 1:A:19:ALA:H | 1:A:18:ILE:HG13 | 3 | 0.31 |
| (1,389) | 1:A:19:ALA:H | 1:A:18:ILE:HG13 | 10 | 0.31 |
| (1,389) | 1:A:19:ALA:H | 1:A:18:ILE:HG13 | 16 | 0.31 |
| (1,389) | 1:A:19:ALA:H | 1:A:18:ILE:HG13 | 19 | 0.31 |
| (1,383) | 1:A:18:ILE:H | 1:A:16:SER:HB3 | 15 | 0.31 |
| (1,37) | 1:A:13:PHE:HA | 1:A:13:PHE:HE1 | 8 | 0.31 |
| (1,37) | 1:A:13:PHE:HA | 1:A:13:PHE:HE2 | 8 | 0.31 |
| (1,37) | 1:A:13:PHE:HA | 1:A:13:PHE:HE1 | 10 | 0.31 |
| (1,37) | 1:A:13:PHE:HA | 1:A:13:PHE:HE2 | 10 | 0.31 |
| (1,358) | 1:A:11:CYS:H | 1:A:9:CYS:HB2 | 15 | 0.31 |
| (1,351) | 1:A:11:CYS:H | 1:A:10:PRO:HB3 | 13 | 0.31 |
| (1,334) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:53:PRO:HD3 | 5 | 0.31 |
| (1,334) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:53:PRO:HD3 | 15 | 0.31 |
| (1,254) | 1:A:16:SER:H | 1:A:15:GLU:HB2 | 11 | 0.31 |
| (1,254) | 1:A:16:SER:H | 1:A:15:GLU:HB2 | 18 | 0.31 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,197) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:49:VAL:HG23 | 6 | 0.31 |
| (1,197) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:49:VAL:HG22 | 6 | 0.31 |
| (1,197) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:49:VAL:HG21 | 6 | 0.31 |
| (1,142) | 1:A:8:ARG:H | 1:A:8:ARG:HB2 | 20 | 0.31 |
| (1,1194) | 1:A:62:LEU:HB2 | 1:A:62:LEU:HG | 14 | 0.31 |
| (1,1101) | 1:A:48:GLN:HB3 | 1:A:39:VAL:HG23 | 4 | 0.31 |
| (1,1101) | 1:A:48:GLN:HB3 | 1:A:39:VAL:HG21 | 4 | 0.31 |
| (1,1101) | 1:A:48:GLN:HB3 | 1:A:39:VAL:HG22 | 4 | 0.31 |
| (3,69) | 1:A:22:ASN:HD21 | 1:A:42:LEU:HB2 | 18 | 0.3 |
| (3,69) | 1:A:22:ASN:HD21 | 1:A:43:LYS:HD2 | 18 | 0.3 |
| (3,246) | 1:A:39:VAL:HA | 1:A:29:LEU:HB3 | 5 | 0.3 |
| (3,246) | 1:A:39:VAL:HA | 1:A:27:LYS:HB3 | 5 | 0.3 |
| (3,246) | 1:A:39:VAL:HA | 1:A:29:LEU:HB3 | 6 | 0.3 |
| (3,246) | 1:A:39:VAL:HA | 1:A:27:LYS:HB3 | 6 | 0.3 |
| (3,246) | 1:A:39:VAL:HA | 1:A:29:LEU:HB3 | 9 | 0.3 |
| (3,246) | 1:A:39:VAL:HA | 1:A:27:LYS:HB3 | 9 | 0.3 |
| (3,246) | 1:A:39:VAL:HA | 1:A:29:LEU:HB3 | 11 | 0.3 |
| (3,246) | 1:A:39:VAL:HA | 1:A:27:LYS:HB3 | 11 | 0.3 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:27:LYS:HG3 | 1 | 0.3 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB2 | 1 | 0.3 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB3 | 1 | 0.3 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB1 | 1 | 0.3 |
| (3,156) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HG2 | 2 | 0.3 |
| (3,156) | 1:A:43:LYS:HE2 | 1:A:43:LYS:HG3 | 2 | 0.3 |
| (3,156) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HG2 | 13 | 0.3 |
| (3,156) | 1:A:43:LYS:HE2 | 1:A:43:LYS:HG3 | 13 | 0.3 |
| (3,121) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HB2 | 13 | 0.3 |
| (3,121) | 1:A:47:ARG:HA | 1:A:47:ARG:HG3 | 13 | 0.3 |
| (1,909) | 1:A:10:PRO:HB2 | 1:A:10:PRO:HA | 17 | 0.3 |
| (1,909) | 1:A:10:PRO:HB2 | 1:A:10:PRO:HA | 18 | 0.3 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 5 | 0.3 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 5 | 0.3 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 5 | 0.3 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 13 | 0.3 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 13 | 0.3 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 13 | 0.3 |
| (1,860) | 1:A:53:PRO:HB3 | 1:A:62:LEU:HD11 | 11 | 0.3 |
| (1,860) | 1:A:53:PRO:HB3 | 1:A:62:LEU:HD13 | 11 | 0.3 |
| (1,860) | 1:A:53:PRO:HB3 | 1:A:62:LEU:HD12 | 11 | 0.3 |
| (1,844) | 1:A:68:LYS:HB3 | 1:A:68:LYS:H | 9 | 0.3 |
| (1,788) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:45:ASN:HB3 | 8 | 0.3 |
| (1,788) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:45:ASN:HB3 | 9 | 0.3 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,76) | 1:A:5:LEU:H | 1:A:5:LEU:HB3 | 1 | 0.3 |
| (1,76) | 1:A:5:LEU:H | 1:A:5:LEU:HB3 | 4 | 0.3 |
| (1,738) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HG3 | 5 | 0.3 |
| (1,706) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:50:CYS:HB2 | 9 | 0.3 |
| (1,690) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HB | 3 | 0.3 |
| (1,690) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HB | 12 | 0.3 |
| (1,575) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:24:LYS:HD2 | 5 | 0.3 |
| (1,567) | 1:A:60:GLU:HA | 1:A:60:GLU:HG3 | 10 | 0.3 |
| (1,521) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:54:LYS:HE3 | 9 | 0.3 |
| (1,389) | 1:A:19:ALA:H | 1:A:18:ILE:HG13 | 12 | 0.3 |
| (1,389) | 1:A:19:ALA:H | 1:A:18:ILE:HG13 | 17 | 0.3 |
| (1,37) | 1:A:13:PHE:HA | 1:A:13:PHE:HE1 | 3 | 0.3 |
| (1,37) | 1:A:13:PHE:HA | 1:A:13:PHE:HE2 | 3 | 0.3 |
| (1,37) | 1:A:13:PHE:HA | 1:A:13:PHE:HE1 | 5 | 0.3 |
| (1,37) | 1:A:13:PHE:HA | 1:A:13:PHE:HE2 | 5 | 0.3 |
| (1,37) | 1:A:13:PHE:HA | 1:A:13:PHE:HE1 | 12 | 0.3 |
| (1,37) | 1:A:13:PHE:HA | 1:A:13:PHE:HE2 | 12 | 0.3 |
| (1,37) | 1:A:13:PHE:HA | 1:A:13:PHE:HE1 | 19 | 0.3 |
| (1,37) | 1:A:13:PHE:HA | 1:A:13:PHE:HE2 | 19 | 0.3 |
| (1,279) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HB3 | 16 | 0.3 |
| (1,279) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HB3 | 17 | 0.3 |
| (1,149) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:14:PHE:HB2 | 14 | 0.3 |
| (3,98) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:46:ASN:HB2 | 1 | 0.29 |
| (3,98) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:47:ARG:HD2 | 1 | 0.29 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:24:LYS:HB3 | 2 | 0.29 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:24:LYS:HD2 | 2 | 0.29 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:41:ARG:HB2 | 2 | 0.29 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD11 | 7 | 0.29 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD12 | 7 | 0.29 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD13 | 7 | 0.29 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HG | 7 | 0.29 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD11 | 10 | 0.29 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD12 | 10 | 0.29 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD13 | 10 | 0.29 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HG | 10 | 0.29 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG21 | 6 | 0.29 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG23 | 6 | 0.29 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG22 | 6 | 0.29 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD13 | 6 | 0.29 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD12 | 6 | 0.29 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD11 | 6 | 0.29 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG21 | 12 | 0.29 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG23 | 12 | 0.29 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG22 | 12 | 0.29 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD13 | 12 | 0.29 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD12 | 12 | 0.29 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD11 | 12 | 0.29 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG21 | 19 | 0.29 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG23 | 19 | 0.29 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG22 | 19 | 0.29 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD13 | 19 | 0.29 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD12 | 19 | 0.29 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD11 | 19 | 0.29 |
| (3,20) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:59:GLN:HG2 | 5 | 0.29 |
| (3,20) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:60:GLU:HG3 | 5 | 0.29 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:27:LYS:HG3 | 6 | 0.29 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB2 | 6 | 0.29 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB3 | 6 | 0.29 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB1 | 6 | 0.29 |
| (3,17) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:20:ARG:HD3 | 7 | 0.29 |
| (3,17) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:22:ASN:HB2 | 7 | 0.29 |
| (3,17) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:20:ARG:HD3 | 10 | 0.29 |
| (3,17) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:22:ASN:HB2 | 10 | 0.29 |
| (3,169) | 1:A:7:TYR:HB3 | 1:A:8:ARG:HB2 | 18 | 0.29 |
| (3,169) | 1:A:67:ASN:HB3 | 1:A:68:LYS:HD2 | 18 | 0.29 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:18:ILE:HG23 | 6 | 0.29 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:18:ILE:HG22 | 6 | 0.29 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:18:ILE:HG21 | 6 | 0.29 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:23:VAL:HG13 | 6 | 0.29 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:23:VAL:HG11 | 6 | 0.29 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:23:VAL:HG12 | 6 | 0.29 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:42:LEU:HD21 | 6 | 0.29 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:42:LEU:HD23 | 6 | 0.29 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:42:LEU:HD22 | 6 | 0.29 |
| (3,143) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:11:CYS:HB2 | 20 | 0.29 |
| (3,143) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:14:PHE:HB2 | 20 | 0.29 |
| (1,920) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:49:VAL:HG11 | 4 | 0.29 |
| (1,920) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:49:VAL:HG13 | 4 | 0.29 |
| (1,920) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:49:VAL:HG12 | 4 | 0.29 |
| (1,909) | 1:A:10:PRO:HB2 | 1:A:10:PRO:HA | 15 | 0.29 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 7 | 0.29 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 7 | 0.29 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 7 | 0.29 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 9 | 0.29 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 9 | 0.29 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 9 | 0.29 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 18 | 0.29 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 18 | 0.29 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 18 | 0.29 |
| (1,844) | 1:A:68:LYS:HB3 | 1:A:68:LYS:H | 17 | 0.29 |
| (1,820) | 1:A:44:ASN:HD22 | 1:A:44:ASN:HB2 | 13 | 0.29 |
| (1,792) | 1:A:45:ASN:HB2 | 1:A:45:ASN:HA | 14 | 0.29 |
| (1,788) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:45:ASN:HB3 | 2 | 0.29 |
| (1,788) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:45:ASN:HB3 | 17 | 0.29 |
| (1,775) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:19:ALA:HB2 | 8 | 0.29 |
| (1,775) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:19:ALA:HB3 | 8 | 0.29 |
| (1,775) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:19:ALA:HB1 | 8 | 0.29 |
| (1,706) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:50:CYS:HB2 | 4 | 0.29 |
| (1,706) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:50:CYS:HB2 | 20 | 0.29 |
| (1,690) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HB | 17 | 0.29 |
| (1,690) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HB | 19 | 0.29 |
| (1,660) | 1:A:41:ARG:HA | 1:A:41:ARG:HD3 | 17 | 0.29 |
| (1,595) | 1:A:7:TYR:HA | 1:A:7:TYR:HB2 | 2 | 0.29 |
| (1,595) | 1:A:7:TYR:HA | 1:A:7:TYR:HB2 | 5 | 0.29 |
| (1,595) | 1:A:7:TYR:HA | 1:A:7:TYR:HB2 | 16 | 0.29 |
| (1,595) | 1:A:7:TYR:HA | 1:A:7:TYR:HB2 | 19 | 0.29 |
| (1,592) | 1:A:64:LYS:HA | 1:A:67:ASN:HB2 | 3 | 0.29 |
| (1,494) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:47:ARG:HB3 | 14 | 0.29 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG22 | 16 | 0.29 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG21 | 16 | 0.29 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG23 | 16 | 0.29 |
| (1,389) | 1:A:19:ALA:H | 1:A:18:ILE:HG13 | 1 | 0.29 |
| (1,37) | 1:A:13:PHE:HA | 1:A:13:PHE:HE1 | 9 | 0.29 |
| (1,37) | 1:A:13:PHE:HA | 1:A:13:PHE:HE2 | 9 | 0.29 |
| (1,334) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:53:PRO:HD3 | 4 | 0.29 |
| (1,290) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:63:GLU:HG2 | 6 | 0.29 |
| (1,218) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:42:LEU:HB3 | 7 | 0.29 |
| (1,197) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:49:VAL:HG23 | 8 | 0.29 |
| (1,197) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:49:VAL:HG22 | 8 | 0.29 |
| (1,197) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:49:VAL:HG21 | 8 | 0.29 |
| (1,150) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:15:GLU:HG2 | 7 | 0.29 |
| (1,1188) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 13 | 0.29 |
| (1,1158) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:58:ILE:HA | 3 | 0.29 |
| (1,1098) | 1:A:48:GLN:HA | 1:A:41:ARG:HG3 | 10 | 0.29 |
| (1,1098) | 1:A:48:GLN:HA | 1:A:41:ARG:HG3 | 15 | 0.29 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ARG:HB3 | 19 | 0.29 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ARG:HB3 | 19 | 0.29 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ARG:HB3 | 19 | 0.29 |
| (1,103) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:20:ARG:HB3 | 17 | 0.29 |
| (1,103) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:20:ARG:HB3 | 18 | 0.29 |
| (3,75) | 1:A:31:THR:H | 1:A:33:ASN:HD22 | 13 | 0.28 |
| (3,75) | 1:A:31:THR:H | 1:A:37:GLN:HE21 | 13 | 0.28 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB2 | 15 | 0.28 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB3 | 15 | 0.28 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB1 | 15 | 0.28 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB2 | 15 | 0.28 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB3 | 15 | 0.28 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB1 | 15 | 0.28 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB2 | 15 | 0.28 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB3 | 15 | 0.28 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB1 | 15 | 0.28 |
| (3,44) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 10 | 0.28 |
| (3,44) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 10 | 0.28 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD11 | 15 | 0.28 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD12 | 15 | 0.28 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD13 | 15 | 0.28 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HG | 15 | 0.28 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD11 | 20 | 0.28 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD12 | 20 | 0.28 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD13 | 20 | 0.28 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HG | 20 | 0.28 |
| (3,282) | 1:A:65:ALA:HA | 1:A:28:ILE:HG12 | 10 | 0.28 |
| (3,282) | 1:A:65:ALA:HA | 1:A:66:LEU:HB3 | 10 | 0.28 |
| (3,246) | 1:A:39:VAL:HA | 1:A:29:LEU:HB3 | 20 | 0.28 |
| (3,246) | 1:A:39:VAL:HA | 1:A:27:LYS:HB3 | 20 | 0.28 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:27:LYS:HG3 | 16 | 0.28 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB2 | 16 | 0.28 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB3 | 16 | 0.28 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB1 | 16 | 0.28 |
| (3,143) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:11:CYS:HB2 | 8 | 0.28 |
| (3,143) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:14:PHE:HB2 | 8 | 0.28 |
| (3,139) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:29:LEU:HD13 | 1 | 0.28 |
| (3,139) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:29:LEU:HD12 | 1 | 0.28 |
| (3,139) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:29:LEU:HD11 | 1 | 0.28 |
| (3,139) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:29:LEU:HD13 | 1 | 0.28 |
| (3,139) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:29:LEU:HD12 | 1 | 0.28 |
| (3,139) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:29:LEU:HD11 | 1 | 0.28 |
| (3,139) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:29:LEU:HD13 | 13 | 0.28 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,139) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:29:LEU:HD12 | 13 | 0.28 |
| (3,139) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:29:LEU:HD11 | 13 | 0.28 |
| (3,139) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:29:LEU:HD13 | 13 | 0.28 |
| (3,139) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:29:LEU:HD12 | 13 | 0.28 |
| (3,139) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:29:LEU:HD11 | 13 | 0.28 |
| (1,924) | 1:A:16:SER:HB3 | 1:A:55:LEU:HD21 | 12 | 0.28 |
| (1,924) | 1:A:16:SER:HB3 | 1:A:55:LEU:HD22 | 12 | 0.28 |
| (1,924) | 1:A:16:SER:HB3 | 1:A:55:LEU:HD23 | 12 | 0.28 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 4 | 0.28 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 4 | 0.28 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 4 | 0.28 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 17 | 0.28 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 17 | 0.28 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 17 | 0.28 |
| (1,897) | 1:A:41:ARG:H | 1:A:41:ARG:HG2 | 2 | 0.28 |
| (1,788) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:45:ASN:HB3 | 15 | 0.28 |
| (1,706) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:50:CYS:HB2 | 2 | 0.28 |
| (1,690) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HB | 2 | 0.28 |
| (1,690) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HB | 16 | 0.28 |
| (1,683) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:32:PRO:HB3 | 3 | 0.28 |
| (1,683) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:32:PRO:HB3 | 12 | 0.28 |
| (1,595) | 1:A:7:TYR:HA | 1:A:7:TYR:HB2 | 14 | 0.28 |
| (1,595) | 1:A:7:TYR:HA | 1:A:7:TYR:HB2 | 18 | 0.28 |
| (1,575) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:24:LYS:HD2 | 8 | 0.28 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG22 | 10 | 0.28 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG21 | 10 | 0.28 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG23 | 10 | 0.28 |
| (1,389) | 1:A:19:ALA:H | 1:A:18:ILE:HG13 | 5 | 0.28 |
| (1,389) | 1:A:19:ALA:H | 1:A:18:ILE:HG13 | 8 | 0.28 |
| (1,389) | 1:A:19:ALA:H | 1:A:18:ILE:HG13 | 18 | 0.28 |
| (1,37) | 1:A:13:PHE:HA | 1:A:13:PHE:HE1 | 13 | 0.28 |
| (1,37) | 1:A:13:PHE:HA | 1:A:13:PHE:HE2 | 13 | 0.28 |
| (1,362) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:57:TRP:HB2 | 16 | 0.28 |
| (1,351) | 1:A:11:CYS:H | 1:A:10:PRO:HB3 | 20 | 0.28 |
| (1,334) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:53:PRO:HD3 | 20 | 0.28 |
| (1,279) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HB3 | 9 | 0.28 |
| (1,254) | 1:A:16:SER:H | 1:A:15:GLU:HB2 | 12 | 0.28 |
| (1,197) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:49:VAL:HG23 | 19 | 0.28 |
| (1,197) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:49:VAL:HG22 | 19 | 0.28 |
| (1,197) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:49:VAL:HG21 | 19 | 0.28 |
| (1,1098) | 1:A:48:GLN:HA | 1:A:41:ARG:HG3 | 13 | 0.28 |
| (3,98) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:46:ASN:HB2 | 13 | 0.27 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,98) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:47:ARG:HD2 | 13 | 0.27 |
| (3,73) | 1:A:29:LEU:H | 1:A:28:ILE:HG13 | 11 | 0.27 |
| (3,73) | 1:A:29:LEU:H | 1:A:38:ILE:HG12 | 11 | 0.27 |
| (3,246) | 1:A:39:VAL:HA | 1:A:29:LEU:HB3 | 3 | 0.27 |
| (3,246) | 1:A:39:VAL:HA | 1:A:27:LYS:HB3 | 3 | 0.27 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG21 | 18 | 0.27 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG23 | 18 | 0.27 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG22 | 18 | 0.27 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD13 | 18 | 0.27 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD12 | 18 | 0.27 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD11 | 18 | 0.27 |
| (3,20) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:59:GLN:HG2 | 13 | 0.27 |
| (3,20) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:60:GLU:HG3 | 13 | 0.27 |
| (3,20) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:59:GLN:HG2 | 18 | 0.27 |
| (3,20) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:60:GLU:HG3 | 18 | 0.27 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:27:LYS:HG3 | 11 | 0.27 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB2 | 11 | 0.27 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB3 | 11 | 0.27 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB1 | 11 | 0.27 |
| (3,17) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:20:ARG:HD3 | 19 | 0.27 |
| (3,17) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:22:ASN:HB2 | 19 | 0.27 |
| (3,17) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:20:ARG:HD3 | 20 | 0.27 |
| (3,17) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:22:ASN:HB2 | 20 | 0.27 |
| (3,138) | 1:A:2:PRO:HD2 | 1:A:2:PRO:HB3 | 19 | 0.27 |
| (3,138) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:10:PRO:HB2 | 19 | 0.27 |
| (3,138) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:32:PRO:HB2 | 19 | 0.27 |
| (3,134) | 1:A:41:ARG:HA | 1:A:42:LEU:HB3 | 16 | 0.27 |
| (3,134) | 1:A:41:ARG:HA | 1:A:48:GLN:HG2 | 16 | 0.27 |
| (3,134) | 1:A:41:ARG:HA | 1:A:48:GLN:HG3 | 16 | 0.27 |
| (1,909) | 1:A:10:PRO:HB2 | 1:A:10:PRO:HA | 20 | 0.27 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 8 | 0.27 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 8 | 0.27 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 8 | 0.27 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 11 | 0.27 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 11 | 0.27 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 11 | 0.27 |
| (1,820) | 1:A:44:ASN:HD22 | 1:A:44:ASN:HB2 | 1 | 0.27 |
| (1,792) | 1:A:45:ASN:HB2 | 1:A:45:ASN:HA | 15 | 0.27 |
| (1,687) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG23 | 14 | 0.27 |
| (1,687) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG21 | 14 | 0.27 |
| (1,687) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG22 | 14 | 0.27 |
| (1,607) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HD2 | 16 | 0.27 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,595) | 1:A:7:TYR:HA | 1:A:7:TYR:HB2 | 3 | 0.27 |
| (1,595) | 1:A:7:TYR:HA | 1:A:7:TYR:HB2 | 12 | 0.27 |
| (1,595) | 1:A:7:TYR:HA | 1:A:7:TYR:HB2 | 17 | 0.27 |
| (1,519) | 1:A:52:ASP:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 18 | 0.27 |
| (1,501) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:48:GLN:HE22 | 7 | 0.27 |
| (1,501) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:48:GLN:HE22 | 14 | 0.27 |
| (1,493) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD21 | 3 | 0.27 |
| (1,493) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD23 | 3 | 0.27 |
| (1,493) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD22 | 3 | 0.27 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG22 | 5 | 0.27 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG21 | 5 | 0.27 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG23 | 5 | 0.27 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG22 | 6 | 0.27 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG21 | 6 | 0.27 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG23 | 6 | 0.27 |
| (1,389) | 1:A:19:ALA:H | 1:A:18:ILE:HG13 | 6 | 0.27 |
| (1,362) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:57:TRP:HB2 | 1 | 0.27 |
| (1,362) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:57:TRP:HB2 | 2 | 0.27 |
| (1,362) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:57:TRP:HB2 | 3 | 0.27 |
| (1,362) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:57:TRP:HB2 | 10 | 0.27 |
| (1,362) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:57:TRP:HB2 | 12 | 0.27 |
| (1,362) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:57:TRP:HB2 | 20 | 0.27 |
| (1,334) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:53:PRO:HD3 | 13 | 0.27 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD12 | 4 | 0.27 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD13 | 4 | 0.27 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD11 | 4 | 0.27 |
| (1,279) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HB3 | 4 | 0.27 |
| (1,279) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HB3 | 12 | 0.27 |
| (1,235) | 1:A:4:SER:H | 1:A:4:SER:HB3 | 19 | 0.27 |
| (1,197) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:49:VAL:HG23 | 12 | 0.27 |
| (1,197) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:49:VAL:HG22 | 12 | 0.27 |
| (1,197) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:49:VAL:HG21 | 12 | 0.27 |
| (1,181) | 1:A:3:VAL:H | 1:A:2:PRO:HA | 14 | 0.27 |
| (1,180) | 1:A:3:VAL:H | 1:A:3:VAL:HG12 | 13 | 0.27 |
| (1,180) | 1:A:3:VAL:H | 1:A:3:VAL:HG11 | 13 | 0.27 |
| (1,180) | 1:A:3:VAL:H | 1:A:3:VAL:HG13 | 13 | 0.27 |
| (1,164) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:9:CYS:HB3 | 12 | 0.27 |
| (1,16) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:26:LEU:HB2 | 4 | 0.27 |
| (1,16) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:26:LEU:HB2 | 13 | 0.27 |
| (1,1204) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:28:ILE:HG12 | 18 | 0.27 |
| (1,1204) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:28:ILE:HG12 | 18 | 0.27 |
| (1,1204) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:28:ILE:HG12 | 18 | 0.27 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HB2 | 20 | 0.27 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HB2 | 20 | 0.27 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HB2 | 20 | 0.27 |
| (1,1158) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:58:ILE:HA | 19 | 0.27 |
| (1,1101) | 1:A:48:GLN:HB3 | 1:A:39:VAL:HG23 | 16 | 0.27 |
| (1,1101) | 1:A:48:GLN:HB3 | 1:A:39:VAL:HG21 | 16 | 0.27 |
| (1,1101) | 1:A:48:GLN:HB3 | 1:A:39:VAL:HG22 | 16 | 0.27 |
| (1,1091) | 1:A:44:ASN:HB2 | 1:A:45:ASN:HA | 18 | 0.27 |
| (1,103) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:20:ARG:HB3 | 11 | 0.27 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:24:LYS:HB3 | 17 | 0.26 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:24:LYS:HD2 | 17 | 0.26 |
| (3,95) | 1:A:46:ASN:H | 1:A:41:ARG:HB2 | 17 | 0.26 |
| (3,75) | 1:A:31:THR:H | 1:A:33:ASN:HD22 | 3 | 0.26 |
| (3,75) | 1:A:31:THR:H | 1:A:37:GLN:HE21 | 3 | 0.26 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD11 | 13 | 0.26 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD12 | 13 | 0.26 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD13 | 13 | 0.26 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HG | 13 | 0.26 |
| (3,31) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:50:CYS:HB3 | 2 | 0.26 |
| (3,31) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:52:ASP:HA | 2 | 0.26 |
| (3,282) | 1:A:65:ALA:HA | 1:A:28:ILE:HG12 | 19 | 0.26 |
| (3,282) | 1:A:65:ALA:HA | 1:A:66:LEU:HB3 | 19 | 0.26 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD13 | 18 | 0.26 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD12 | 18 | 0.26 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD11 | 18 | 0.26 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD13 | 18 | 0.26 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD12 | 18 | 0.26 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD11 | 18 | 0.26 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD13 | 18 | 0.26 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD12 | 18 | 0.26 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD11 | 18 | 0.26 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 18 | 0.26 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 18 | 0.26 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 18 | 0.26 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:62:LEU:HD11 | 18 | 0.26 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:62:LEU:HD13 | 18 | 0.26 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:62:LEU:HD12 | 18 | 0.26 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:62:LEU:HD11 | 18 | 0.26 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:62:LEU:HD13 | 18 | 0.26 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:62:LEU:HD12 | 18 | 0.26 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 18 | 0.26 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 18 | 0.26 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 18 | 0.26 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:66:LEU:HD11 | 18 | 0.26 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:66:LEU:HD12 | 18 | 0.26 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:66:LEU:HD13 | 18 | 0.26 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:66:LEU:HD11 | 18 | 0.26 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:66:LEU:HD12 | 18 | 0.26 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:66:LEU:HD13 | 18 | 0.26 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG21 | 15 | 0.26 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG23 | 15 | 0.26 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG22 | 15 | 0.26 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD13 | 15 | 0.26 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD12 | 15 | 0.26 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD11 | 15 | 0.26 |
| (3,143) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:11:CYS:HB2 | 10 | 0.26 |
| (3,143) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:14:PHE:HB2 | 10 | 0.26 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HD13 | 16 | 0.26 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HD12 | 16 | 0.26 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HD11 | 16 | 0.26 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG21 | 16 | 0.26 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG23 | 16 | 0.26 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG22 | 16 | 0.26 |
| (1,909) | 1:A:10:PRO:HB2 | 1:A:10:PRO:HA | 4 | 0.26 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 3 | 0.26 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 3 | 0.26 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 3 | 0.26 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 12 | 0.26 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 12 | 0.26 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 12 | 0.26 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 20 | 0.26 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 20 | 0.26 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 20 | 0.26 |
| (1,882) | 1:A:54:LYS:HD2 | 1:A:54:LYS:HA | 4 | 0.26 |
| (1,856) | 1:A:10:PRO:HB3 | 1:A:29:LEU:HG | 18 | 0.26 |
| (1,825) | 1:A:15:GLU:HG3 | 1:A:18:ILE:HD12 | 14 | 0.26 |
| (1,825) | 1:A:15:GLU:HG3 | 1:A:18:ILE:HD13 | 14 | 0.26 |
| (1,825) | 1:A:15:GLU:HG3 | 1:A:18:ILE:HD11 | 14 | 0.26 |
| (1,822) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:15:GLU:HB3 | 10 | 0.26 |
| (1,822) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:15:GLU:HB3 | 11 | 0.26 |
| (1,822) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:15:GLU:HB3 | 13 | 0.26 |
| (1,822) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:15:GLU:HB3 | 16 | 0.26 |
| (1,822) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:15:GLU:HB3 | 18 | 0.26 |
| (1,822) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:15:GLU:HB3 | 19 | 0.26 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,735) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:46:ASN:HA | 18 | 0.26 |
| (1,706) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:50:CYS:HB2 | 8 | 0.26 |
| (1,703) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:14:PHE:HA | 20 | 0.26 |
| (1,690) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HB | 4 | 0.26 |
| (1,607) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HD2 | 5 | 0.26 |
| (1,595) | 1:A:7:TYR:HA | 1:A:7:TYR:HB2 | 20 | 0.26 |
| (1,501) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:48:GLN:HE22 | 11 | 0.26 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG21 | 11 | 0.26 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG23 | 11 | 0.26 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG22 | 11 | 0.26 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG21 | 19 | 0.26 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG23 | 19 | 0.26 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG22 | 19 | 0.26 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG22 | 2 | 0.26 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG21 | 2 | 0.26 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG23 | 2 | 0.26 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG22 | 7 | 0.26 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG21 | 7 | 0.26 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG23 | 7 | 0.26 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG22 | 9 | 0.26 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG21 | 9 | 0.26 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG23 | 9 | 0.26 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG22 | 20 | 0.26 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG21 | 20 | 0.26 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG23 | 20 | 0.26 |
| (1,362) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:57:TRP:HB2 | 4 | 0.26 |
| (1,362) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:57:TRP:HB2 | 5 | 0.26 |
| (1,362) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:57:TRP:HB2 | 6 | 0.26 |
| (1,362) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:57:TRP:HB2 | 7 | 0.26 |
| (1,362) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:57:TRP:HB2 | 8 | 0.26 |
| (1,362) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:57:TRP:HB2 | 11 | 0.26 |
| (1,362) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:57:TRP:HB2 | 13 | 0.26 |
| (1,362) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:57:TRP:HB2 | 14 | 0.26 |
| (1,362) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:57:TRP:HB2 | 17 | 0.26 |
| (1,362) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:57:TRP:HB2 | 19 | 0.26 |
| (1,197) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:49:VAL:HG23 | 18 | 0.26 |
| (1,197) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:49:VAL:HG22 | 18 | 0.26 |
| (1,197) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:49:VAL:HG21 | 18 | 0.26 |
| (1,103) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:20:ARG:HB3 | 14 | 0.26 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD11 | 1 | 0.25 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD12 | 1 | 0.25 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD13 | 1 | 0.25 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HG | 1 | 0.25 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG21 | 1 | 0.25 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG23 | 1 | 0.25 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG22 | 1 | 0.25 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD13 | 1 | 0.25 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD12 | 1 | 0.25 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD11 | 1 | 0.25 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG21 | 4 | 0.25 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG23 | 4 | 0.25 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG22 | 4 | 0.25 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD13 | 4 | 0.25 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD12 | 4 | 0.25 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD11 | 4 | 0.25 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG21 | 9 | 0.25 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG23 | 9 | 0.25 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG22 | 9 | 0.25 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD13 | 9 | 0.25 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD12 | 9 | 0.25 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD11 | 9 | 0.25 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG21 | 10 | 0.25 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG23 | 10 | 0.25 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG22 | 10 | 0.25 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD13 | 10 | 0.25 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD12 | 10 | 0.25 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD11 | 10 | 0.25 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:27:LYS:HG3 | 4 | 0.25 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB2 | 4 | 0.25 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB3 | 4 | 0.25 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB1 | 4 | 0.25 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:27:LYS:HG3 | 8 | 0.25 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB2 | 8 | 0.25 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB3 | 8 | 0.25 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB1 | 8 | 0.25 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:27:LYS:HG3 | 12 | 0.25 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB2 | 12 | 0.25 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB3 | 12 | 0.25 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB1 | 12 | 0.25 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:27:LYS:HG3 | 15 | 0.25 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB2 | 15 | 0.25 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB3 | 15 | 0.25 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB1 | 15 | 0.25 |
| (3,108) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:56:LYS:HD2 | 2 | 0.25 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,108) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:55:LEU:HG | 2 | 0.25 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 14 | 0.25 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 14 | 0.25 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 14 | 0.25 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 19 | 0.25 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 19 | 0.25 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 19 | 0.25 |
| (1,844) | 1:A:68:LYS:HB3 | 1:A:68:LYS:H | 20 | 0.25 |
| (1,822) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:15:GLU:HB3 | 1 | 0.25 |
| (1,822) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:15:GLU:HB3 | 2 | 0.25 |
| (1,822) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:15:GLU:HB3 | 3 | 0.25 |
| (1,822) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:15:GLU:HB3 | 6 | 0.25 |
| (1,822) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:15:GLU:HB3 | 8 | 0.25 |
| (1,822) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:15:GLU:HB3 | 12 | 0.25 |
| (1,822) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:15:GLU:HB3 | 17 | 0.25 |
| (1,822) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:15:GLU:HB3 | 20 | 0.25 |
| (1,718) | 1:A:47:ARG:HD3 | 1:A:47:ARG:HG3 | 12 | 0.25 |
| (1,718) | 1:A:47:ARG:HD3 | 1:A:47:ARG:HG3 | 14 | 0.25 |
| (1,706) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:50:CYS:HB2 | 16 | 0.25 |
| (1,703) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:14:PHE:HA | 10 | 0.25 |
| (1,687) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG23 | 8 | 0.25 |
| (1,687) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG21 | 8 | 0.25 |
| (1,687) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG22 | 8 | 0.25 |
| (1,687) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG23 | 9 | 0.25 |
| (1,687) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG21 | 9 | 0.25 |
| (1,687) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG22 | 9 | 0.25 |
| (1,640) | 1:A:5:LEU:HA | 1:A:5:LEU:HB2 | 2 | 0.25 |
| (1,640) | 1:A:5:LEU:HA | 1:A:5:LEU:HB2 | 5 | 0.25 |
| (1,640) | 1:A:5:LEU:HA | 1:A:5:LEU:HB2 | 6 | 0.25 |
| (1,640) | 1:A:5:LEU:HA | 1:A:5:LEU:HB2 | 7 | 0.25 |
| (1,640) | 1:A:5:LEU:HA | 1:A:5:LEU:HB2 | 16 | 0.25 |
| (1,640) | 1:A:5:LEU:HA | 1:A:5:LEU:HB2 | 17 | 0.25 |
| (1,607) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HD2 | 3 | 0.25 |
| (1,595) | 1:A:7:TYR:HA | 1:A:7:TYR:HB2 | 9 | 0.25 |
| (1,575) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:24:LYS:HD2 | 1 | 0.25 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG21 | 1 | 0.25 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG23 | 1 | 0.25 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG22 | 1 | 0.25 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG22 | 8 | 0.25 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG21 | 8 | 0.25 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG23 | 8 | 0.25 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG22 | 14 | 0.25 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG21 | 14 | 0.25 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG23 | 14 | 0.25 |
| (1,389) | 1:A:19:ALA:H | 1:A:18:ILE:HG13 | 4 | 0.25 |
| (1,362) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:57:TRP:HB2 | 9 | 0.25 |
| (1,362) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:57:TRP:HB2 | 15 | 0.25 |
| (1,362) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:57:TRP:HB2 | 18 | 0.25 |
| (1,300) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:20:ARG:HB3 | 15 | 0.25 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD12 | 15 | 0.25 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD13 | 15 | 0.25 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD11 | 15 | 0.25 |
| (1,290) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:63:GLU:HG2 | 1 | 0.25 |
| (1,290) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:63:GLU:HG2 | 16 | 0.25 |
| (1,244) | 1:A:18:ILE:H | 1:A:18:ILE:HG12 | 12 | 0.25 |
| (1,164) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:9:CYS:HB3 | 1 | 0.25 |
| (1,16) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:26:LEU:HB2 | 5 | 0.25 |
| (1,145) | 1:A:7:TYR:H | 1:A:7:TYR:HB3 | 2 | 0.25 |
| (1,145) | 1:A:7:TYR:H | 1:A:7:TYR:HB3 | 14 | 0.25 |
| (1,1204) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:28:ILE:HG12 | 14 | 0.25 |
| (1,1204) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:28:ILE:HG12 | 14 | 0.25 |
| (1,1204) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:28:ILE:HG12 | 14 | 0.25 |
| (1,1158) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:58:ILE:HA | 1 | 0.25 |
| (1,1158) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:58:ILE:HA | 16 | 0.25 |
| (1,1098) | 1:A:48:GLN:HA | 1:A:41:ARG:HG3 | 3 | 0.25 |
| (3,75) | 1:A:31:THR:H | 1:A:33:ASN:HD22 | 5 | 0.24 |
| (3,75) | 1:A:31:THR:H | 1:A:37:GLN:HE21 | 5 | 0.24 |
| (3,75) | 1:A:31:THR:H | 1:A:33:ASN:HD22 | 16 | 0.24 |
| (3,75) | 1:A:31:THR:H | 1:A:37:GLN:HE21 | 16 | 0.24 |
| (3,73) | 1:A:29:LEU:H | 1:A:28:ILE:HG13 | 5 | 0.24 |
| (3,73) | 1:A:29:LEU:H | 1:A:38:ILE:HG12 | 5 | 0.24 |
| (3,73) | 1:A:29:LEU:H | 1:A:28:ILE:HG13 | 17 | 0.24 |
| (3,73) | 1:A:29:LEU:H | 1:A:38:ILE:HG12 | 17 | 0.24 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD11 | 4 | 0.24 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD12 | 4 | 0.24 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD13 | 4 | 0.24 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HG | 4 | 0.24 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD11 | 16 | 0.24 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD12 | 16 | 0.24 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD13 | 16 | 0.24 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HG | 16 | 0.24 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD11 | 17 | 0.24 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD12 | 17 | 0.24 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD13 | 17 | 0.24 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HG | 17 | 0.24 |
| (3,31) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:50:CYS:HB3 | 12 | 0.24 |
| (3,31) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:52:ASP:HA | 12 | 0.24 |
| (3,246) | 1:A:39:VAL:HA | 1:A:29:LEU:HB3 | 10 | 0.24 |
| (3,246) | 1:A:39:VAL:HA | 1:A:27:LYS:HB3 | 10 | 0.24 |
| (3,246) | 1:A:39:VAL:HA | 1:A:29:LEU:HB3 | 12 | 0.24 |
| (3,246) | 1:A:39:VAL:HA | 1:A:27:LYS:HB3 | 12 | 0.24 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD13 | 2 | 0.24 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD12 | 2 | 0.24 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD11 | 2 | 0.24 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD13 | 2 | 0.24 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD12 | 2 | 0.24 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD11 | 2 | 0.24 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD13 | 2 | 0.24 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD12 | 2 | 0.24 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD11 | 2 | 0.24 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 2 | 0.24 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 2 | 0.24 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 2 | 0.24 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:62:LEU:HD11 | 2 | 0.24 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:62:LEU:HD13 | 2 | 0.24 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:62:LEU:HD12 | 2 | 0.24 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:62:LEU:HD11 | 2 | 0.24 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:62:LEU:HD13 | 2 | 0.24 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:62:LEU:HD12 | 2 | 0.24 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 2 | 0.24 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 2 | 0.24 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 2 | 0.24 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:66:LEU:HD11 | 2 | 0.24 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:66:LEU:HD12 | 2 | 0.24 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:66:LEU:HD13 | 2 | 0.24 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:66:LEU:HD11 | 2 | 0.24 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:66:LEU:HD12 | 2 | 0.24 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:66:LEU:HD13 | 2 | 0.24 |
| (3,233) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:10:PRO:HD3 | 11 | 0.24 |
| (3,233) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:32:PRO:HD2 | 11 | 0.24 |
| (3,20) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:59:GLN:HG2 | 12 | 0.24 |
| (3,20) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:60:GLU:HG3 | 12 | 0.24 |
| (3,20) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:59:GLN:HG2 | 20 | 0.24 |
| (3,20) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:60:GLU:HG3 | 20 | 0.24 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:27:LYS:HG3 | 7 | 0.24 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB2 | 7 | 0.24 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB3 | 7 | 0.24 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB1 | 7 | 0.24 |
| (3,157) | 1:A:5:LEU:HB3 | 1:A:7:TYR:H | 7 | 0.24 |
| (3,157) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HB2 | 7 | 0.24 |
| (3,139) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:29:LEU:HD13 | 9 | 0.24 |
| (3,139) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:29:LEU:HD12 | 9 | 0.24 |
| (3,139) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:29:LEU:HD11 | 9 | 0.24 |
| (3,139) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:29:LEU:HD13 | 9 | 0.24 |
| (3,139) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:29:LEU:HD12 | 9 | 0.24 |
| (3,139) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:29:LEU:HD11 | 9 | 0.24 |
| (3,134) | 1:A:41:ARG:HA | 1:A:42:LEU:HB3 | 4 | 0.24 |
| (3,134) | 1:A:41:ARG:HA | 1:A:48:GLN:HG2 | 4 | 0.24 |
| (3,134) | 1:A:41:ARG:HA | 1:A:48:GLN:HG3 | 4 | 0.24 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HD13 | 3 | 0.24 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HD12 | 3 | 0.24 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HD11 | 3 | 0.24 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG21 | 3 | 0.24 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG23 | 3 | 0.24 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG22 | 3 | 0.24 |
| (1,975) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:27:LYS:H | 2 | 0.24 |
| (1,975) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:27:LYS:H | 2 | 0.24 |
| (1,975) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:27:LYS:H | 2 | 0.24 |
| (1,922) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:49:VAL:HG11 | 1 | 0.24 |
| (1,922) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:49:VAL:HG13 | 1 | 0.24 |
| (1,922) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:49:VAL:HG12 | 1 | 0.24 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 1 | 0.24 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 1 | 0.24 |
| (1,9) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 1 | 0.24 |
| (1,674) | 1:A:22:ASN:HA | 1:A:22:ASN:HB3 | 16 | 0.24 |
| (1,644) | 1:A:34:CYS:HA | 1:A:34:CYS:HB3 | 1 | 0.24 |
| (1,640) | 1:A:5:LEU:HA | 1:A:5:LEU:HB2 | 4 | 0.24 |
| (1,640) | 1:A:5:LEU:HA | 1:A:5:LEU:HB2 | 14 | 0.24 |
| (1,607) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HD2 | 15 | 0.24 |
| (1,563) | 1:A:49:VAL:HA | 1:A:49:VAL:HB | 5 | 0.24 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG21 | 15 | 0.24 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG23 | 15 | 0.24 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG22 | 15 | 0.24 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG21 | 20 | 0.24 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG23 | 20 | 0.24 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG22 | 20 | 0.24 |
| (1,457) | 1:A:37:GLN:HE22 | 1:A:9:CYS:HB3 | 18 | 0.24 |
| (1,416) | 1:A:28:ILE:H | 1:A:27:LYS:HD2 | 14 | 0.24 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,416) | 1:A:28:ILE:H | 1:A:27:LYS:HD2 | 19 | 0.24 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG22 | 3 | 0.24 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG21 | 3 | 0.24 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG23 | 3 | 0.24 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG22 | 13 | 0.24 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG21 | 13 | 0.24 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG23 | 13 | 0.24 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG22 | 15 | 0.24 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG21 | 15 | 0.24 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG23 | 15 | 0.24 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG22 | 17 | 0.24 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG21 | 17 | 0.24 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG23 | 17 | 0.24 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG22 | 19 | 0.24 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG21 | 19 | 0.24 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG23 | 19 | 0.24 |
| (1,351) | 1:A:11:CYS:H | 1:A:10:PRO:HB3 | 9 | 0.24 |
| (1,300) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:20:ARG:HB3 | 5 | 0.24 |
| (1,290) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:63:GLU:HG2 | 5 | 0.24 |
| (1,220) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:47:ARG:HG3 | 19 | 0.24 |
| (1,163) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:67:ASN:HB3 | 12 | 0.24 |
| (1,1188) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 4 | 0.24 |
| (1,1098) | 1:A:48:GLN:HA | 1:A:41:ARG:HG3 | 19 | 0.24 |
| (1,1098) | 1:A:48:GLN:HA | 1:A:41:ARG:HG3 | 20 | 0.24 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ARG:HB3 | 3 | 0.24 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ARG:HB3 | 3 | 0.24 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ARG:HB3 | 3 | 0.24 |
| (1,1091) | 1:A:44:ASN:HB2 | 1:A:45:ASN:HA | 8 | 0.24 |
| (1,1028) | 1:A:38:ILE:HG12 | 1:A:37:GLN:HA | 20 | 0.24 |
| (1,102) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:20:ARG:HB2 | 15 | 0.24 |
| (3,75) | 1:A:31:THR:H | 1:A:33:ASN:HD22 | 4 | 0.23 |
| (3,75) | 1:A:31:THR:H | 1:A:37:GLN:HE21 | 4 | 0.23 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB2 | 11 | 0.23 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB3 | 11 | 0.23 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB1 | 11 | 0.23 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB2 | 11 | 0.23 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB3 | 11 | 0.23 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB1 | 11 | 0.23 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB2 | 11 | 0.23 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB3 | 11 | 0.23 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB1 | 11 | 0.23 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD11 | 2 | 0.23 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD12 | 2 | 0.23 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD13 | 2 | 0.23 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HG | 2 | 0.23 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD11 | 3 | 0.23 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD12 | 3 | 0.23 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD13 | 3 | 0.23 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HG | 3 | 0.23 |
| (3,286) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:68:LYS:HD2 | 15 | 0.23 |
| (3,286) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:64:LYS:HD2 | 15 | 0.23 |
| (3,286) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:66:LEU:HB3 | 15 | 0.23 |
| (3,282) | 1:A:65:ALA:HA | 1:A:28:ILE:HG12 | 17 | 0.23 |
| (3,282) | 1:A:65:ALA:HA | 1:A:66:LEU:HB3 | 17 | 0.23 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:55:LEU:HB3 | 4 | 0.23 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:55:LEU:HB3 | 4 | 0.23 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:55:LEU:HB3 | 4 | 0.23 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB2 | 4 | 0.23 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB3 | 4 | 0.23 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB1 | 4 | 0.23 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB2 | 4 | 0.23 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB3 | 4 | 0.23 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB1 | 4 | 0.23 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB2 | 4 | 0.23 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB3 | 4 | 0.23 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB1 | 4 | 0.23 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:55:LEU:HB3 | 10 | 0.23 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:55:LEU:HB3 | 10 | 0.23 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:55:LEU:HB3 | 10 | 0.23 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB2 | 10 | 0.23 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB3 | 10 | 0.23 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB1 | 10 | 0.23 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB2 | 10 | 0.23 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB3 | 10 | 0.23 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB1 | 10 | 0.23 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB2 | 10 | 0.23 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB3 | 10 | 0.23 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB1 | 10 | 0.23 |
| (3,246) | 1:A:39:VAL:HA | 1:A:29:LEU:HB3 | 15 | 0.23 |
| (3,246) | 1:A:39:VAL:HA | 1:A:27:LYS:HB3 | 15 | 0.23 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG21 | 11 | 0.23 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG23 | 11 | 0.23 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG22 | 11 | 0.23 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD13 | 11 | 0.23 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD12 | 11 | 0.23 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD11 | 11 | 0.23 |
| (3,18) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:20:ARG:HG3 | 16 | 0.23 |
| (3,18) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 16 | 0.23 |
| (3,18) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 16 | 0.23 |
| (3,18) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 16 | 0.23 |
| (3,170) | 1:A:16:SER:H | 1:A:15:GLU:HG2 | 4 | 0.23 |
| (3,170) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:50:CYS:H | 4 | 0.23 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:18:ILE:HG23 | 11 | 0.23 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:18:ILE:HG22 | 11 | 0.23 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:18:ILE:HG21 | 11 | 0.23 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:23:VAL:HG13 | 11 | 0.23 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:23:VAL:HG11 | 11 | 0.23 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:23:VAL:HG12 | 11 | 0.23 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:42:LEU:HD21 | 11 | 0.23 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:42:LEU:HD23 | 11 | 0.23 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:42:LEU:HD22 | 11 | 0.23 |
| (3,156) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HG2 | 3 | 0.23 |
| (3,156) | 1:A:43:LYS:HE2 | 1:A:43:LYS:HG3 | 3 | 0.23 |
| (3,153) | 1:A:41:ARG:HA | 1:A:41:ARG:HD3 | 8 | 0.23 |
| (3,153) | 1:A:41:ARG:HD3 | 1:A:48:GLN:HA | 8 | 0.23 |
| (3,134) | 1:A:41:ARG:HA | 1:A:42:LEU:HB3 | 10 | 0.23 |
| (3,134) | 1:A:41:ARG:HA | 1:A:48:GLN:HG2 | 10 | 0.23 |
| (3,134) | 1:A:41:ARG:HA | 1:A:48:GLN:HG3 | 10 | 0.23 |
| (3,131) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HB3 | 5 | 0.23 |
| (3,131) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HD2 | 5 | 0.23 |
| (3,131) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HB3 | 7 | 0.23 |
| (3,131) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HD2 | 7 | 0.23 |
| (3,131) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HB3 | 13 | 0.23 |
| (3,131) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HD2 | 13 | 0.23 |
| (3,131) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HB3 | 17 | 0.23 |
| (3,131) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HD2 | 17 | 0.23 |
| (3,108) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:56:LYS:HD2 | 8 | 0.23 |
| (3,108) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:55:LEU:HG | 8 | 0.23 |
| (3,108) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:56:LYS:HD2 | 16 | 0.23 |
| (3,108) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:55:LEU:HG | 16 | 0.23 |
| (3,108) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:56:LYS:HD2 | 20 | 0.23 |
| (3,108) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:55:LEU:HG | 20 | 0.23 |
| (1,855) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 13 | 0.23 |
| (1,855) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 13 | 0.23 |
| (1,855) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 13 | 0.23 |
| (1,792) | 1:A:45:ASN:HB2 | 1:A:45:ASN:HA | 1 | 0.23 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,745) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:59:GLN:HA | 10 | 0.23 |
| (1,718) | 1:A:47:ARG:HD3 | 1:A:47:ARG:HG3 | 7 | 0.23 |
| (1,706) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:50:CYS:HB2 | 1 | 0.23 |
| (1,706) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:50:CYS:HB2 | 5 | 0.23 |
| (1,69) | 1:A:35:ALA:H | 1:A:34:CYS:HB2 | 10 | 0.23 |
| (1,644) | 1:A:34:CYS:HA | 1:A:34:CYS:HB3 | 10 | 0.23 |
| (1,640) | 1:A:5:LEU:HA | 1:A:5:LEU:HB2 | 1 | 0.23 |
| (1,640) | 1:A:5:LEU:HA | 1:A:5:LEU:HB2 | 8 | 0.23 |
| (1,640) | 1:A:5:LEU:HA | 1:A:5:LEU:HB2 | 9 | 0.23 |
| (1,640) | 1:A:5:LEU:HA | 1:A:5:LEU:HB2 | 13 | 0.23 |
| (1,640) | 1:A:5:LEU:HA | 1:A:5:LEU:HB2 | 15 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HD2 | 20 | 0.23 |
| (1,590) | 1:A:7:TYR:H | 1:A:6:SER:HA | 13 | 0.23 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG23 | 5 | 0.23 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG22 | 5 | 0.23 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG21 | 5 | 0.23 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG21 | 4 | 0.23 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG23 | 4 | 0.23 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG22 | 4 | 0.23 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG21 | 17 | 0.23 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG23 | 17 | 0.23 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG22 | 17 | 0.23 |
| (1,493) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD21 | 4 | 0.23 |
| (1,493) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD23 | 4 | 0.23 |
| (1,493) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD22 | 4 | 0.23 |
| (1,493) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD21 | 12 | 0.23 |
| (1,493) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD23 | 12 | 0.23 |
| (1,493) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD22 | 12 | 0.23 |
| (1,416) | 1:A:28:ILE:H | 1:A:27:LYS:HD2 | 5 | 0.23 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG22 | 1 | 0.23 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG21 | 1 | 0.23 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG23 | 1 | 0.23 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG22 | 11 | 0.23 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG21 | 11 | 0.23 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG23 | 11 | 0.23 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG22 | 12 | 0.23 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG21 | 12 | 0.23 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG23 | 12 | 0.23 |
| (1,377) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:18:ILE:H | 7 | 0.23 |
| (1,351) | 1:A:11:CYS:H | 1:A:10:PRO:HB3 | 5 | 0.23 |
| (1,304) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:20:ARG:HB2 | 16 | 0.23 |
| (1,279) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HB3 | 15 | 0.23 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,254) | 1:A:16:SER:H | 1:A:15:GLU:HB2 | 1 | 0.23 |
| (1,244) | 1:A:18:ILE:H | 1:A:18:ILE:HG12 | 3 | 0.23 |
| (1,235) | 1:A:4:SER:H | 1:A:4:SER:HB3 | 12 | 0.23 |
| (1,180) | 1:A:3:VAL:H | 1:A:3:VAL:HG12 | 14 | 0.23 |
| (1,180) | 1:A:3:VAL:H | 1:A:3:VAL:HG11 | 14 | 0.23 |
| (1,180) | 1:A:3:VAL:H | 1:A:3:VAL:HG13 | 14 | 0.23 |
| (1,179) | 1:A:3:VAL:H | 1:A:2:PRO:HB2 | 3 | 0.23 |
| (1,164) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:9:CYS:HB3 | 18 | 0.23 |
| (1,156) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HB3 | 12 | 0.23 |
| (1,150) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:15:GLU:HG2 | 14 | 0.23 |
| (1,142) | 1:A:8:ARG:H | 1:A:8:ARG:HB2 | 9 | 0.23 |
| (1,1188) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 2 | 0.23 |
| (1,1188) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 11 | 0.23 |
| (1,1158) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:58:ILE:HA | 11 | 0.23 |
| (1,1099) | 1:A:48:GLN:HG3 | 1:A:41:ARG:HG2 | 2 | 0.23 |
| (1,1098) | 1:A:48:GLN:HA | 1:A:41:ARG:HG3 | 1 | 0.23 |
| (1,1091) | 1:A:44:ASN:HB2 | 1:A:45:ASN:HA | 12 | 0.23 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB2 | 7 | 0.23 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB3 | 7 | 0.23 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB1 | 7 | 0.23 |
| (1,1032) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:36:LEU:HB2 | 13 | 0.23 |
| (1,1032) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:36:LEU:HB2 | 13 | 0.23 |
| (1,1032) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:36:LEU:HB2 | 13 | 0.23 |
| (1,103) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:20:ARG:HB3 | 4 | 0.23 |
| (1,1022) | 1:A:38:ILE:HG21 | 1:A:28:ILE:HG12 | 11 | 0.23 |
| (1,1022) | 1:A:38:ILE:HG23 | 1:A:28:ILE:HG12 | 11 | 0.23 |
| (1,1022) | 1:A:38:ILE:HG22 | 1:A:28:ILE:HG12 | 11 | 0.23 |
| (3,98) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:46:ASN:HB2 | 10 | 0.22 |
| (3,98) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:47:ARG:HD2 | 10 | 0.22 |
| (3,75) | 1:A:31:THR:H | 1:A:33:ASN:HD22 | 8 | 0.22 |
| (3,75) | 1:A:31:THR:H | 1:A:37:GLN:HE21 | 8 | 0.22 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB2 | 17 | 0.22 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB3 | 17 | 0.22 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB1 | 17 | 0.22 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB2 | 17 | 0.22 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB3 | 17 | 0.22 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB1 | 17 | 0.22 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB2 | 17 | 0.22 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB3 | 17 | 0.22 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB1 | 17 | 0.22 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD11 | 9 | 0.22 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD12 | 9 | 0.22 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD13 | 9 | 0.22 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HG | 9 | 0.22 |
| (3,35) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:46:ASN:HB2 | 3 | 0.22 |
| (3,35) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:47:ARG:HD2 | 3 | 0.22 |
| (3,31) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:50:CYS:HB3 | 19 | 0.22 |
| (3,31) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:52:ASP:HA | 19 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:55:LEU:HB3 | 1 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:55:LEU:HB3 | 1 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:55:LEU:HB3 | 1 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB2 | 1 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB3 | 1 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB1 | 1 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB2 | 1 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB3 | 1 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB1 | 1 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB2 | 1 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB3 | 1 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB1 | 1 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:55:LEU:HB3 | 2 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:55:LEU:HB3 | 2 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:55:LEU:HB3 | 2 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB2 | 2 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB3 | 2 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB1 | 2 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB2 | 2 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB3 | 2 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB1 | 2 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB2 | 2 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB3 | 2 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB1 | 2 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:55:LEU:HB3 | 11 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:55:LEU:HB3 | 11 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:55:LEU:HB3 | 11 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB2 | 11 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB3 | 11 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB1 | 11 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB2 | 11 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB3 | 11 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB1 | 11 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB2 | 11 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB3 | 11 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB1 | 11 | 0.22 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:55:LEU:HB3 | 18 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:55:LEU:HB3 | 18 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:55:LEU:HB3 | 18 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB2 | 18 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB3 | 18 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB1 | 18 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB2 | 18 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB3 | 18 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB1 | 18 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB2 | 18 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB3 | 18 | 0.22 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB1 | 18 | 0.22 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG21 | 7 | 0.22 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG23 | 7 | 0.22 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG22 | 7 | 0.22 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD13 | 7 | 0.22 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD12 | 7 | 0.22 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD11 | 7 | 0.22 |
| (3,217) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HA | 4 | 0.22 |
| (3,217) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:24:LYS:HE2 | 4 | 0.22 |
| (3,217) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:43:LYS:HE2 | 4 | 0.22 |
| (3,20) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:59:GLN:HG2 | 6 | 0.22 |
| (3,20) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:60:GLU:HG3 | 6 | 0.22 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:27:LYS:HG3 | 9 | 0.22 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB2 | 9 | 0.22 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB3 | 9 | 0.22 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB1 | 9 | 0.22 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:27:LYS:HG3 | 14 | 0.22 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB2 | 14 | 0.22 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB3 | 14 | 0.22 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB1 | 14 | 0.22 |
| (3,156) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HG2 | 16 | 0.22 |
| (3,156) | 1:A:43:LYS:HE2 | 1:A:43:LYS:HG3 | 16 | 0.22 |
| (3,131) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HB3 | 4 | 0.22 |
| (3,131) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HD2 | 4 | 0.22 |
| (3,131) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HB3 | 8 | 0.22 |
| (3,131) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HD2 | 8 | 0.22 |
| (3,131) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HB3 | 10 | 0.22 |
| (3,131) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HD2 | 10 | 0.22 |
| (3,131) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HB3 | 14 | 0.22 |
| (3,131) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HD2 | 14 | 0.22 |
| (3,131) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HB3 | 19 | 0.22 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,131) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HD2 | 19 | 0.22 |
| (3,131) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HB3 | 20 | 0.22 |
| (3,131) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HD2 | 20 | 0.22 |
| (1,975) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:27:LYS:H | 6 | 0.22 |
| (1,975) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:27:LYS:H | 6 | 0.22 |
| (1,975) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:27:LYS:H | 6 | 0.22 |
| (1,967) | 1:A:24:LYS:HG2 | 1:A:42:LEU:HA | 1 | 0.22 |
| (1,948) | 1:A:21:ALA:HA | 1:A:22:ASN:HA | 9 | 0.22 |
| (1,948) | 1:A:21:ALA:HA | 1:A:22:ASN:HA | 20 | 0.22 |
| (1,915) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HG3 | 20 | 0.22 |
| (1,904) | 1:A:12:ARG:HG2 | 1:A:12:ARG:HA | 20 | 0.22 |
| (1,889) | 1:A:57:TRP:HB2 | 1:A:57:TRP:HD1 | 7 | 0.22 |
| (1,889) | 1:A:57:TRP:HB2 | 1:A:57:TRP:HD1 | 9 | 0.22 |
| (1,882) | 1:A:54:LYS:HD2 | 1:A:54:LYS:HA | 3 | 0.22 |
| (1,745) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:59:GLN:HA | 7 | 0.22 |
| (1,719) | 1:A:47:ARG:HD2 | 1:A:47:ARG:HB3 | 1 | 0.22 |
| (1,718) | 1:A:47:ARG:HD3 | 1:A:47:ARG:HG3 | 11 | 0.22 |
| (1,640) | 1:A:5:LEU:HA | 1:A:5:LEU:HB2 | 10 | 0.22 |
| (1,640) | 1:A:5:LEU:HA | 1:A:5:LEU:HB2 | 11 | 0.22 |
| (1,640) | 1:A:5:LEU:HA | 1:A:5:LEU:HB2 | 18 | 0.22 |
| (1,640) | 1:A:5:LEU:HA | 1:A:5:LEU:HB2 | 20 | 0.22 |
| (1,563) | 1:A:49:VAL:HA | 1:A:49:VAL:HB | 6 | 0.22 |
| (1,563) | 1:A:49:VAL:HA | 1:A:49:VAL:HB | 9 | 0.22 |
| (1,507) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:48:GLN:HB2 | 10 | 0.22 |
| (1,501) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:48:GLN:HE22 | 6 | 0.22 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG21 | 3 | 0.22 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG23 | 3 | 0.22 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG22 | 3 | 0.22 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG21 | 8 | 0.22 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG23 | 8 | 0.22 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG22 | 8 | 0.22 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG21 | 14 | 0.22 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG23 | 14 | 0.22 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG22 | 14 | 0.22 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG21 | 18 | 0.22 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG23 | 18 | 0.22 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG22 | 18 | 0.22 |
| (1,493) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD21 | 11 | 0.22 |
| (1,493) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD23 | 11 | 0.22 |
| (1,493) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD22 | 11 | 0.22 |
| (1,465) | 1:A:37:GLN:HE21 | 1:A:29:LEU:HB2 | 18 | 0.22 |
| (1,461) | 1:A:37:GLN:HE21 | 1:A:10:PRO:HD3 | 15 | 0.22 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,416) | 1:A:28:ILE:H | 1:A:27:LYS:HD2 | 17 | 0.22 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG22 | 18 | 0.22 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG21 | 18 | 0.22 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG23 | 18 | 0.22 |
| (1,325) | 1:A:6:SER:H | 1:A:6:SER:HB2 | 3 | 0.22 |
| (1,300) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:20:ARG:HB3 | 11 | 0.22 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD12 | 17 | 0.22 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD13 | 17 | 0.22 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD11 | 17 | 0.22 |
| (1,290) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:63:GLU:HG2 | 2 | 0.22 |
| (1,290) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:63:GLU:HG2 | 4 | 0.22 |
| (1,290) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:63:GLU:HG2 | 14 | 0.22 |
| (1,279) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HB3 | 2 | 0.22 |
| (1,248) | 1:A:31:THR:H | 1:A:36:LEU:HA | 5 | 0.22 |
| (1,180) | 1:A:3:VAL:H | 1:A:3:VAL:HG12 | 12 | 0.22 |
| (1,180) | 1:A:3:VAL:H | 1:A:3:VAL:HG11 | 12 | 0.22 |
| (1,180) | 1:A:3:VAL:H | 1:A:3:VAL:HG13 | 12 | 0.22 |
| (1,1188) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 5 | 0.22 |
| (1,1188) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 6 | 0.22 |
| (1,1188) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 7 | 0.22 |
| (1,1185) | 1:A:61:TYR:HA | 1:A:64:LYS:HD2 | 10 | 0.22 |
| (1,1098) | 1:A:48:GLN:HA | 1:A:41:ARG:HG3 | 9 | 0.22 |
| (1,1091) | 1:A:44:ASN:HB2 | 1:A:45:ASN:HA | 4 | 0.22 |
| (1,1091) | 1:A:44:ASN:HB2 | 1:A:45:ASN:HA | 11 | 0.22 |
| (1,1091) | 1:A:44:ASN:HB2 | 1:A:45:ASN:HA | 19 | 0.22 |
| (1,1022) | 1:A:38:ILE:HG21 | 1:A:28:ILE:HG12 | 8 | 0.22 |
| (1,1022) | 1:A:38:ILE:HG23 | 1:A:28:ILE:HG12 | 8 | 0.22 |
| (1,1022) | 1:A:38:ILE:HG22 | 1:A:28:ILE:HG12 | 8 | 0.22 |
| (1,1001) | 1:A:32:PRO:HG3 | 1:A:32:PRO:HA | 3 | 0.22 |
| (1,1001) | 1:A:32:PRO:HG3 | 1:A:32:PRO:HA | 12 | 0.22 |
| (3,93) | 1:A:41:ARG:H | 1:A:24:LYS:HG3 | 2 | 0.21 |
| (3,93) | 1:A:41:ARG:H | 1:A:51:ILE:HG13 | 2 | 0.21 |
| (3,73) | 1:A:29:LEU:H | 1:A:28:ILE:HG13 | 4 | 0.21 |
| (3,73) | 1:A:29:LEU:H | 1:A:38:ILE:HG12 | 4 | 0.21 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HB2 | 4 | 0.21 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 4 | 0.21 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 4 | 0.21 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 4 | 0.21 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB2 | 1 | 0.21 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB3 | 1 | 0.21 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB1 | 1 | 0.21 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB2 | 1 | 0.21 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB3 | 1 | 0.21 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB1 | 1 | 0.21 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB2 | 1 | 0.21 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB3 | 1 | 0.21 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB1 | 1 | 0.21 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB2 | 6 | 0.21 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB3 | 6 | 0.21 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB1 | 6 | 0.21 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB2 | 6 | 0.21 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB3 | 6 | 0.21 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB1 | 6 | 0.21 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB2 | 6 | 0.21 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB3 | 6 | 0.21 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB1 | 6 | 0.21 |
| (3,44) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 11 | 0.21 |
| (3,44) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 11 | 0.21 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD11 | 5 | 0.21 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD12 | 5 | 0.21 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HD13 | 5 | 0.21 |
| (3,43) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HG | 5 | 0.21 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD11 | 16 | 0.21 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD13 | 16 | 0.21 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD12 | 16 | 0.21 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HG | 16 | 0.21 |
| (3,35) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:46:ASN:HB2 | 11 | 0.21 |
| (3,35) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:47:ARG:HD2 | 11 | 0.21 |
| (3,35) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:46:ASN:HB2 | 20 | 0.21 |
| (3,35) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:47:ARG:HD2 | 20 | 0.21 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:55:LEU:HB3 | 3 | 0.21 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:55:LEU:HB3 | 3 | 0.21 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:55:LEU:HB3 | 3 | 0.21 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB2 | 3 | 0.21 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB3 | 3 | 0.21 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB1 | 3 | 0.21 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB2 | 3 | 0.21 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB3 | 3 | 0.21 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB1 | 3 | 0.21 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB2 | 3 | 0.21 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB3 | 3 | 0.21 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB1 | 3 | 0.21 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:55:LEU:HB3 | 9 | 0.21 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:55:LEU:HB3 | 9 | 0.21 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:55:LEU:HB3 | 9 | 0.21 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB2 | 9 | 0.21 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB3 | 9 | 0.21 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB1 | 9 | 0.21 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB2 | 9 | 0.21 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB3 | 9 | 0.21 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB1 | 9 | 0.21 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB2 | 9 | 0.21 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB3 | 9 | 0.21 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB1 | 9 | 0.21 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:55:LEU:HB3 | 12 | 0.21 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:55:LEU:HB3 | 12 | 0.21 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:55:LEU:HB3 | 12 | 0.21 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB2 | 12 | 0.21 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB3 | 12 | 0.21 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB1 | 12 | 0.21 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB2 | 12 | 0.21 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB3 | 12 | 0.21 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB1 | 12 | 0.21 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB2 | 12 | 0.21 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB3 | 12 | 0.21 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB1 | 12 | 0.21 |
| (3,268) | 1:A:58:ILE:HA | 1:A:55:LEU:H | 14 | 0.21 |
| (3,268) | 1:A:58:ILE:HA | 1:A:61:TYR:HD2 | 14 | 0.21 |
| (3,268) | 1:A:58:ILE:HA | 1:A:55:LEU:H | 15 | 0.21 |
| (3,268) | 1:A:58:ILE:HA | 1:A:61:TYR:HD2 | 15 | 0.21 |
| (3,233) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:10:PRO:HD3 | 7 | 0.21 |
| (3,233) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:32:PRO:HD2 | 7 | 0.21 |
| (3,20) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:59:GLN:HG2 | 2 | 0.21 |
| (3,20) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:60:GLU:HG3 | 2 | 0.21 |
| (3,20) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:59:GLN:HG2 | 15 | 0.21 |
| (3,20) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:60:GLU:HG3 | 15 | 0.21 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:27:LYS:HG3 | 10 | 0.21 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB2 | 10 | 0.21 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB3 | 10 | 0.21 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB1 | 10 | 0.21 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:27:LYS:HG3 | 17 | 0.21 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB2 | 17 | 0.21 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB3 | 17 | 0.21 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB1 | 17 | 0.21 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:27:LYS:HG3 | 18 | 0.21 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB2 | 18 | 0.21 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB3 | 18 | 0.21 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB1 | 18 | 0.21 |
| (3,169) | 1:A:7:TYR:HB3 | 1:A:8:ARG:HB2 | 16 | 0.21 |
| (3,169) | 1:A:67:ASN:HB3 | 1:A:68:LYS:HD2 | 16 | 0.21 |
| (3,126) | 1:A:50:CYS:HA | 1:A:49:VAL:HG11 | 2 | 0.21 |
| (3,126) | 1:A:50:CYS:HA | 1:A:49:VAL:HG13 | 2 | 0.21 |
| (3,126) | 1:A:50:CYS:HA | 1:A:49:VAL:HG12 | 2 | 0.21 |
| (3,126) | 1:A:50:CYS:HA | 1:A:39:VAL:HG23 | 2 | 0.21 |
| (3,126) | 1:A:50:CYS:HA | 1:A:39:VAL:HG21 | 2 | 0.21 |
| (3,126) | 1:A:50:CYS:HA | 1:A:39:VAL:HG22 | 2 | 0.21 |
| (3,121) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HB2 | 16 | 0.21 |
| (3,121) | 1:A:47:ARG:HA | 1:A:47:ARG:HG3 | 16 | 0.21 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HD13 | 5 | 0.21 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HD12 | 5 | 0.21 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HD11 | 5 | 0.21 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG21 | 5 | 0.21 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG23 | 5 | 0.21 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG22 | 5 | 0.21 |
| (1,975) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:27:LYS:H | 16 | 0.21 |
| (1,975) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:27:LYS:H | 16 | 0.21 |
| (1,975) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:27:LYS:H | 16 | 0.21 |
| (1,948) | 1:A:21:ALA:HA | 1:A:22:ASN:HA | 10 | 0.21 |
| (1,889) | 1:A:57:TRP:HB2 | 1:A:57:TRP:HD1 | 2 | 0.21 |
| (1,889) | 1:A:57:TRP:HB2 | 1:A:57:TRP:HD1 | 15 | 0.21 |
| (1,889) | 1:A:57:TRP:HB2 | 1:A:57:TRP:HD1 | 16 | 0.21 |
| (1,889) | 1:A:57:TRP:HB2 | 1:A:57:TRP:HD1 | 17 | 0.21 |
| (1,889) | 1:A:57:TRP:HB2 | 1:A:57:TRP:HD1 | 19 | 0.21 |
| (1,889) | 1:A:57:TRP:HB2 | 1:A:57:TRP:HD1 | 20 | 0.21 |
| (1,802) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:67:ASN:HA | 1 | 0.21 |
| (1,769) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:22:ASN:HB3 | 8 | 0.21 |
| (1,745) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:59:GLN:HA | 4 | 0.21 |
| (1,745) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:59:GLN:HA | 16 | 0.21 |
| (1,719) | 1:A:47:ARG:HD2 | 1:A:47:ARG:HB3 | 5 | 0.21 |
| (1,718) | 1:A:47:ARG:HD3 | 1:A:47:ARG:HG3 | 3 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HB3 | 13 | 0.21 |
| (1,69) | 1:A:35:ALA:H | 1:A:34:CYS:HB2 | 1 | 0.21 |
| (1,687) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG23 | 11 | 0.21 |
| (1,687) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG21 | 11 | 0.21 |
| (1,687) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG22 | 11 | 0.21 |
| (1,686) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:9:CYS:HB3 | 9 | 0.21 |
| (1,593) | 1:A:8:ARG:H | 1:A:7:TYR:HA | 15 | 0.21 |
| (1,563) | 1:A:49:VAL:HA | 1:A:49:VAL:HB | 13 | 0.21 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,563) | 1:A:49:VAL:HA | 1:A:49:VAL:HB | 19 | 0.21 |
| (1,501) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:48:GLN:HE22 | 9 | 0.21 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG21 | 6 | 0.21 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG23 | 6 | 0.21 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG22 | 6 | 0.21 |
| (1,493) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD21 | 20 | 0.21 |
| (1,493) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD23 | 20 | 0.21 |
| (1,493) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD22 | 20 | 0.21 |
| (1,416) | 1:A:28:ILE:H | 1:A:27:LYS:HD2 | 20 | 0.21 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG22 | 4 | 0.21 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG21 | 4 | 0.21 |
| (1,4) | 1:A:55:LEU:CD1 | 1:A:51:ILE:HG23 | 4 | 0.21 |
| (1,326) | 1:A:6:SER:H | 1:A:5:LEU:HB2 | 11 | 0.21 |
| (1,309) | 1:A:34:CYS:H | 1:A:34:CYS:HB3 | 7 | 0.21 |
| (1,309) | 1:A:34:CYS:H | 1:A:34:CYS:HB3 | 13 | 0.21 |
| (1,309) | 1:A:34:CYS:H | 1:A:34:CYS:HB3 | 15 | 0.21 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD12 | 7 | 0.21 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD13 | 7 | 0.21 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD11 | 7 | 0.21 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD12 | 19 | 0.21 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD13 | 19 | 0.21 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD11 | 19 | 0.21 |
| (1,290) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:63:GLU:HG2 | 3 | 0.21 |
| (1,290) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:63:GLU:HG2 | 11 | 0.21 |
| (1,290) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:63:GLU:HG2 | 12 | 0.21 |
| (1,248) | 1:A:31:THR:H | 1:A:36:LEU:HA | 13 | 0.21 |
| (1,248) | 1:A:31:THR:H | 1:A:36:LEU:HA | 20 | 0.21 |
| (1,179) | 1:A:3:VAL:H | 1:A:2:PRO:HB2 | 2 | 0.21 |
| (1,164) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:9:CYS:HB3 | 5 | 0.21 |
| (1,164) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:9:CYS:HB3 | 13 | 0.21 |
| (1,164) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:9:CYS:HB3 | 15 | 0.21 |
| (1,156) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HB3 | 1 | 0.21 |
| (1,156) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HB3 | 6 | 0.21 |
| (1,145) | 1:A:7:TYR:H | 1:A:7:TYR:HB3 | 16 | 0.21 |
| (1,1098) | 1:A:48:GLN:HA | 1:A:41:ARG:HG3 | 12 | 0.21 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ARG:HB3 | 12 | 0.21 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ARG:HB3 | 12 | 0.21 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ARG:HB3 | 12 | 0.21 |
| (1,1091) | 1:A:44:ASN:HB2 | 1:A:45:ASN:HA | 7 | 0.21 |
| (1,1091) | 1:A:44:ASN:HB2 | 1:A:45:ASN:HA | 10 | 0.21 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB2 | 17 | 0.21 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB3 | 17 | 0.21 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB1 | 17 | 0.21 |
| (1,1001) | 1:A:32:PRO:HG3 | 1:A:32:PRO:HA | 16 | 0.21 |
| (3,75) | 1:A:31:THR:H | 1:A:33:ASN:HD22 | 1 | 0.2 |
| (3,75) | 1:A:31:THR:H | 1:A:37:GLN:HE21 | 1 | 0.2 |
| (3,73) | 1:A:29:LEU:H | 1:A:28:ILE:HG13 | 10 | 0.2 |
| (3,73) | 1:A:29:LEU:H | 1:A:38:ILE:HG12 | 10 | 0.2 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB2 | 3 | 0.2 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB3 | 3 | 0.2 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB1 | 3 | 0.2 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB2 | 3 | 0.2 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB3 | 3 | 0.2 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB1 | 3 | 0.2 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB2 | 3 | 0.2 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB3 | 3 | 0.2 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB1 | 3 | 0.2 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB2 | 7 | 0.2 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB3 | 7 | 0.2 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB1 | 7 | 0.2 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB2 | 7 | 0.2 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB3 | 7 | 0.2 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB1 | 7 | 0.2 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB2 | 7 | 0.2 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB3 | 7 | 0.2 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB1 | 7 | 0.2 |
| (3,44) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 16 | 0.2 |
| (3,44) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 16 | 0.2 |
| (3,35) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:46:ASN:HB2 | 13 | 0.2 |
| (3,35) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:47:ARG:HD2 | 13 | 0.2 |
| (3,286) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:68:LYS:HD2 | 5 | 0.2 |
| (3,286) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:64:LYS:HD2 | 5 | 0.2 |
| (3,286) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:66:LEU:HB3 | 5 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:55:LEU:HB3 | 13 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:55:LEU:HB3 | 13 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:55:LEU:HB3 | 13 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB2 | 13 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB3 | 13 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB1 | 13 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB2 | 13 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB3 | 13 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB1 | 13 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB2 | 13 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB3 | 13 | 0.2 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB1 | 13 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:55:LEU:HB3 | 14 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:55:LEU:HB3 | 14 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:55:LEU:HB3 | 14 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB2 | 14 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB3 | 14 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB1 | 14 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB2 | 14 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB3 | 14 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB1 | 14 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB2 | 14 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB3 | 14 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB1 | 14 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:55:LEU:HB3 | 19 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:55:LEU:HB3 | 19 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:55:LEU:HB3 | 19 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB2 | 19 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB3 | 19 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB1 | 19 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB2 | 19 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB3 | 19 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB1 | 19 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB2 | 19 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB3 | 19 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB1 | 19 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:55:LEU:HB3 | 20 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:55:LEU:HB3 | 20 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:55:LEU:HB3 | 20 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB2 | 20 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB3 | 20 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB1 | 20 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB2 | 20 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB3 | 20 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB1 | 20 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB2 | 20 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB3 | 20 | 0.2 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB1 | 20 | 0.2 |
| (3,233) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:10:PRO:HD3 | 8 | 0.2 |
| (3,233) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:32:PRO:HD2 | 8 | 0.2 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG21 | 3 | 0.2 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG23 | 3 | 0.2 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG22 | 3 | 0.2 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD13 | 3 | 0.2 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD12 | 3 | 0.2 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD11 | 3 | 0.2 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG21 | 8 | 0.2 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG23 | 8 | 0.2 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG22 | 8 | 0.2 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD13 | 8 | 0.2 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD12 | 8 | 0.2 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD11 | 8 | 0.2 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG21 | 17 | 0.2 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG23 | 17 | 0.2 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG22 | 17 | 0.2 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD13 | 17 | 0.2 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD12 | 17 | 0.2 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD11 | 17 | 0.2 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HD1 | 15 | 0.2 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HD1 | 15 | 0.2 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HD1 | 15 | 0.2 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HE1 | 15 | 0.2 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HE1 | 15 | 0.2 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HE1 | 15 | 0.2 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:27:LYS:HG3 | 3 | 0.2 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB2 | 3 | 0.2 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB3 | 3 | 0.2 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB1 | 3 | 0.2 |
| (3,17) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:20:ARG:HD3 | 6 | 0.2 |
| (3,17) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:22:ASN:HB2 | 6 | 0.2 |
| (3,153) | 1:A:41:ARG:HA | 1:A:41:ARG:HD3 | 6 | 0.2 |
| (3,153) | 1:A:41:ARG:HD3 | 1:A:48:GLN:HA | 6 | 0.2 |
| (3,139) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:29:LEU:HD13 | 8 | 0.2 |
| (3,139) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:29:LEU:HD12 | 8 | 0.2 |
| (3,139) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:29:LEU:HD11 | 8 | 0.2 |
| (3,139) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:29:LEU:HD13 | 8 | 0.2 |
| (3,139) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:29:LEU:HD12 | 8 | 0.2 |
| (3,139) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:29:LEU:HD11 | 8 | 0.2 |
| (3,138) | 1:A:2:PRO:HD2 | 1:A:2:PRO:HB3 | 3 | 0.2 |
| (3,138) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:10:PRO:HB2 | 3 | 0.2 |
| (3,138) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:32:PRO:HB2 | 3 | 0.2 |
| (3,138) | 1:A:2:PRO:HD2 | 1:A:2:PRO:HB3 | 12 | 0.2 |
| (3,138) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:10:PRO:HB2 | 12 | 0.2 |
| (3,138) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:32:PRO:HB2 | 12 | 0.2 |
| (3,131) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HB3 | 3 | 0.2 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,131) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HD2 | 3 | 0.2 |
| (3,131) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HB3 | 16 | 0.2 |
| (3,131) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HD2 | 16 | 0.2 |
| (3,121) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HB2 | 9 | 0.2 |
| (3,121) | 1:A:47:ARG:HA | 1:A:47:ARG:HG3 | 9 | 0.2 |
| (3,12) | 1:A:42:LEU:H | 1:A:41:ARG:HD3 | 5 | 0.2 |
| (3,12) | 1:A:42:LEU:H | 1:A:45:ASN:HB3 | 5 | 0.2 |
| (3,108) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:56:LYS:HD2 | 3 | 0.2 |
| (3,108) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:55:LEU:HG | 3 | 0.2 |
| (3,108) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:56:LYS:HD2 | 11 | 0.2 |
| (3,108) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:55:LEU:HG | 11 | 0.2 |
| (1,986) | 1:A:28:ILE:HD13 | 1:A:28:ILE:HA | 7 | 0.2 |
| (1,986) | 1:A:28:ILE:HD12 | 1:A:28:ILE:HA | 7 | 0.2 |
| (1,986) | 1:A:28:ILE:HD11 | 1:A:28:ILE:HA | 7 | 0.2 |
| (1,971) | 1:A:43:LYS:HE2 | 1:A:43:LYS:HD2 | 3 | 0.2 |
| (1,971) | 1:A:43:LYS:HE2 | 1:A:43:LYS:HD2 | 8 | 0.2 |
| (1,971) | 1:A:43:LYS:HE2 | 1:A:43:LYS:HD2 | 16 | 0.2 |
| (1,971) | 1:A:43:LYS:HE2 | 1:A:43:LYS:HD2 | 18 | 0.2 |
| (1,941) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:18:ILE:HD12 | 15 | 0.2 |
| (1,941) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:18:ILE:HD13 | 15 | 0.2 |
| (1,941) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:18:ILE:HD11 | 15 | 0.2 |
| (1,889) | 1:A:57:TRP:HB2 | 1:A:57:TRP:HD1 | 1 | 0.2 |
| (1,889) | 1:A:57:TRP:HB2 | 1:A:57:TRP:HD1 | 3 | 0.2 |
| (1,889) | 1:A:57:TRP:HB2 | 1:A:57:TRP:HD1 | 8 | 0.2 |
| (1,889) | 1:A:57:TRP:HB2 | 1:A:57:TRP:HD1 | 10 | 0.2 |
| (1,889) | 1:A:57:TRP:HB2 | 1:A:57:TRP:HD1 | 13 | 0.2 |
| (1,889) | 1:A:57:TRP:HB2 | 1:A:57:TRP:HD1 | 14 | 0.2 |
| (1,802) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:67:ASN:HA | 5 | 0.2 |
| (1,790) | 1:A:31:THR:H | 1:A:30:ASN:HB3 | 20 | 0.2 |
| (1,745) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:59:GLN:HA | 12 | 0.2 |
| (1,745) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:59:GLN:HA | 14 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HB3 | 8 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HB3 | 18 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HB3 | 20 | 0.2 |
| (1,703) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:14:PHE:HA | 11 | 0.2 |
| (1,703) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:14:PHE:HA | 15 | 0.2 |
| (1,687) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG23 | 6 | 0.2 |
| (1,687) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG21 | 6 | 0.2 |
| (1,687) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG22 | 6 | 0.2 |
| (1,674) | 1:A:22:ASN:HA | 1:A:22:ASN:HB3 | 11 | 0.2 |
| (1,593) | 1:A:8:ARG:H | 1:A:7:TYR:HA | 9 | 0.2 |
| (1,575) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:24:LYS:HD2 | 11 | 0.2 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,563) | 1:A:49:VAL:HA | 1:A:49:VAL:HB | 8 | 0.2 |
| (1,513) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:14:PHE:HB2 | 18 | 0.2 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG21 | 12 | 0.2 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG23 | 12 | 0.2 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG22 | 12 | 0.2 |
| (1,493) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD21 | 13 | 0.2 |
| (1,493) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD23 | 13 | 0.2 |
| (1,493) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD22 | 13 | 0.2 |
| (1,393) | 1:A:22:ASN:H | 1:A:22:ASN:HB3 | 18 | 0.2 |
| (1,365) | 1:A:59:GLN:HE21 | 1:A:62:LEU:HD11 | 10 | 0.2 |
| (1,365) | 1:A:59:GLN:HE21 | 1:A:62:LEU:HD13 | 10 | 0.2 |
| (1,365) | 1:A:59:GLN:HE21 | 1:A:62:LEU:HD12 | 10 | 0.2 |
| (1,358) | 1:A:11:CYS:H | 1:A:9:CYS:HB2 | 16 | 0.2 |
| (1,309) | 1:A:34:CYS:H | 1:A:34:CYS:HB3 | 5 | 0.2 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD12 | 18 | 0.2 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD13 | 18 | 0.2 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD11 | 18 | 0.2 |
| (1,290) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:63:GLU:HG2 | 19 | 0.2 |
| (1,279) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HB3 | 19 | 0.2 |
| (1,249) | 1:A:31:THR:H | 1:A:31:THR:HB | 3 | 0.2 |
| (1,180) | 1:A:3:VAL:H | 1:A:3:VAL:HG12 | 15 | 0.2 |
| (1,180) | 1:A:3:VAL:H | 1:A:3:VAL:HG11 | 15 | 0.2 |
| (1,180) | 1:A:3:VAL:H | 1:A:3:VAL:HG13 | 15 | 0.2 |
| (1,16) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:26:LEU:HB2 | 3 | 0.2 |
| (1,150) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:15:GLU:HG2 | 15 | 0.2 |
| (1,145) | 1:A:7:TYR:H | 1:A:7:TYR:HB3 | 19 | 0.2 |
| (1,142) | 1:A:8:ARG:H | 1:A:8:ARG:HB2 | 10 | 0.2 |
| (1,132) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:23:VAL:HB | 11 | 0.2 |
| (1,132) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:23:VAL:HB | 14 | 0.2 |
| (1,1204) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:28:ILE:HG12 | 19 | 0.2 |
| (1,1204) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:28:ILE:HG12 | 19 | 0.2 |
| (1,1204) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:28:ILE:HG12 | 19 | 0.2 |
| (1,1188) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 19 | 0.2 |
| (1,1180) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:59:GLN:HA | 8 | 0.2 |
| (1,1180) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:59:GLN:HA | 17 | 0.2 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:59:GLN:HB2 | 14 | 0.2 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:59:GLN:HB2 | 14 | 0.2 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:59:GLN:HB2 | 14 | 0.2 |
| (1,1098) | 1:A:48:GLN:HA | 1:A:41:ARG:HG3 | 17 | 0.2 |
| (1,1098) | 1:A:48:GLN:HA | 1:A:41:ARG:HG3 | 18 | 0.2 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ARG:HB3 | 11 | 0.2 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ARG:HB3 | 11 | 0.2 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ARG:HB3 | 11 | 0.2 |
| (1,1001) | 1:A:32:PRO:HG3 | 1:A:32:PRO:HA | 17 | 0.2 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG22 | 7 | 0.2 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG21 | 7 | 0.2 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG23 | 7 | 0.2 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG22 | 18 | 0.2 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG21 | 18 | 0.2 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG23 | 18 | 0.2 |
| (3,8) | 1:A:35:ALA:H | 1:A:28:ILE:HG21 | 8 | 0.19 |
| (3,8) | 1:A:35:ALA:H | 1:A:28:ILE:HG23 | 8 | 0.19 |
| (3,8) | 1:A:35:ALA:H | 1:A:28:ILE:HG22 | 8 | 0.19 |
| (3,8) | 1:A:35:ALA:H | 1:A:36:LEU:HD13 | 8 | 0.19 |
| (3,8) | 1:A:35:ALA:H | 1:A:36:LEU:HD12 | 8 | 0.19 |
| (3,8) | 1:A:35:ALA:H | 1:A:36:LEU:HD11 | 8 | 0.19 |
| (3,8) | 1:A:35:ALA:H | 1:A:36:LEU:HD22 | 8 | 0.19 |
| (3,8) | 1:A:35:ALA:H | 1:A:36:LEU:HD23 | 8 | 0.19 |
| (3,8) | 1:A:35:ALA:H | 1:A:36:LEU:HD21 | 8 | 0.19 |
| (3,75) | 1:A:31:THR:H | 1:A:33:ASN:HD22 | 12 | 0.19 |
| (3,75) | 1:A:31:THR:H | 1:A:37:GLN:HE21 | 12 | 0.19 |
| (3,69) | 1:A:22:ASN:HD21 | 1:A:42:LEU:HB2 | 10 | 0.19 |
| (3,69) | 1:A:22:ASN:HD21 | 1:A:43:LYS:HD2 | 10 | 0.19 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB2 | 2 | 0.19 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB3 | 2 | 0.19 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB1 | 2 | 0.19 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB2 | 2 | 0.19 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB3 | 2 | 0.19 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB1 | 2 | 0.19 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB2 | 2 | 0.19 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB3 | 2 | 0.19 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB1 | 2 | 0.19 |
| (3,48) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:20:ARG:HG3 | 16 | 0.19 |
| (3,48) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 16 | 0.19 |
| (3,48) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 16 | 0.19 |
| (3,48) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 16 | 0.19 |
| (3,44) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 3 | 0.19 |
| (3,44) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 3 | 0.19 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD11 | 1 | 0.19 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD13 | 1 | 0.19 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD12 | 1 | 0.19 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HG | 1 | 0.19 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD11 | 4 | 0.19 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD13 | 4 | 0.19 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD12 | 4 | 0.19 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HG | 4 | 0.19 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD11 | 8 | 0.19 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD13 | 8 | 0.19 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD12 | 8 | 0.19 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HG | 8 | 0.19 |
| (3,31) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:50:CYS:HB3 | 7 | 0.19 |
| (3,31) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:52:ASP:HA | 7 | 0.19 |
| (3,286) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:68:LYS:HD2 | 19 | 0.19 |
| (3,286) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:64:LYS:HD2 | 19 | 0.19 |
| (3,286) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:66:LEU:HB3 | 19 | 0.19 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:55:LEU:HB3 | 5 | 0.19 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:55:LEU:HB3 | 5 | 0.19 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:55:LEU:HB3 | 5 | 0.19 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB2 | 5 | 0.19 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB3 | 5 | 0.19 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB1 | 5 | 0.19 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB2 | 5 | 0.19 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB3 | 5 | 0.19 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB1 | 5 | 0.19 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB2 | 5 | 0.19 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB3 | 5 | 0.19 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB1 | 5 | 0.19 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:55:LEU:HB3 | 7 | 0.19 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:55:LEU:HB3 | 7 | 0.19 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:55:LEU:HB3 | 7 | 0.19 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB2 | 7 | 0.19 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB3 | 7 | 0.19 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB1 | 7 | 0.19 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB2 | 7 | 0.19 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB3 | 7 | 0.19 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB1 | 7 | 0.19 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB2 | 7 | 0.19 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB3 | 7 | 0.19 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB1 | 7 | 0.19 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:55:LEU:HB3 | 16 | 0.19 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:55:LEU:HB3 | 16 | 0.19 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:55:LEU:HB3 | 16 | 0.19 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB2 | 16 | 0.19 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB3 | 16 | 0.19 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB1 | 16 | 0.19 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB2 | 16 | 0.19 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB3 | 16 | 0.19 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB1 | 16 | 0.19 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB2 | 16 | 0.19 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB3 | 16 | 0.19 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB1 | 16 | 0.19 |
| (3,266) | 1:A:57:TRP:HA | 1:A:60:GLU:HG2 | 4 | 0.19 |
| (3,266) | 1:A:57:TRP:HA | 1:A:59:GLN:HB2 | 4 | 0.19 |
| (3,266) | 1:A:57:TRP:HA | 1:A:60:GLU:HG2 | 14 | 0.19 |
| (3,266) | 1:A:57:TRP:HA | 1:A:59:GLN:HB2 | 14 | 0.19 |
| (3,246) | 1:A:39:VAL:HA | 1:A:29:LEU:HB3 | 4 | 0.19 |
| (3,246) | 1:A:39:VAL:HA | 1:A:27:LYS:HB3 | 4 | 0.19 |
| (3,246) | 1:A:39:VAL:HA | 1:A:29:LEU:HB3 | 14 | 0.19 |
| (3,246) | 1:A:39:VAL:HA | 1:A:27:LYS:HB3 | 14 | 0.19 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD13 | 14 | 0.19 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD12 | 14 | 0.19 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD11 | 14 | 0.19 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD13 | 14 | 0.19 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD12 | 14 | 0.19 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD11 | 14 | 0.19 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD13 | 14 | 0.19 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD12 | 14 | 0.19 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD11 | 14 | 0.19 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 14 | 0.19 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 14 | 0.19 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 14 | 0.19 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:62:LEU:HD11 | 14 | 0.19 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:62:LEU:HD13 | 14 | 0.19 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:62:LEU:HD12 | 14 | 0.19 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:62:LEU:HD11 | 14 | 0.19 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:62:LEU:HD13 | 14 | 0.19 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:62:LEU:HD12 | 14 | 0.19 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 14 | 0.19 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 14 | 0.19 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 14 | 0.19 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:66:LEU:HD11 | 14 | 0.19 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:66:LEU:HD12 | 14 | 0.19 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:66:LEU:HD13 | 14 | 0.19 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:66:LEU:HD11 | 14 | 0.19 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:66:LEU:HD12 | 14 | 0.19 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:66:LEU:HD13 | 14 | 0.19 |
| (3,233) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:10:PRO:HD3 | 14 | 0.19 |
| (3,233) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:32:PRO:HD2 | 14 | 0.19 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,178) | 1:A:37:GLN:HG3 | 1:A:28:ILE:HG21 | 2 | 0.19 |
| (3,178) | 1:A:37:GLN:HG3 | 1:A:28:ILE:HG23 | 2 | 0.19 |
| (3,178) | 1:A:37:GLN:HG3 | 1:A:28:ILE:HG22 | 2 | 0.19 |
| (3,178) | 1:A:37:GLN:HG3 | 1:A:29:LEU:HD13 | 2 | 0.19 |
| (3,178) | 1:A:37:GLN:HG3 | 1:A:29:LEU:HD12 | 2 | 0.19 |
| (3,178) | 1:A:37:GLN:HG3 | 1:A:29:LEU:HD11 | 2 | 0.19 |
| (3,178) | 1:A:37:GLN:HG3 | 1:A:29:LEU:HG | 2 | 0.19 |
| (3,178) | 1:A:37:GLN:HG3 | 1:A:36:LEU:HD22 | 2 | 0.19 |
| (3,178) | 1:A:37:GLN:HG3 | 1:A:36:LEU:HD23 | 2 | 0.19 |
| (3,178) | 1:A:37:GLN:HG3 | 1:A:36:LEU:HD21 | 2 | 0.19 |
| (3,178) | 1:A:59:GLN:HG2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 2 | 0.19 |
| (3,178) | 1:A:59:GLN:HG2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 2 | 0.19 |
| (3,178) | 1:A:59:GLN:HG2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 2 | 0.19 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:27:LYS:HG3 | 5 | 0.19 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB2 | 5 | 0.19 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB3 | 5 | 0.19 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB1 | 5 | 0.19 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:27:LYS:HG3 | 13 | 0.19 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB2 | 13 | 0.19 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB3 | 13 | 0.19 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB1 | 13 | 0.19 |
| (3,139) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:29:LEU:HD13 | 20 | 0.19 |
| (3,139) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:29:LEU:HD12 | 20 | 0.19 |
| (3,139) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:29:LEU:HD11 | 20 | 0.19 |
| (3,139) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:29:LEU:HD13 | 20 | 0.19 |
| (3,139) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:29:LEU:HD12 | 20 | 0.19 |
| (3,139) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:29:LEU:HD11 | 20 | 0.19 |
| (3,138) | 1:A:2:PRO:HD2 | 1:A:2:PRO:HB3 | 17 | 0.19 |
| (3,138) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:10:PRO:HB2 | 17 | 0.19 |
| (3,138) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:32:PRO:HB2 | 17 | 0.19 |
| (3,132) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:26:LEU:HG | 10 | 0.19 |
| (3,132) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HG3 | 10 | 0.19 |
| (3,131) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HB3 | 12 | 0.19 |
| (3,131) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HD2 | 12 | 0.19 |
| (1,986) | 1:A:28:ILE:HD13 | 1:A:28:ILE:HA | 3 | 0.19 |
| (1,986) | 1:A:28:ILE:HD12 | 1:A:28:ILE:HA | 3 | 0.19 |
| (1,986) | 1:A:28:ILE:HD11 | 1:A:28:ILE:HA | 3 | 0.19 |
| (1,971) | 1:A:43:LYS:HE2 | 1:A:43:LYS:HD2 | 11 | 0.19 |
| (1,971) | 1:A:43:LYS:HE2 | 1:A:43:LYS:HD2 | 12 | 0.19 |
| (1,971) | 1:A:43:LYS:HE2 | 1:A:43:LYS:HD2 | 15 | 0.19 |
| (1,898) | 1:A:8:ARG:HG3 | 1:A:8:ARG:HD3 | 3 | 0.19 |
| (1,898) | 1:A:8:ARG:HG3 | 1:A:8:ARG:HD3 | 5 | 0.19 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,898) | 1:A:8:ARG:HG3 | 1:A:8:ARG:HD3 | 8 | 0.19 |
| (1,898) | 1:A:8:ARG:HG3 | 1:A:8:ARG:HD3 | 9 | 0.19 |
| (1,898) | 1:A:8:ARG:HG3 | 1:A:8:ARG:HD3 | 14 | 0.19 |
| (1,898) | 1:A:8:ARG:HG3 | 1:A:8:ARG:HD3 | 15 | 0.19 |
| (1,898) | 1:A:8:ARG:HG3 | 1:A:8:ARG:HD3 | 17 | 0.19 |
| (1,898) | 1:A:8:ARG:HG3 | 1:A:8:ARG:HD3 | 19 | 0.19 |
| (1,889) | 1:A:57:TRP:HB2 | 1:A:57:TRP:HD1 | 6 | 0.19 |
| (1,889) | 1:A:57:TRP:HB2 | 1:A:57:TRP:HD1 | 12 | 0.19 |
| (1,889) | 1:A:57:TRP:HB2 | 1:A:57:TRP:HD1 | 18 | 0.19 |
| (1,882) | 1:A:54:LYS:HD2 | 1:A:54:LYS:HA | 14 | 0.19 |
| (1,872) | 1:A:41:ARG:H | 1:A:25:HIS:HB2 | 2 | 0.19 |
| (1,855) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 9 | 0.19 |
| (1,855) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 9 | 0.19 |
| (1,855) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 9 | 0.19 |
| (1,822) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:15:GLU:HB3 | 15 | 0.19 |
| (1,802) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:67:ASN:HA | 14 | 0.19 |
| (1,802) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:67:ASN:HA | 15 | 0.19 |
| (1,786) | 1:A:30:ASN:HB2 | 1:A:29:LEU:HD13 | 20 | 0.19 |
| (1,786) | 1:A:30:ASN:HB2 | 1:A:29:LEU:HD12 | 20 | 0.19 |
| (1,786) | 1:A:30:ASN:HB2 | 1:A:29:LEU:HD11 | 20 | 0.19 |
| (1,754) | 1:A:54:LYS:HE3 | 1:A:54:LYS:HG3 | 2 | 0.19 |
| (1,753) | 1:A:54:LYS:HE3 | 1:A:54:LYS:HD2 | 6 | 0.19 |
| (1,726) | 1:A:42:LEU:H | 1:A:41:ARG:HD3 | 2 | 0.19 |
| (1,718) | 1:A:47:ARG:HD3 | 1:A:47:ARG:HG3 | 16 | 0.19 |
| (1,715) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HB3 | 12 | 0.19 |
| (1,715) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HB3 | 19 | 0.19 |
| (1,712) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:37:GLN:HG3 | 12 | 0.19 |
| (1,590) | 1:A:7:TYR:H | 1:A:6:SER:HA | 20 | 0.19 |
| (1,563) | 1:A:49:VAL:HA | 1:A:49:VAL:HB | 18 | 0.19 |
| (1,501) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:48:GLN:HE22 | 3 | 0.19 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG21 | 9 | 0.19 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG23 | 9 | 0.19 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG22 | 9 | 0.19 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG21 | 10 | 0.19 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG23 | 10 | 0.19 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG22 | 10 | 0.19 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG21 | 16 | 0.19 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG23 | 16 | 0.19 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG22 | 16 | 0.19 |
| (1,493) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD21 | 9 | 0.19 |
| (1,493) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD23 | 9 | 0.19 |
| (1,493) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD22 | 9 | 0.19 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,450) | 1:A:35:ALA:H | 1:A:37:GLN:HE21 | 16 | 0.19 |
| (1,438) | 1:A:33:ASN:HD21 | 1:A:32:PRO:HB3 | 4 | 0.19 |
| (1,382) | 1:A:18:ILE:H | 1:A:15:GLU:HA | 7 | 0.19 |
| (1,382) | 1:A:18:ILE:H | 1:A:15:GLU:HA | 15 | 0.19 |
| (1,377) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:18:ILE:H | 15 | 0.19 |
| (1,347) | 1:A:11:CYS:H | 1:A:10:PRO:HD3 | 20 | 0.19 |
| (1,326) | 1:A:6:SER:H | 1:A:5:LEU:HB2 | 10 | 0.19 |
| (1,309) | 1:A:34:CYS:H | 1:A:34:CYS:HB3 | 2 | 0.19 |
| (1,309) | 1:A:34:CYS:H | 1:A:34:CYS:HB3 | 12 | 0.19 |
| (1,309) | 1:A:34:CYS:H | 1:A:34:CYS:HB3 | 14 | 0.19 |
| (1,309) | 1:A:34:CYS:H | 1:A:34:CYS:HB3 | 18 | 0.19 |
| (1,300) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:20:ARG:HB3 | 4 | 0.19 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD12 | 1 | 0.19 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD13 | 1 | 0.19 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD11 | 1 | 0.19 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD12 | 11 | 0.19 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD13 | 11 | 0.19 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD11 | 11 | 0.19 |
| (1,279) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HB3 | 11 | 0.19 |
| (1,249) | 1:A:31:THR:H | 1:A:31:THR:HB | 17 | 0.19 |
| (1,248) | 1:A:31:THR:H | 1:A:36:LEU:HA | 12 | 0.19 |
| (1,220) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:47:ARG:HG3 | 7 | 0.19 |
| (1,196) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:49:VAL:HG11 | 15 | 0.19 |
| (1,196) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:49:VAL:HG13 | 15 | 0.19 |
| (1,196) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:49:VAL:HG12 | 15 | 0.19 |
| (1,180) | 1:A:3:VAL:H | 1:A:3:VAL:HG12 | 5 | 0.19 |
| (1,180) | 1:A:3:VAL:H | 1:A:3:VAL:HG11 | 5 | 0.19 |
| (1,180) | 1:A:3:VAL:H | 1:A:3:VAL:HG13 | 5 | 0.19 |
| (1,164) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:9:CYS:HB3 | 14 | 0.19 |
| (1,162) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:68:LYS:HG2 | 17 | 0.19 |
| (1,132) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:23:VAL:HB | 8 | 0.19 |
| (1,1188) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 9 | 0.19 |
| (1,1188) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 10 | 0.19 |
| (1,1188) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 12 | 0.19 |
| (1,1188) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 14 | 0.19 |
| (1,1188) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 20 | 0.19 |
| (1,1158) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:58:ILE:HA | 18 | 0.19 |
| (1,1098) | 1:A:48:GLN:HA | 1:A:41:ARG:HG3 | 11 | 0.19 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ARG:HB3 | 10 | 0.19 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ARG:HB3 | 10 | 0.19 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ARG:HB3 | 10 | 0.19 |
| (1,1091) | 1:A:44:ASN:HB2 | 1:A:45:ASN:HA | 15 | 0.19 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB2 | 1:A:26:LEU:HD12 | 10 | 0.19 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB2 | 1:A:26:LEU:HD11 | 10 | 0.19 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB2 | 1:A:26:LEU:HD13 | 10 | 0.19 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB3 | 1:A:26:LEU:HD12 | 10 | 0.19 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB3 | 1:A:26:LEU:HD11 | 10 | 0.19 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB3 | 1:A:26:LEU:HD13 | 10 | 0.19 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB1 | 1:A:26:LEU:HD12 | 10 | 0.19 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB1 | 1:A:26:LEU:HD11 | 10 | 0.19 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB1 | 1:A:26:LEU:HD13 | 10 | 0.19 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB2 | 3 | 0.19 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB3 | 3 | 0.19 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB1 | 3 | 0.19 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB2 | 14 | 0.19 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB3 | 14 | 0.19 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB1 | 14 | 0.19 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB2 | 16 | 0.19 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB3 | 16 | 0.19 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB1 | 16 | 0.19 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB2 | 20 | 0.19 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB3 | 20 | 0.19 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB1 | 20 | 0.19 |
| (1,1022) | 1:A:38:ILE:HG21 | 1:A:28:ILE:HG12 | 10 | 0.19 |
| (1,1022) | 1:A:38:ILE:HG23 | 1:A:28:ILE:HG12 | 10 | 0.19 |
| (1,1022) | 1:A:38:ILE:HG22 | 1:A:28:ILE:HG12 | 10 | 0.19 |
| (1,1022) | 1:A:38:ILE:HG21 | 1:A:28:ILE:HG12 | 17 | 0.19 |
| (1,1022) | 1:A:38:ILE:HG23 | 1:A:28:ILE:HG12 | 17 | 0.19 |
| (1,1022) | 1:A:38:ILE:HG22 | 1:A:28:ILE:HG12 | 17 | 0.19 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG22 | 1 | 0.19 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG21 | 1 | 0.19 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG23 | 1 | 0.19 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG22 | 15 | 0.19 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG21 | 15 | 0.19 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG23 | 15 | 0.19 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG22 | 16 | 0.19 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG21 | 16 | 0.19 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG23 | 16 | 0.19 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG22 | 19 | 0.19 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG21 | 19 | 0.19 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG23 | 19 | 0.19 |
| (3,98) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:46:ASN:HB2 | 5 | 0.18 |
| (3,98) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:47:ARG:HD2 | 5 | 0.18 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HB2 | 13 | 0.18 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 13 | 0.18 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 13 | 0.18 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 13 | 0.18 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD11 | 3 | 0.18 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD13 | 3 | 0.18 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD12 | 3 | 0.18 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HG | 3 | 0.18 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD11 | 15 | 0.18 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD13 | 15 | 0.18 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD12 | 15 | 0.18 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HG | 15 | 0.18 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD11 | 19 | 0.18 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD13 | 19 | 0.18 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD12 | 19 | 0.18 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HG | 19 | 0.18 |
| (3,35) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:46:ASN:HB2 | 4 | 0.18 |
| (3,35) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:47:ARG:HD2 | 4 | 0.18 |
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HD11 | 17 | 0.18 |
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HD13 | 17 | 0.18 |
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HD12 | 17 | 0.18 |
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HG | 17 | 0.18 |
| (3,31) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:50:CYS:HB3 | 15 | 0.18 |
| (3,31) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:52:ASP:HA | 15 | 0.18 |
| (3,30) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:24:LYS:HB3 | 2 | 0.18 |
| (3,30) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:41:ARG:HB2 | 2 | 0.18 |
| (3,30) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:24:LYS:HB3 | 11 | 0.18 |
| (3,30) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:41:ARG:HB2 | 11 | 0.18 |
| (3,282) | 1:A:65:ALA:HA | 1:A:28:ILE:HG12 | 7 | 0.18 |
| (3,282) | 1:A:65:ALA:HA | 1:A:66:LEU:HB3 | 7 | 0.18 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:55:LEU:HB3 | 6 | 0.18 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:55:LEU:HB3 | 6 | 0.18 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:55:LEU:HB3 | 6 | 0.18 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB2 | 6 | 0.18 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB3 | 6 | 0.18 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB1 | 6 | 0.18 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB2 | 6 | 0.18 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB3 | 6 | 0.18 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB1 | 6 | 0.18 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB2 | 6 | 0.18 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB3 | 6 | 0.18 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB1 | 6 | 0.18 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:55:LEU:HB3 | 8 | 0.18 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:55:LEU:HB3 | 8 | 0.18 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:55:LEU:HB3 | 8 | 0.18 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB2 | 8 | 0.18 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB3 | 8 | 0.18 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB1 | 8 | 0.18 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB2 | 8 | 0.18 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB3 | 8 | 0.18 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB1 | 8 | 0.18 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB2 | 8 | 0.18 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB3 | 8 | 0.18 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB1 | 8 | 0.18 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:55:LEU:HB3 | 17 | 0.18 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:55:LEU:HB3 | 17 | 0.18 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:55:LEU:HB3 | 17 | 0.18 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB2 | 17 | 0.18 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB3 | 17 | 0.18 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB1 | 17 | 0.18 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB2 | 17 | 0.18 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB3 | 17 | 0.18 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB1 | 17 | 0.18 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB2 | 17 | 0.18 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB3 | 17 | 0.18 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB1 | 17 | 0.18 |
| (3,268) | 1:A:58:ILE:HA | 1:A:55:LEU:H | 2 | 0.18 |
| (3,268) | 1:A:58:ILE:HA | 1:A:61:TYR:HD2 | 2 | 0.18 |
| (3,268) | 1:A:58:ILE:HA | 1:A:55:LEU:H | 11 | 0.18 |
| (3,268) | 1:A:58:ILE:HA | 1:A:61:TYR:HD2 | 11 | 0.18 |
| (3,260) | 1:A:54:LYS:HB2 | 1:A:54:LYS:HE3 | 1 | 0.18 |
| (3,260) | 1:A:54:LYS:HB3 | 1:A:54:LYS:HE3 | 1 | 0.18 |
| (3,260) | 1:A:54:LYS:HB2 | 1:A:54:LYS:HE3 | 12 | 0.18 |
| (3,260) | 1:A:54:LYS:HB3 | 1:A:54:LYS:HE3 | 12 | 0.18 |
| (3,246) | 1:A:39:VAL:HA | 1:A:29:LEU:HB3 | 16 | 0.18 |
| (3,246) | 1:A:39:VAL:HA | 1:A:27:LYS:HB3 | 16 | 0.18 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG21 | 5 | 0.18 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG23 | 5 | 0.18 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG22 | 5 | 0.18 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD13 | 5 | 0.18 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD12 | 5 | 0.18 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD11 | 5 | 0.18 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HD1 | 4 | 0.18 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HD1 | 4 | 0.18 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HD1 | 4 | 0.18 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HE1 | 4 | 0.18 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HE1 | 4 | 0.18 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HE1 | 4 | 0.18 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HD1 | 12 | 0.18 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HD1 | 12 | 0.18 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HD1 | 12 | 0.18 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HE1 | 12 | 0.18 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HE1 | 12 | 0.18 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HE1 | 12 | 0.18 |
| (3,20) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:59:GLN:HG2 | 3 | 0.18 |
| (3,20) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:60:GLU:HG3 | 3 | 0.18 |
| (3,20) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:59:GLN:HG2 | 7 | 0.18 |
| (3,20) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:60:GLU:HG3 | 7 | 0.18 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:27:LYS:HG3 | 20 | 0.18 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB2 | 20 | 0.18 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB3 | 20 | 0.18 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB1 | 20 | 0.18 |
| (3,17) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:20:ARG:HD3 | 1 | 0.18 |
| (3,17) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:22:ASN:HB2 | 1 | 0.18 |
| (3,139) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:29:LEU:HD13 | 5 | 0.18 |
| (3,139) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:29:LEU:HD12 | 5 | 0.18 |
| (3,139) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:29:LEU:HD11 | 5 | 0.18 |
| (3,139) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:29:LEU:HD13 | 5 | 0.18 |
| (3,139) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:29:LEU:HD12 | 5 | 0.18 |
| (3,139) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:29:LEU:HD11 | 5 | 0.18 |
| (3,138) | 1:A:2:PRO:HD2 | 1:A:2:PRO:HB3 | 16 | 0.18 |
| (3,138) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:10:PRO:HB2 | 16 | 0.18 |
| (3,138) | 1:A:32:PRO:HD2 | 1:A:32:PRO:HB2 | 16 | 0.18 |
| (3,121) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HB2 | 15 | 0.18 |
| (3,121) | 1:A:47:ARG:HA | 1:A:47:ARG:HG3 | 15 | 0.18 |
| (3,110) | 1:A:59:GLN:HE22 | 1:A:53:PRO:HB3 | 14 | 0.18 |
| (3,110) | 1:A:59:GLN:HE22 | 1:A:54:LYS:HB3 | 14 | 0.18 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HD13 | 7 | 0.18 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HD12 | 7 | 0.18 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HD11 | 7 | 0.18 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG21 | 7 | 0.18 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG23 | 7 | 0.18 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG22 | 7 | 0.18 |
| (1,986) | 1:A:28:ILE:HD13 | 1:A:28:ILE:HA | 16 | 0.18 |
| (1,986) | 1:A:28:ILE:HD12 | 1:A:28:ILE:HA | 16 | 0.18 |
| (1,986) | 1:A:28:ILE:HD11 | 1:A:28:ILE:HA | 16 | 0.18 |
| (1,971) | 1:A:43:LYS:HE2 | 1:A:43:LYS:HD2 | 6 | 0.18 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,948) | 1:A:21:ALA:HA | 1:A:22:ASN:HA | 13 | 0.18 |
| (1,948) | 1:A:21:ALA:HA | 1:A:22:ASN:HA | 19 | 0.18 |
| (1,889) | 1:A:57:TRP:HB2 | 1:A:57:TRP:HD1 | 4 | 0.18 |
| (1,889) | 1:A:57:TRP:HB2 | 1:A:57:TRP:HD1 | 5 | 0.18 |
| (1,889) | 1:A:57:TRP:HB2 | 1:A:57:TRP:HD1 | 11 | 0.18 |
| (1,882) | 1:A:54:LYS:HD2 | 1:A:54:LYS:HA | 2 | 0.18 |
| (1,882) | 1:A:54:LYS:HD2 | 1:A:54:LYS:HA | 19 | 0.18 |
| (1,855) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 4 | 0.18 |
| (1,855) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 4 | 0.18 |
| (1,855) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 4 | 0.18 |
| (1,822) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:15:GLU:HB3 | 7 | 0.18 |
| (1,802) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:67:ASN:HA | 4 | 0.18 |
| (1,802) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:67:ASN:HA | 8 | 0.18 |
| (1,802) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:67:ASN:HA | 20 | 0.18 |
| (1,791) | 1:A:30:ASN:HD22 | 1:A:30:ASN:HB3 | 6 | 0.18 |
| (1,764) | 1:A:14:PHE:HB2 | 1:A:51:ILE:HA | 9 | 0.18 |
| (1,763) | 1:A:14:PHE:HA | 1:A:14:PHE:HB2 | 6 | 0.18 |
| (1,763) | 1:A:14:PHE:HA | 1:A:14:PHE:HB2 | 12 | 0.18 |
| (1,763) | 1:A:14:PHE:HA | 1:A:14:PHE:HB2 | 13 | 0.18 |
| (1,753) | 1:A:54:LYS:HE3 | 1:A:54:LYS:HD2 | 7 | 0.18 |
| (1,745) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:59:GLN:HA | 3 | 0.18 |
| (1,745) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:59:GLN:HA | 17 | 0.18 |
| (1,73) | 1:A:5:LEU:H | 1:A:5:LEU:HD22 | 6 | 0.18 |
| (1,73) | 1:A:5:LEU:H | 1:A:5:LEU:HD23 | 6 | 0.18 |
| (1,73) | 1:A:5:LEU:H | 1:A:5:LEU:HD21 | 6 | 0.18 |
| (1,718) | 1:A:47:ARG:HD3 | 1:A:47:ARG:HG3 | 2 | 0.18 |
| (1,718) | 1:A:47:ARG:HD3 | 1:A:47:ARG:HG3 | 4 | 0.18 |
| (1,687) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG23 | 19 | 0.18 |
| (1,687) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG21 | 19 | 0.18 |
| (1,687) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG22 | 19 | 0.18 |
| (1,615) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:54:LYS:HG3 | 18 | 0.18 |
| (1,531) | 1:A:57:TRP:HE1 | 1:A:20:ARG:HB3 | 8 | 0.18 |
| (1,531) | 1:A:57:TRP:HE1 | 1:A:20:ARG:HB3 | 13 | 0.18 |
| (1,507) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:48:GLN:HB2 | 2 | 0.18 |
| (1,501) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:48:GLN:HE22 | 18 | 0.18 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG21 | 2 | 0.18 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG23 | 2 | 0.18 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG22 | 2 | 0.18 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG21 | 7 | 0.18 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG23 | 7 | 0.18 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG22 | 7 | 0.18 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG21 | 13 | 0.18 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG23 | 13 | 0.18 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG22 | 13 | 0.18 |
| (1,493) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD21 | 17 | 0.18 |
| (1,493) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD23 | 17 | 0.18 |
| (1,493) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD22 | 17 | 0.18 |
| (1,465) | 1:A:37:GLN:HE21 | 1:A:29:LEU:HB2 | 20 | 0.18 |
| (1,393) | 1:A:22:ASN:H | 1:A:22:ASN:HB3 | 2 | 0.18 |
| (1,393) | 1:A:22:ASN:H | 1:A:22:ASN:HB3 | 19 | 0.18 |
| (1,351) | 1:A:11:CYS:H | 1:A:10:PRO:HB3 | 16 | 0.18 |
| (1,309) | 1:A:34:CYS:H | 1:A:34:CYS:HB3 | 4 | 0.18 |
| (1,309) | 1:A:34:CYS:H | 1:A:34:CYS:HB3 | 6 | 0.18 |
| (1,300) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:20:ARG:HB3 | 14 | 0.18 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD12 | 3 | 0.18 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD13 | 3 | 0.18 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD11 | 3 | 0.18 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD12 | 12 | 0.18 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD13 | 12 | 0.18 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD11 | 12 | 0.18 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD12 | 13 | 0.18 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD13 | 13 | 0.18 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD11 | 13 | 0.18 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD12 | 16 | 0.18 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD13 | 16 | 0.18 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD11 | 16 | 0.18 |
| (1,279) | 1:A:67:ASN:H | 1:A:66:LEU:HB3 | 5 | 0.18 |
| (1,249) | 1:A:31:THR:H | 1:A:31:THR:HB | 12 | 0.18 |
| (1,249) | 1:A:31:THR:H | 1:A:31:THR:HB | 16 | 0.18 |
| (1,248) | 1:A:31:THR:H | 1:A:36:LEU:HA | 4 | 0.18 |
| (1,244) | 1:A:18:ILE:H | 1:A:18:ILE:HG12 | 6 | 0.18 |
| (1,244) | 1:A:18:ILE:H | 1:A:18:ILE:HG12 | 14 | 0.18 |
| (1,244) | 1:A:18:ILE:H | 1:A:18:ILE:HG12 | 19 | 0.18 |
| (1,214) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:47:ARG:H | 11 | 0.18 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD12 | 1:A:38:ILE:CG2 | 14 | 0.18 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD11 | 1:A:38:ILE:CG2 | 14 | 0.18 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD13 | 1:A:38:ILE:CG2 | 14 | 0.18 |
| (1,180) | 1:A:3:VAL:H | 1:A:3:VAL:HG12 | 1 | 0.18 |
| (1,180) | 1:A:3:VAL:H | 1:A:3:VAL:HG11 | 1 | 0.18 |
| (1,180) | 1:A:3:VAL:H | 1:A:3:VAL:HG13 | 1 | 0.18 |
| (1,169) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 13 | 0.18 |
| (1,162) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:68:LYS:HG2 | 6 | 0.18 |
| (1,132) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:23:VAL:HB | 5 | 0.18 |
| (1,132) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:23:VAL:HB | 6 | 0.18 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,132) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:23:VAL:HB | 9 | 0.18 |
| (1,1098) | 1:A:48:GLN:HA | 1:A:41:ARG:HG3 | 5 | 0.18 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ARG:HB3 | 7 | 0.18 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ARG:HB3 | 7 | 0.18 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ARG:HB3 | 7 | 0.18 |
| (1,1091) | 1:A:44:ASN:HB2 | 1:A:45:ASN:HA | 9 | 0.18 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG22 | 4 | 0.18 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG21 | 4 | 0.18 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG23 | 4 | 0.18 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HB2 | 5 | 0.17 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 5 | 0.17 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 5 | 0.17 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 5 | 0.17 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HB2 | 15 | 0.17 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 15 | 0.17 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 15 | 0.17 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 15 | 0.17 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB2 | 10 | 0.17 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB3 | 10 | 0.17 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB1 | 10 | 0.17 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB2 | 10 | 0.17 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB3 | 10 | 0.17 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB1 | 10 | 0.17 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB2 | 10 | 0.17 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB3 | 10 | 0.17 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB1 | 10 | 0.17 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB2 | 16 | 0.17 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB3 | 16 | 0.17 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB1 | 16 | 0.17 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB2 | 16 | 0.17 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB3 | 16 | 0.17 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB1 | 16 | 0.17 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB2 | 16 | 0.17 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB3 | 16 | 0.17 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB1 | 16 | 0.17 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB2 | 18 | 0.17 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB3 | 18 | 0.17 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB1 | 18 | 0.17 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB2 | 18 | 0.17 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB3 | 18 | 0.17 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB1 | 18 | 0.17 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB2 | 18 | 0.17 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB3 | 18 | 0.17 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB1 | 18 | 0.17 |
| (3,48) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:20:ARG:HG3 | 1 | 0.17 |
| (3,48) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 1 | 0.17 |
| (3,48) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 1 | 0.17 |
| (3,48) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 1 | 0.17 |
| (3,48) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:20:ARG:HG3 | 7 | 0.17 |
| (3,48) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 7 | 0.17 |
| (3,48) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 7 | 0.17 |
| (3,48) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 7 | 0.17 |
| (3,48) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:20:ARG:HG3 | 19 | 0.17 |
| (3,48) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 19 | 0.17 |
| (3,48) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 19 | 0.17 |
| (3,48) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 19 | 0.17 |
| (3,48) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:20:ARG:HG3 | 20 | 0.17 |
| (3,48) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 20 | 0.17 |
| (3,48) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 20 | 0.17 |
| (3,48) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 20 | 0.17 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD11 | 5 | 0.17 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD13 | 5 | 0.17 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD12 | 5 | 0.17 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HG | 5 | 0.17 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD11 | 9 | 0.17 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD13 | 9 | 0.17 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD12 | 9 | 0.17 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HG | 9 | 0.17 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD11 | 13 | 0.17 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD13 | 13 | 0.17 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD12 | 13 | 0.17 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HG | 13 | 0.17 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD11 | 20 | 0.17 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD13 | 20 | 0.17 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD12 | 20 | 0.17 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HG | 20 | 0.17 |
| (3,30) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:24:LYS:HB3 | 4 | 0.17 |
| (3,30) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:41:ARG:HB2 | 4 | 0.17 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:55:LEU:HB3 | 15 | 0.17 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:55:LEU:HB3 | 15 | 0.17 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:55:LEU:HB3 | 15 | 0.17 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB2 | 15 | 0.17 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB3 | 15 | 0.17 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD11 | 1:A:65:ALA:HB1 | 15 | 0.17 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB2 | 15 | 0.17 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB3 | 15 | 0.17 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD13 | 1:A:65:ALA:HB1 | 15 | 0.17 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB2 | 15 | 0.17 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB3 | 15 | 0.17 |
| (3,275) | 1:A:58:ILE:HD12 | 1:A:65:ALA:HB1 | 15 | 0.17 |
| (3,268) | 1:A:58:ILE:HA | 1:A:55:LEU:H | 18 | 0.17 |
| (3,268) | 1:A:58:ILE:HA | 1:A:61:TYR:HD2 | 18 | 0.17 |
| (3,268) | 1:A:58:ILE:HA | 1:A:55:LEU:H | 20 | 0.17 |
| (3,268) | 1:A:58:ILE:HA | 1:A:61:TYR:HD2 | 20 | 0.17 |
| (3,260) | 1:A:54:LYS:HB2 | 1:A:54:LYS:HE3 | 7 | 0.17 |
| (3,260) | 1:A:54:LYS:HB3 | 1:A:54:LYS:HE3 | 7 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD13 | 4 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD12 | 4 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD11 | 4 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD13 | 4 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD12 | 4 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD11 | 4 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD13 | 4 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD12 | 4 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD11 | 4 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 4 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 4 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 4 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:62:LEU:HD11 | 4 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:62:LEU:HD13 | 4 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:62:LEU:HD12 | 4 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:62:LEU:HD11 | 4 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:62:LEU:HD13 | 4 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:62:LEU:HD12 | 4 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 4 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 4 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 4 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:66:LEU:HD11 | 4 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:66:LEU:HD12 | 4 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:66:LEU:HD13 | 4 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:66:LEU:HD11 | 4 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:66:LEU:HD12 | 4 | 0.17 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:66:LEU:HD13 | 4 | 0.17 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HD1 | 8 | 0.17 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HD1 | 8 | 0.17 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HD1 | 8 | 0.17 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HE1 | 8 | 0.17 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HE1 | 8 | 0.17 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HE1 | 8 | 0.17 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HD1 | 10 | 0.17 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HD1 | 10 | 0.17 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HD1 | 10 | 0.17 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HE1 | 10 | 0.17 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HE1 | 10 | 0.17 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HE1 | 10 | 0.17 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HD1 | 18 | 0.17 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HD1 | 18 | 0.17 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HD1 | 18 | 0.17 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HE1 | 18 | 0.17 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HE1 | 18 | 0.17 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HE1 | 18 | 0.17 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HD1 | 19 | 0.17 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HD1 | 19 | 0.17 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HD1 | 19 | 0.17 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HE1 | 19 | 0.17 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HE1 | 19 | 0.17 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HE1 | 19 | 0.17 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HD1 | 20 | 0.17 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HD1 | 20 | 0.17 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HD1 | 20 | 0.17 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HE1 | 20 | 0.17 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HE1 | 20 | 0.17 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HE1 | 20 | 0.17 |
| (3,20) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:59:GLN:HG2 | 9 | 0.17 |
| (3,20) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:60:GLU:HG3 | 9 | 0.17 |
| (3,20) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:59:GLN:HG2 | 17 | 0.17 |
| (3,20) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:60:GLU:HG3 | 17 | 0.17 |
| (3,18) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:20:ARG:HG3 | 1 | 0.17 |
| (3,18) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 1 | 0.17 |
| (3,18) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 1 | 0.17 |
| (3,18) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 1 | 0.17 |
| (3,18) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:20:ARG:HG3 | 8 | 0.17 |
| (3,18) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 8 | 0.17 |
| (3,18) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 8 | 0.17 |
| (3,18) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 8 | 0.17 |
| (3,17) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:20:ARG:HD3 | 13 | 0.17 |
| (3,17) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:22:ASN:HB2 | 13 | 0.17 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:18:ILE:HG23 | 12 | 0.17 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:18:ILE:HG22 | 12 | 0.17 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:18:ILE:HG21 | 12 | 0.17 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:23:VAL:HG13 | 12 | 0.17 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:23:VAL:HG11 | 12 | 0.17 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:23:VAL:HG12 | 12 | 0.17 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:42:LEU:HD21 | 12 | 0.17 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:42:LEU:HD23 | 12 | 0.17 |
| (3,165) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:42:LEU:HD22 | 12 | 0.17 |
| (3,132) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:26:LEU:HG | 4 | 0.17 |
| (3,132) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HG3 | 4 | 0.17 |
| (3,132) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:26:LEU:HG | 15 | 0.17 |
| (3,132) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HG3 | 15 | 0.17 |
| (3,122) | 1:A:47:ARG:HA | 1:A:41:ARG:HA | 1 | 0.17 |
| (3,122) | 1:A:47:ARG:HA | 1:A:48:GLN:HA | 1 | 0.17 |
| (3,121) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HB2 | 17 | 0.17 |
| (3,121) | 1:A:47:ARG:HA | 1:A:47:ARG:HG3 | 17 | 0.17 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HD13 | 6 | 0.17 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HD12 | 6 | 0.17 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HD11 | 6 | 0.17 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG21 | 6 | 0.17 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG23 | 6 | 0.17 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG22 | 6 | 0.17 |
| (1,987) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:28:ILE:HD13 | 13 | 0.17 |
| (1,987) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:28:ILE:HD12 | 13 | 0.17 |
| (1,987) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:28:ILE:HD11 | 13 | 0.17 |
| (1,986) | 1:A:28:ILE:HD13 | 1:A:28:ILE:HA | 5 | 0.17 |
| (1,986) | 1:A:28:ILE:HD12 | 1:A:28:ILE:HA | 5 | 0.17 |
| (1,986) | 1:A:28:ILE:HD11 | 1:A:28:ILE:HA | 5 | 0.17 |
| (1,975) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:27:LYS:H | 10 | 0.17 |
| (1,975) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:27:LYS:H | 10 | 0.17 |
| (1,975) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:27:LYS:H | 10 | 0.17 |
| (1,971) | 1:A:43:LYS:HE2 | 1:A:43:LYS:HD2 | 2 | 0.17 |
| (1,971) | 1:A:43:LYS:HE2 | 1:A:43:LYS:HD2 | 13 | 0.17 |
| (1,967) | 1:A:24:LYS:HG2 | 1:A:42:LEU:HA | 5 | 0.17 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:23:VAL:H | 10 | 0.17 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:23:VAL:H | 10 | 0.17 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:23:VAL:H | 10 | 0.17 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:23:VAL:H | 15 | 0.17 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:23:VAL:H | 15 | 0.17 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:23:VAL:H | 15 | 0.17 |
| (1,948) | 1:A:21:ALA:HA | 1:A:22:ASN:HA | 5 | 0.17 |
| (1,948) | 1:A:21:ALA:HA | 1:A:22:ASN:HA | 14 | 0.17 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,882) | 1:A:54:LYS:HD2 | 1:A:54:LYS:HA | 5 | 0.17 |
| (1,872) | 1:A:41:ARG:H | 1:A:25:HIS:HB2 | 11 | 0.17 |
| (1,869) | 1:A:8:ARG:HB3 | 1:A:8:ARG:HD3 | 11 | 0.17 |
| (1,856) | 1:A:10:PRO:HB3 | 1:A:29:LEU:HG | 20 | 0.17 |
| (1,855) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 15 | 0.17 |
| (1,855) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 15 | 0.17 |
| (1,855) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 15 | 0.17 |
| (1,855) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 18 | 0.17 |
| (1,855) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 18 | 0.17 |
| (1,855) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 18 | 0.17 |
| (1,855) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 19 | 0.17 |
| (1,855) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 19 | 0.17 |
| (1,855) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 19 | 0.17 |
| (1,827) | 1:A:15:GLU:HG3 | 1:A:15:GLU:HA | 15 | 0.17 |
| (1,817) | 1:A:44:ASN:HD22 | 1:A:44:ASN:HB3 | 11 | 0.17 |
| (1,817) | 1:A:44:ASN:HD22 | 1:A:44:ASN:HB3 | 18 | 0.17 |
| (1,802) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:67:ASN:HA | 11 | 0.17 |
| (1,802) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:67:ASN:HA | 16 | 0.17 |
| (1,802) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:67:ASN:HA | 17 | 0.17 |
| (1,778) | 1:A:19:ALA:H | 1:A:18:ILE:HB | 12 | 0.17 |
| (1,744) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:68:LYS:HD2 | 8 | 0.17 |
| (1,718) | 1:A:47:ARG:HD3 | 1:A:47:ARG:HG3 | 6 | 0.17 |
| (1,718) | 1:A:47:ARG:HD3 | 1:A:47:ARG:HG3 | 8 | 0.17 |
| (1,718) | 1:A:47:ARG:HD3 | 1:A:47:ARG:HG3 | 9 | 0.17 |
| (1,715) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HB3 | 1 | 0.17 |
| (1,712) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:37:GLN:HG3 | 6 | 0.17 |
| (1,692) | 1:A:53:PRO:HD2 | 1:A:14:PHE:HB2 | 2 | 0.17 |
| (1,635) | 1:A:17:HIS:HA | 1:A:17:HIS:HB3 | 14 | 0.17 |
| (1,635) | 1:A:17:HIS:HA | 1:A:17:HIS:HB3 | 16 | 0.17 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG23 | 9 | 0.17 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG22 | 9 | 0.17 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG21 | 9 | 0.17 |
| (1,570) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:63:GLU:HG3 | 8 | 0.17 |
| (1,570) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:63:GLU:HG3 | 15 | 0.17 |
| (1,563) | 1:A:49:VAL:HA | 1:A:49:VAL:HB | 12 | 0.17 |
| (1,519) | 1:A:52:ASP:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 3 | 0.17 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG21 | 5 | 0.17 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG23 | 5 | 0.17 |
| (1,5) | 1:A:51:ILE:CD1 | 1:A:38:ILE:HG22 | 5 | 0.17 |
| (1,477) | 1:A:42:LEU:H | 1:A:48:GLN:H | 2 | 0.17 |
| (1,393) | 1:A:22:ASN:H | 1:A:22:ASN:HB3 | 9 | 0.17 |
| (1,393) | 1:A:22:ASN:H | 1:A:22:ASN:HB3 | 14 | 0.17 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,351) | 1:A:11:CYS:H | 1:A:10:PRO:HB3 | 4 | 0.17 |
| (1,347) | 1:A:11:CYS:H | 1:A:10:PRO:HD3 | 4 | 0.17 |
| (1,309) | 1:A:34:CYS:H | 1:A:34:CYS:HB3 | 3 | 0.17 |
| (1,300) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:20:ARG:HB3 | 18 | 0.17 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD12 | 8 | 0.17 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD13 | 8 | 0.17 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD11 | 8 | 0.17 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD12 | 9 | 0.17 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD13 | 9 | 0.17 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD11 | 9 | 0.17 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD12 | 10 | 0.17 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD13 | 10 | 0.17 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD11 | 10 | 0.17 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD12 | 20 | 0.17 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD13 | 20 | 0.17 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD11 | 20 | 0.17 |
| (1,290) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:63:GLU:HG2 | 7 | 0.17 |
| (1,290) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:63:GLU:HG2 | 8 | 0.17 |
| (1,290) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:63:GLU:HG2 | 9 | 0.17 |
| (1,290) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:63:GLU:HG2 | 13 | 0.17 |
| (1,214) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:47:ARG:H | 1 | 0.17 |
| (1,214) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:47:ARG:H | 4 | 0.17 |
| (1,214) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:47:ARG:H | 5 | 0.17 |
| (1,214) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:47:ARG:H | 7 | 0.17 |
| (1,214) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:47:ARG:H | 9 | 0.17 |
| (1,214) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:47:ARG:H | 12 | 0.17 |
| (1,214) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:47:ARG:H | 14 | 0.17 |
| (1,180) | 1:A:3:VAL:H | 1:A:3:VAL:HG12 | 9 | 0.17 |
| (1,180) | 1:A:3:VAL:H | 1:A:3:VAL:HG11 | 9 | 0.17 |
| (1,180) | 1:A:3:VAL:H | 1:A:3:VAL:HG13 | 9 | 0.17 |
| (1,180) | 1:A:3:VAL:H | 1:A:3:VAL:HG12 | 17 | 0.17 |
| (1,180) | 1:A:3:VAL:H | 1:A:3:VAL:HG11 | 17 | 0.17 |
| (1,180) | 1:A:3:VAL:H | 1:A:3:VAL:HG13 | 17 | 0.17 |
| (1,164) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:9:CYS:HB3 | 6 | 0.17 |
| (1,164) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:9:CYS:HB3 | 7 | 0.17 |
| (1,164) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:9:CYS:HB3 | 19 | 0.17 |
| (1,164) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:9:CYS:HB3 | 20 | 0.17 |
| (1,145) | 1:A:7:TYR:H | 1:A:7:TYR:HB3 | 17 | 0.17 |
| (1,132) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:23:VAL:HB | 4 | 0.17 |
| (1,132) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:23:VAL:HB | 15 | 0.17 |
| (1,132) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:23:VAL:HB | 18 | 0.17 |
| (1,1204) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:28:ILE:HG12 | 15 | 0.17 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1204) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:28:ILE:HG12 | 15 | 0.17 |
| (1,1204) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:28:ILE:HG12 | 15 | 0.17 |
| (1,1188) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 8 | 0.17 |
| (1,1180) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:59:GLN:HA | 18 | 0.17 |
| (1,1164) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:58:ILE:HG23 | 6 | 0.17 |
| (1,1164) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:58:ILE:HG22 | 6 | 0.17 |
| (1,1164) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:58:ILE:HG21 | 6 | 0.17 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:59:GLN:HB2 | 3 | 0.17 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:59:GLN:HB2 | 3 | 0.17 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:59:GLN:HB2 | 3 | 0.17 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:59:GLN:HB2 | 10 | 0.17 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:59:GLN:HB2 | 10 | 0.17 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:59:GLN:HB2 | 10 | 0.17 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:59:GLN:HB2 | 16 | 0.17 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:59:GLN:HB2 | 16 | 0.17 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:59:GLN:HB2 | 16 | 0.17 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:59:GLN:HB2 | 17 | 0.17 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:59:GLN:HB2 | 17 | 0.17 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:59:GLN:HB2 | 17 | 0.17 |
| (1,1098) | 1:A:48:GLN:HA | 1:A:41:ARG:HG3 | 7 | 0.17 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ARG:HB3 | 15 | 0.17 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ARG:HB3 | 15 | 0.17 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ARG:HB3 | 15 | 0.17 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD21 | 6 | 0.17 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD22 | 6 | 0.17 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD23 | 6 | 0.17 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB2 | 5 | 0.17 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB3 | 5 | 0.17 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB1 | 5 | 0.17 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB2 | 15 | 0.17 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB3 | 15 | 0.17 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB1 | 15 | 0.17 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG22 | 3 | 0.17 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG21 | 3 | 0.17 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG23 | 3 | 0.17 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG22 | 8 | 0.17 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG21 | 8 | 0.17 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG23 | 8 | 0.17 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG22 | 13 | 0.17 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG21 | 13 | 0.17 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG23 | 13 | 0.17 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG22 | 14 | 0.17 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG21 | 14 | 0.17 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG23 | 14 | 0.17 |
| (3,98) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:46:ASN:HB2 | 20 | 0.16 |
| (3,98) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:47:ARG:HD2 | 20 | 0.16 |
| (3,75) | 1:A:31:THR:H | 1:A:33:ASN:HD22 | 9 | 0.16 |
| (3,75) | 1:A:31:THR:H | 1:A:37:GLN:HE21 | 9 | 0.16 |
| (3,69) | 1:A:22:ASN:HD21 | 1:A:42:LEU:HB2 | 5 | 0.16 |
| (3,69) | 1:A:22:ASN:HD21 | 1:A:43:LYS:HD2 | 5 | 0.16 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HB2 | 12 | 0.16 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 12 | 0.16 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 12 | 0.16 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 12 | 0.16 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HB2 | 18 | 0.16 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 18 | 0.16 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 18 | 0.16 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 18 | 0.16 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB2 | 12 | 0.16 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB3 | 12 | 0.16 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB1 | 12 | 0.16 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB2 | 12 | 0.16 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB3 | 12 | 0.16 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB1 | 12 | 0.16 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB2 | 12 | 0.16 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB3 | 12 | 0.16 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB1 | 12 | 0.16 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB2 | 13 | 0.16 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB3 | 13 | 0.16 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB1 | 13 | 0.16 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB2 | 13 | 0.16 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB3 | 13 | 0.16 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB1 | 13 | 0.16 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB2 | 13 | 0.16 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB3 | 13 | 0.16 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB1 | 13 | 0.16 |
| (3,44) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 7 | 0.16 |
| (3,44) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 7 | 0.16 |
| (3,44) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 17 | 0.16 |
| (3,44) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 17 | 0.16 |
| (3,44) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 18 | 0.16 |
| (3,44) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 18 | 0.16 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD11 | 2 | 0.16 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD13 | 2 | 0.16 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD12 | 2 | 0.16 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HG | 2 | 0.16 |
| (3,30) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:24:LYS:HB3 | 15 | 0.16 |
| (3,30) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:41:ARG:HB2 | 15 | 0.16 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:18:ILE:HG23 | 19 | 0.16 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:18:ILE:HG22 | 19 | 0.16 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:18:ILE:HG21 | 19 | 0.16 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:39:VAL:HG23 | 19 | 0.16 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:39:VAL:HG21 | 19 | 0.16 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:39:VAL:HG22 | 19 | 0.16 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:49:VAL:HG11 | 19 | 0.16 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:49:VAL:HG13 | 19 | 0.16 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:49:VAL:HG12 | 19 | 0.16 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HD1 | 9 | 0.16 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HD1 | 9 | 0.16 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HD1 | 9 | 0.16 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HE1 | 9 | 0.16 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HE1 | 9 | 0.16 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HE1 | 9 | 0.16 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HD1 | 11 | 0.16 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HD1 | 11 | 0.16 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HD1 | 11 | 0.16 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HE1 | 11 | 0.16 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HE1 | 11 | 0.16 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HE1 | 11 | 0.16 |
| (3,20) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:59:GLN:HG2 | 1 | 0.16 |
| (3,20) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:60:GLU:HG3 | 1 | 0.16 |
| (3,20) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:59:GLN:HG2 | 16 | 0.16 |
| (3,20) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:60:GLU:HG3 | 16 | 0.16 |
| (3,189) | 1:A:25:HIS:HB2 | 1:A:24:LYS:HB3 | 11 | 0.16 |
| (3,189) | 1:A:41:ARG:HB2 | 1:A:25:HIS:HB2 | 11 | 0.16 |
| (3,17) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:20:ARG:HD3 | 3 | 0.16 |
| (3,17) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:22:ASN:HB2 | 3 | 0.16 |
| (3,132) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:26:LEU:HG | 7 | 0.16 |
| (3,132) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HG3 | 7 | 0.16 |
| (3,132) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:26:LEU:HG | 16 | 0.16 |
| (3,132) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HG3 | 16 | 0.16 |
| (3,122) | 1:A:47:ARG:HA | 1:A:41:ARG:HA | 11 | 0.16 |
| (3,122) | 1:A:47:ARG:HA | 1:A:48:GLN:HA | 11 | 0.16 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:23:VAL:H | 1 | 0.16 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:23:VAL:H | 1 | 0.16 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:23:VAL:H | 1 | 0.16 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:23:VAL:H | 4 | 0.16 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:23:VAL:H | 4 | 0.16 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:23:VAL:H | 4 | 0.16 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:23:VAL:H | 6 | 0.16 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:23:VAL:H | 6 | 0.16 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:23:VAL:H | 6 | 0.16 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:23:VAL:H | 11 | 0.16 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:23:VAL:H | 11 | 0.16 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:23:VAL:H | 11 | 0.16 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:23:VAL:H | 12 | 0.16 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:23:VAL:H | 12 | 0.16 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:23:VAL:H | 12 | 0.16 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:23:VAL:H | 13 | 0.16 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:23:VAL:H | 13 | 0.16 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:23:VAL:H | 13 | 0.16 |
| (1,948) | 1:A:21:ALA:HA | 1:A:22:ASN:HA | 7 | 0.16 |
| (1,948) | 1:A:21:ALA:HA | 1:A:22:ASN:HA | 11 | 0.16 |
| (1,948) | 1:A:21:ALA:HA | 1:A:22:ASN:HA | 18 | 0.16 |
| (1,855) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 2 | 0.16 |
| (1,855) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 2 | 0.16 |
| (1,855) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 2 | 0.16 |
| (1,855) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 8 | 0.16 |
| (1,855) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 8 | 0.16 |
| (1,855) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 8 | 0.16 |
| (1,855) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 20 | 0.16 |
| (1,855) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 20 | 0.16 |
| (1,855) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 20 | 0.16 |
| (1,821) | 1:A:60:GLU:HA | 1:A:63:GLU:HG3 | 20 | 0.16 |
| (1,802) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:67:ASN:HA | 2 | 0.16 |
| (1,775) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:19:ALA:HB2 | 5 | 0.16 |
| (1,775) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:19:ALA:HB3 | 5 | 0.16 |
| (1,775) | 1:A:22:ASN:HB2 | 1:A:19:ALA:HB1 | 5 | 0.16 |
| (1,763) | 1:A:14:PHE:HA | 1:A:14:PHE:HB2 | 18 | 0.16 |
| (1,753) | 1:A:54:LYS:HE3 | 1:A:54:LYS:HD2 | 12 | 0.16 |
| (1,745) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:59:GLN:HA | 19 | 0.16 |
| (1,741) | 1:A:66:LEU:HA | 1:A:66:LEU:HB2 | 6 | 0.16 |
| (1,719) | 1:A:47:ARG:HD2 | 1:A:47:ARG:HB3 | 18 | 0.16 |
| (1,715) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HB3 | 4 | 0.16 |
| (1,715) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HB3 | 9 | 0.16 |
| (1,715) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HB3 | 11 | 0.16 |
| (1,686) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:9:CYS:HB3 | 8 | 0.16 |
| (1,635) | 1:A:17:HIS:HA | 1:A:17:HIS:HB3 | 4 | 0.16 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,635) | 1:A:17:HIS:HA | 1:A:17:HIS:HB3 | 6 | 0.16 |
| (1,635) | 1:A:17:HIS:HA | 1:A:17:HIS:HB3 | 7 | 0.16 |
| (1,635) | 1:A:17:HIS:HA | 1:A:17:HIS:HB3 | 10 | 0.16 |
| (1,635) | 1:A:17:HIS:HA | 1:A:17:HIS:HB3 | 11 | 0.16 |
| (1,635) | 1:A:17:HIS:HA | 1:A:17:HIS:HB3 | 18 | 0.16 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG23 | 18 | 0.16 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG22 | 18 | 0.16 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG21 | 18 | 0.16 |
| (1,570) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:63:GLU:HG3 | 3 | 0.16 |
| (1,570) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:63:GLU:HG3 | 7 | 0.16 |
| (1,570) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:63:GLU:HG3 | 9 | 0.16 |
| (1,513) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:14:PHE:HB2 | 3 | 0.16 |
| (1,513) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:14:PHE:HB2 | 14 | 0.16 |
| (1,502) | 1:A:48:GLN:HE21 | 1:A:39:VAL:HG23 | 19 | 0.16 |
| (1,502) | 1:A:48:GLN:HE21 | 1:A:39:VAL:HG21 | 19 | 0.16 |
| (1,502) | 1:A:48:GLN:HE21 | 1:A:39:VAL:HG22 | 19 | 0.16 |
| (1,494) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:47:ARG:HB3 | 10 | 0.16 |
| (1,465) | 1:A:37:GLN:HE21 | 1:A:29:LEU:HB2 | 19 | 0.16 |
| (1,432) | 1:A:31:THR:H | 1:A:32:PRO:HD3 | 19 | 0.16 |
| (1,393) | 1:A:22:ASN:H | 1:A:22:ASN:HB3 | 4 | 0.16 |
| (1,393) | 1:A:22:ASN:H | 1:A:22:ASN:HB3 | 13 | 0.16 |
| (1,382) | 1:A:18:ILE:H | 1:A:15:GLU:HA | 14 | 0.16 |
| (1,34) | 1:A:25:HIS:HE1 | 1:A:41:ARG:HG3 | 15 | 0.16 |
| (1,309) | 1:A:34:CYS:H | 1:A:34:CYS:HB3 | 19 | 0.16 |
| (1,300) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:20:ARG:HB3 | 17 | 0.16 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD12 | 2 | 0.16 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD13 | 2 | 0.16 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD11 | 2 | 0.16 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB2 | 4 | 0.16 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB3 | 4 | 0.16 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB1 | 4 | 0.16 |
| (1,298) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:64:LYS:HG3 | 2 | 0.16 |
| (1,290) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:63:GLU:HG2 | 15 | 0.16 |
| (1,282) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:64:LYS:H | 5 | 0.16 |
| (1,259) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:60:GLU:HA | 4 | 0.16 |
| (1,259) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:60:GLU:HA | 8 | 0.16 |
| (1,259) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:60:GLU:HA | 11 | 0.16 |
| (1,259) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:60:GLU:HA | 14 | 0.16 |
| (1,254) | 1:A:16:SER:H | 1:A:15:GLU:HB2 | 5 | 0.16 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD12 | 1:A:38:ILE:CG2 | 7 | 0.16 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD11 | 1:A:38:ILE:CG2 | 7 | 0.16 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD13 | 1:A:38:ILE:CG2 | 7 | 0.16 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,180) | 1:A:3:VAL:H | 1:A:3:VAL:HG12 | 11 | 0.16 |
| (1,180) | 1:A:3:VAL:H | 1:A:3:VAL:HG11 | 11 | 0.16 |
| (1,180) | 1:A:3:VAL:H | 1:A:3:VAL:HG13 | 11 | 0.16 |
| (1,169) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 6 | 0.16 |
| (1,161) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:67:ASN:HA | 10 | 0.16 |
| (1,159) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:ARG:HA | 13 | 0.16 |
| (1,145) | 1:A:7:TYR:H | 1:A:7:TYR:HB3 | 5 | 0.16 |
| (1,140) | 1:A:8:ARG:H | 1:A:7:TYR:HB2 | 17 | 0.16 |
| (1,132) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:23:VAL:HB | 7 | 0.16 |
| (1,132) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:23:VAL:HB | 13 | 0.16 |
| (1,132) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:23:VAL:HB | 20 | 0.16 |
| (1,1206) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:67:ASN:HD22 | 3 | 0.16 |
| (1,120) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:37:GLN:HG3 | 10 | 0.16 |
| (1,120) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:37:GLN:HG3 | 16 | 0.16 |
| (1,1189) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:58:ILE:HG23 | 9 | 0.16 |
| (1,1189) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:58:ILE:HG22 | 9 | 0.16 |
| (1,1189) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:58:ILE:HG21 | 9 | 0.16 |
| (1,1188) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 18 | 0.16 |
| (1,1180) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:59:GLN:HA | 12 | 0.16 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:59:GLN:HB2 | 12 | 0.16 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:59:GLN:HB2 | 12 | 0.16 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:59:GLN:HB2 | 12 | 0.16 |
| (1,1101) | 1:A:48:GLN:HB3 | 1:A:39:VAL:HG23 | 12 | 0.16 |
| (1,1101) | 1:A:48:GLN:HB3 | 1:A:39:VAL:HG21 | 12 | 0.16 |
| (1,1101) | 1:A:48:GLN:HB3 | 1:A:39:VAL:HG22 | 12 | 0.16 |
| (1,1098) | 1:A:48:GLN:HA | 1:A:41:ARG:HG3 | 4 | 0.16 |
| (1,1098) | 1:A:48:GLN:HA | 1:A:41:ARG:HG3 | 6 | 0.16 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ARG:HB3 | 14 | 0.16 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ARG:HB3 | 14 | 0.16 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ARG:HB3 | 14 | 0.16 |
| (1,1091) | 1:A:44:ASN:HB2 | 1:A:45:ASN:HA | 14 | 0.16 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB2 | 1:A:26:LEU:HD12 | 16 | 0.16 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB2 | 1:A:26:LEU:HD11 | 16 | 0.16 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB2 | 1:A:26:LEU:HD13 | 16 | 0.16 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB3 | 1:A:26:LEU:HD12 | 16 | 0.16 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB3 | 1:A:26:LEU:HD11 | 16 | 0.16 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB3 | 1:A:26:LEU:HD13 | 16 | 0.16 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB1 | 1:A:26:LEU:HD12 | 16 | 0.16 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB1 | 1:A:26:LEU:HD11 | 16 | 0.16 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB1 | 1:A:26:LEU:HD13 | 16 | 0.16 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB2 | 4 | 0.16 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB3 | 4 | 0.16 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB1 | 4 | 0.16 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB2 | 12 | 0.16 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB3 | 12 | 0.16 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB1 | 12 | 0.16 |
| (1,1028) | 1:A:38:ILE:HG12 | 1:A:37:GLN:HA | 4 | 0.16 |
| (1,1008) | 1:A:32:PRO:HG3 | 1:A:31:THR:HG23 | 7 | 0.16 |
| (1,1008) | 1:A:32:PRO:HG3 | 1:A:31:THR:HG21 | 7 | 0.16 |
| (1,1008) | 1:A:32:PRO:HG3 | 1:A:31:THR:HG22 | 7 | 0.16 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG22 | 2 | 0.16 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG21 | 2 | 0.16 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG23 | 2 | 0.16 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG22 | 6 | 0.16 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG21 | 6 | 0.16 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG23 | 6 | 0.16 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG22 | 9 | 0.16 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG21 | 9 | 0.16 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG23 | 9 | 0.16 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG22 | 10 | 0.16 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG21 | 10 | 0.16 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG23 | 10 | 0.16 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG22 | 11 | 0.16 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG21 | 11 | 0.16 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG23 | 11 | 0.16 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG22 | 17 | 0.16 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG21 | 17 | 0.16 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG23 | 17 | 0.16 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG22 | 20 | 0.16 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG21 | 20 | 0.16 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG23 | 20 | 0.16 |
| (3,75) | 1:A:31:THR:H | 1:A:33:ASN:HD22 | 19 | 0.15 |
| (3,75) | 1:A:31:THR:H | 1:A:37:GLN:HE21 | 19 | 0.15 |
| (3,74) | 1:A:30:ASN:HD21 | 1:A:36:LEU:HD13 | 12 | 0.15 |
| (3,74) | 1:A:30:ASN:HD21 | 1:A:36:LEU:HD12 | 12 | 0.15 |
| (3,74) | 1:A:30:ASN:HD21 | 1:A:36:LEU:HD11 | 12 | 0.15 |
| (3,74) | 1:A:30:ASN:HD21 | 1:A:28:ILE:HG21 | 12 | 0.15 |
| (3,74) | 1:A:30:ASN:HD21 | 1:A:28:ILE:HG23 | 12 | 0.15 |
| (3,74) | 1:A:30:ASN:HD21 | 1:A:28:ILE:HG22 | 12 | 0.15 |
| (3,74) | 1:A:30:ASN:HD21 | 1:A:29:LEU:HD13 | 12 | 0.15 |
| (3,74) | 1:A:30:ASN:HD21 | 1:A:29:LEU:HD12 | 12 | 0.15 |
| (3,74) | 1:A:30:ASN:HD21 | 1:A:29:LEU:HD11 | 12 | 0.15 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG23 | 6 | 0.15 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG22 | 6 | 0.15 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG21 | 6 | 0.15 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG11 | 6 | 0.15 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG13 | 6 | 0.15 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG12 | 6 | 0.15 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HB2 | 11 | 0.15 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 11 | 0.15 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 11 | 0.15 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 11 | 0.15 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB2 | 4 | 0.15 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB3 | 4 | 0.15 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB1 | 4 | 0.15 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB2 | 4 | 0.15 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB3 | 4 | 0.15 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB1 | 4 | 0.15 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB2 | 4 | 0.15 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB3 | 4 | 0.15 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB1 | 4 | 0.15 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB2 | 9 | 0.15 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB3 | 9 | 0.15 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB1 | 9 | 0.15 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB2 | 9 | 0.15 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB3 | 9 | 0.15 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB1 | 9 | 0.15 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB2 | 9 | 0.15 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB3 | 9 | 0.15 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB1 | 9 | 0.15 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB2 | 19 | 0.15 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB3 | 19 | 0.15 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB1 | 19 | 0.15 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB2 | 19 | 0.15 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB3 | 19 | 0.15 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB1 | 19 | 0.15 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB2 | 19 | 0.15 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB3 | 19 | 0.15 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB1 | 19 | 0.15 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB2 | 20 | 0.15 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB3 | 20 | 0.15 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB1 | 20 | 0.15 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB2 | 20 | 0.15 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB3 | 20 | 0.15 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB1 | 20 | 0.15 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB2 | 20 | 0.15 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB3 | 20 | 0.15 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB1 | 20 | 0.15 |
| (3,48) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:20:ARG:HG3 | 2 | 0.15 |
| (3,48) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 2 | 0.15 |
| (3,48) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 2 | 0.15 |
| (3,48) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 2 | 0.15 |
| (3,44) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 1 | 0.15 |
| (3,44) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 1 | 0.15 |
| (3,44) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 9 | 0.15 |
| (3,44) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 9 | 0.15 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD11 | 18 | 0.15 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD13 | 18 | 0.15 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD12 | 18 | 0.15 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HG | 18 | 0.15 |
| (3,31) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:50:CYS:HB3 | 17 | 0.15 |
| (3,31) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:52:ASP:HA | 17 | 0.15 |
| (3,30) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:24:LYS:HB3 | 9 | 0.15 |
| (3,30) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:41:ARG:HB2 | 9 | 0.15 |
| (3,30) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:24:LYS:HB3 | 16 | 0.15 |
| (3,30) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:41:ARG:HB2 | 16 | 0.15 |
| (3,286) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:68:LYS:HD2 | 2 | 0.15 |
| (3,286) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:64:LYS:HD2 | 2 | 0.15 |
| (3,286) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:66:LEU:HB3 | 2 | 0.15 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:18:ILE:HG23 | 9 | 0.15 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:18:ILE:HG22 | 9 | 0.15 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:18:ILE:HG21 | 9 | 0.15 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:39:VAL:HG23 | 9 | 0.15 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:39:VAL:HG21 | 9 | 0.15 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:39:VAL:HG22 | 9 | 0.15 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:49:VAL:HG11 | 9 | 0.15 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:49:VAL:HG13 | 9 | 0.15 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:49:VAL:HG12 | 9 | 0.15 |
| (3,268) | 1:A:58:ILE:HA | 1:A:55:LEU:H | 12 | 0.15 |
| (3,268) | 1:A:58:ILE:HA | 1:A:61:TYR:HD2 | 12 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD13 | 17 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD12 | 17 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD11 | 17 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD13 | 17 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD12 | 17 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD11 | 17 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD13 | 17 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD12 | 17 | 0.15 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD11 | 17 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 17 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 17 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 17 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:62:LEU:HD11 | 17 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:62:LEU:HD13 | 17 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:62:LEU:HD12 | 17 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:62:LEU:HD11 | 17 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:62:LEU:HD13 | 17 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:62:LEU:HD12 | 17 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 17 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 17 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 17 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:66:LEU:HD11 | 17 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:66:LEU:HD12 | 17 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:66:LEU:HD13 | 17 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:66:LEU:HD11 | 17 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:66:LEU:HD12 | 17 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:66:LEU:HD13 | 17 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD13 | 20 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD12 | 20 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD11 | 20 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD13 | 20 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD12 | 20 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD11 | 20 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD13 | 20 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD12 | 20 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD11 | 20 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 20 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 20 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 20 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:62:LEU:HD11 | 20 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:62:LEU:HD13 | 20 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:62:LEU:HD12 | 20 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:62:LEU:HD11 | 20 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:62:LEU:HD13 | 20 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:62:LEU:HD12 | 20 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 20 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 20 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 20 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:66:LEU:HD11 | 20 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:66:LEU:HD12 | 20 | 0.15 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:66:LEU:HD13 | 20 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:66:LEU:HD11 | 20 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:66:LEU:HD12 | 20 | 0.15 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:66:LEU:HD13 | 20 | 0.15 |
| (3,233) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:10:PRO:HD3 | 9 | 0.15 |
| (3,233) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:32:PRO:HD2 | 9 | 0.15 |
| (3,233) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:10:PRO:HD3 | 18 | 0.15 |
| (3,233) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:32:PRO:HD2 | 18 | 0.15 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HD1 | 2 | 0.15 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HD1 | 2 | 0.15 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HD1 | 2 | 0.15 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HE1 | 2 | 0.15 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HE1 | 2 | 0.15 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HE1 | 2 | 0.15 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HD1 | 14 | 0.15 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HD1 | 14 | 0.15 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HD1 | 14 | 0.15 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HE1 | 14 | 0.15 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HE1 | 14 | 0.15 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HE1 | 14 | 0.15 |
| (3,219) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HB3 | 7 | 0.15 |
| (3,219) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HB3 | 7 | 0.15 |
| (3,219) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HB3 | 7 | 0.15 |
| (3,219) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:26:LEU:HB3 | 7 | 0.15 |
| (3,219) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:26:LEU:HB3 | 7 | 0.15 |
| (3,219) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:26:LEU:HB3 | 7 | 0.15 |
| (3,205) | 1:A:11:CYS:HB2 | 1:A:14:PHE:HD2 | 15 | 0.15 |
| (3,205) | 1:A:11:CYS:HB2 | 1:A:14:PHE:HD1 | 15 | 0.15 |
| (3,205) | 1:A:37:GLN:HE21 | 1:A:11:CYS:HB2 | 15 | 0.15 |
| (3,20) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:59:GLN:HG2 | 8 | 0.15 |
| (3,20) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:60:GLU:HG3 | 8 | 0.15 |
| (3,20) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:59:GLN:HG2 | 19 | 0.15 |
| (3,20) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:60:GLU:HG3 | 19 | 0.15 |
| (3,183) | 1:A:32:PRO:HB2 | 1:A:32:PRO:HA | 11 | 0.15 |
| (3,183) | 1:A:10:PRO:HB2 | 1:A:10:PRO:HA | 11 | 0.15 |
| (3,178) | 1:A:37:GLN:HG3 | 1:A:28:ILE:HG21 | 15 | 0.15 |
| (3,178) | 1:A:37:GLN:HG3 | 1:A:28:ILE:HG23 | 15 | 0.15 |
| (3,178) | 1:A:37:GLN:HG3 | 1:A:28:ILE:HG22 | 15 | 0.15 |
| (3,178) | 1:A:37:GLN:HG3 | 1:A:29:LEU:HD13 | 15 | 0.15 |
| (3,178) | 1:A:37:GLN:HG3 | 1:A:29:LEU:HD12 | 15 | 0.15 |
| (3,178) | 1:A:37:GLN:HG3 | 1:A:29:LEU:HD11 | 15 | 0.15 |
| (3,178) | 1:A:37:GLN:HG3 | 1:A:29:LEU:HG | 15 | 0.15 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,178) | 1:A:37:GLN:HG3 | 1:A:36:LEU:HD22 | 15 | 0.15 |
| (3,178) | 1:A:37:GLN:HG3 | 1:A:36:LEU:HD23 | 15 | 0.15 |
| (3,178) | 1:A:37:GLN:HG3 | 1:A:36:LEU:HD21 | 15 | 0.15 |
| (3,178) | 1:A:59:GLN:HG2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 15 | 0.15 |
| (3,178) | 1:A:59:GLN:HG2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 15 | 0.15 |
| (3,178) | 1:A:59:GLN:HG2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 15 | 0.15 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:27:LYS:HG3 | 19 | 0.15 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB2 | 19 | 0.15 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB3 | 19 | 0.15 |
| (3,175) | 1:A:39:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB1 | 19 | 0.15 |
| (3,17) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:20:ARG:HD3 | 2 | 0.15 |
| (3,17) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:22:ASN:HB2 | 2 | 0.15 |
| (3,169) | 1:A:7:TYR:HB3 | 1:A:8:ARG:HB2 | 20 | 0.15 |
| (3,169) | 1:A:67:ASN:HB3 | 1:A:68:LYS:HD2 | 20 | 0.15 |
| (3,132) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:26:LEU:HG | 1 | 0.15 |
| (3,132) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HG3 | 1 | 0.15 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HD13 | 4 | 0.15 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HD12 | 4 | 0.15 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HD11 | 4 | 0.15 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG21 | 4 | 0.15 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG23 | 4 | 0.15 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG22 | 4 | 0.15 |
| (1,967) | 1:A:24:LYS:HG2 | 1:A:42:LEU:HA | 11 | 0.15 |
| (1,967) | 1:A:24:LYS:HG2 | 1:A:42:LEU:HA | 20 | 0.15 |
| (1,966) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HG2 | 18 | 0.15 |
| (1,965) | 1:A:24:LYS:HB3 | 1:A:24:LYS:HG2 | 18 | 0.15 |
| (1,963) | 1:A:24:LYS:HA | 1:A:23:VAL:HG13 | 7 | 0.15 |
| (1,963) | 1:A:24:LYS:HA | 1:A:23:VAL:HG11 | 7 | 0.15 |
| (1,963) | 1:A:24:LYS:HA | 1:A:23:VAL:HG12 | 7 | 0.15 |
| (1,963) | 1:A:24:LYS:HA | 1:A:23:VAL:HG13 | 10 | 0.15 |
| (1,963) | 1:A:24:LYS:HA | 1:A:23:VAL:HG11 | 10 | 0.15 |
| (1,963) | 1:A:24:LYS:HA | 1:A:23:VAL:HG12 | 10 | 0.15 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:23:VAL:H | 2 | 0.15 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:23:VAL:H | 2 | 0.15 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:23:VAL:H | 2 | 0.15 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:23:VAL:H | 7 | 0.15 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:23:VAL:H | 7 | 0.15 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:23:VAL:H | 7 | 0.15 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:23:VAL:H | 14 | 0.15 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:23:VAL:H | 14 | 0.15 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:23:VAL:H | 14 | 0.15 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:23:VAL:H | 16 | 0.15 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:23:VAL:H | 16 | 0.15 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:23:VAL:H | 16 | 0.15 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:23:VAL:H | 17 | 0.15 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:23:VAL:H | 17 | 0.15 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:23:VAL:H | 17 | 0.15 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:23:VAL:H | 18 | 0.15 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:23:VAL:H | 18 | 0.15 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:23:VAL:H | 18 | 0.15 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:23:VAL:H | 20 | 0.15 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:23:VAL:H | 20 | 0.15 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:23:VAL:H | 20 | 0.15 |
| (1,948) | 1:A:21:ALA:HA | 1:A:22:ASN:HA | 1 | 0.15 |
| (1,948) | 1:A:21:ALA:HA | 1:A:22:ASN:HA | 2 | 0.15 |
| (1,948) | 1:A:21:ALA:HA | 1:A:22:ASN:HA | 3 | 0.15 |
| (1,948) | 1:A:21:ALA:HA | 1:A:22:ASN:HA | 4 | 0.15 |
| (1,948) | 1:A:21:ALA:HA | 1:A:22:ASN:HA | 8 | 0.15 |
| (1,881) | 1:A:20:ARG:HB3 | 1:A:19:ALA:HA | 11 | 0.15 |
| (1,856) | 1:A:10:PRO:HB3 | 1:A:29:LEU:HG | 2 | 0.15 |
| (1,855) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 5 | 0.15 |
| (1,855) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 5 | 0.15 |
| (1,855) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 5 | 0.15 |
| (1,815) | 1:A:33:ASN:HD22 | 1:A:33:ASN:HB2 | 15 | 0.15 |
| (1,802) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:67:ASN:HA | 19 | 0.15 |
| (1,764) | 1:A:14:PHE:HB2 | 1:A:51:ILE:HA | 15 | 0.15 |
| (1,763) | 1:A:14:PHE:HA | 1:A:14:PHE:HB2 | 14 | 0.15 |
| (1,753) | 1:A:54:LYS:HE3 | 1:A:54:LYS:HD2 | 1 | 0.15 |
| (1,753) | 1:A:54:LYS:HE3 | 1:A:54:LYS:HD2 | 18 | 0.15 |
| (1,745) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:59:GLN:HA | 13 | 0.15 |
| (1,741) | 1:A:66:LEU:HA | 1:A:66:LEU:HB2 | 5 | 0.15 |
| (1,741) | 1:A:66:LEU:HA | 1:A:66:LEU:HB2 | 9 | 0.15 |
| (1,741) | 1:A:66:LEU:HA | 1:A:66:LEU:HB2 | 12 | 0.15 |
| (1,718) | 1:A:47:ARG:HD3 | 1:A:47:ARG:HG3 | 15 | 0.15 |
| (1,718) | 1:A:47:ARG:HD3 | 1:A:47:ARG:HG3 | 17 | 0.15 |
| (1,718) | 1:A:47:ARG:HD3 | 1:A:47:ARG:HG3 | 20 | 0.15 |
| (1,715) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HB3 | 17 | 0.15 |
| (1,69) | 1:A:35:ALA:H | 1:A:34:CYS:HB2 | 11 | 0.15 |
| (1,687) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG23 | 7 | 0.15 |
| (1,687) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG21 | 7 | 0.15 |
| (1,687) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG22 | 7 | 0.15 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG23 | 6 | 0.15 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG22 | 6 | 0.15 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG21 | 6 | 0.15 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG23 | 13 | 0.15 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG22 | 13 | 0.15 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG21 | 13 | 0.15 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG23 | 19 | 0.15 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG22 | 19 | 0.15 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG21 | 19 | 0.15 |
| (1,570) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:63:GLU:HG3 | 12 | 0.15 |
| (1,501) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:48:GLN:HE22 | 12 | 0.15 |
| (1,501) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:48:GLN:HE22 | 13 | 0.15 |
| (1,443) | 1:A:33:ASN:HD22 | 1:A:32:PRO:HB3 | 3 | 0.15 |
| (1,431) | 1:A:30:ASN:HD21 | 1:A:30:ASN:HA | 6 | 0.15 |
| (1,393) | 1:A:22:ASN:H | 1:A:22:ASN:HB3 | 20 | 0.15 |
| (1,309) | 1:A:34:CYS:H | 1:A:34:CYS:HB3 | 8 | 0.15 |
| (1,309) | 1:A:34:CYS:H | 1:A:34:CYS:HB3 | 17 | 0.15 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB2 | 2 | 0.15 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB3 | 2 | 0.15 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB1 | 2 | 0.15 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB2 | 12 | 0.15 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB3 | 12 | 0.15 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB1 | 12 | 0.15 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB2 | 13 | 0.15 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB3 | 13 | 0.15 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB1 | 13 | 0.15 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB2 | 14 | 0.15 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB3 | 14 | 0.15 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB1 | 14 | 0.15 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB2 | 18 | 0.15 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB3 | 18 | 0.15 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB1 | 18 | 0.15 |
| (1,298) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:64:LYS:HG3 | 17 | 0.15 |
| (1,298) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:64:LYS:HG3 | 18 | 0.15 |
| (1,248) | 1:A:31:THR:H | 1:A:36:LEU:HA | 6 | 0.15 |
| (1,248) | 1:A:31:THR:H | 1:A:36:LEU:HA | 7 | 0.15 |
| (1,248) | 1:A:31:THR:H | 1:A:36:LEU:HA | 9 | 0.15 |
| (1,244) | 1:A:18:ILE:H | 1:A:18:ILE:HG12 | 18 | 0.15 |
| (1,214) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:47:ARG:H | 3 | 0.15 |
| (1,214) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:47:ARG:H | 15 | 0.15 |
| (1,214) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:47:ARG:H | 18 | 0.15 |
| (1,207) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:55:LEU:H | 20 | 0.15 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD12 | 1:A:38:ILE:CG2 | 5 | 0.15 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD11 | 1:A:38:ILE:CG2 | 5 | 0.15 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD13 | 1:A:38:ILE:CG2 | 5 | 0.15 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD12 | 1:A:38:ILE:CG2 | 15 | 0.15 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD11 | 1:A:38:ILE:CG2 | 15 | 0.15 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD13 | 1:A:38:ILE:CG2 | 15 | 0.15 |
| (1,17) | 1:A:25:HIS:HD2 | 1:A:24:LYS:HD2 | 1 | 0.15 |
| (1,17) | 1:A:25:HIS:HD2 | 1:A:24:LYS:HD2 | 5 | 0.15 |
| (1,169) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 1 | 0.15 |
| (1,169) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 19 | 0.15 |
| (1,164) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:9:CYS:HB3 | 2 | 0.15 |
| (1,164) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:9:CYS:HB3 | 4 | 0.15 |
| (1,164) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:9:CYS:HB3 | 10 | 0.15 |
| (1,164) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:9:CYS:HB3 | 11 | 0.15 |
| (1,159) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:ARG:HA | 12 | 0.15 |
| (1,149) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:14:PHE:HB2 | 3 | 0.15 |
| (1,145) | 1:A:7:TYR:H | 1:A:7:TYR:HB3 | 20 | 0.15 |
| (1,132) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:23:VAL:HB | 10 | 0.15 |
| (1,132) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:23:VAL:HB | 12 | 0.15 |
| (1,132) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:23:VAL:HB | 16 | 0.15 |
| (1,132) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:23:VAL:HB | 17 | 0.15 |
| (1,132) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:23:VAL:HB | 19 | 0.15 |
| (1,1206) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:67:ASN:HD22 | 10 | 0.15 |
| (1,1206) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:67:ASN:HD22 | 12 | 0.15 |
| (1,1188) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 16 | 0.15 |
| (1,1180) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:59:GLN:HA | 19 | 0.15 |
| (1,1098) | 1:A:48:GLN:HA | 1:A:41:ARG:HG3 | 16 | 0.15 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD21 | 7 | 0.15 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD22 | 7 | 0.15 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD23 | 7 | 0.15 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD21 | 8 | 0.15 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD22 | 8 | 0.15 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD23 | 8 | 0.15 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD21 | 17 | 0.15 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD22 | 17 | 0.15 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD23 | 17 | 0.15 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB2 | 1 | 0.15 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB3 | 1 | 0.15 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB1 | 1 | 0.15 |
| (1,1032) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:36:LEU:HB2 | 8 | 0.15 |
| (1,1032) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:36:LEU:HB2 | 8 | 0.15 |
| (1,1032) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:36:LEU:HB2 | 8 | 0.15 |
| (1,1022) | 1:A:38:ILE:HG21 | 1:A:28:ILE:HG12 | 20 | 0.15 |
| (1,1022) | 1:A:38:ILE:HG23 | 1:A:28:ILE:HG12 | 20 | 0.15 |
| (1,1022) | 1:A:38:ILE:HG22 | 1:A:28:ILE:HG12 | 20 | 0.15 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,102) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:20:ARG:HB2 | 4 | 0.15 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG22 | 12 | 0.15 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG21 | 12 | 0.15 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG23 | 12 | 0.15 |
| (3,8) | 1:A:35:ALA:H | 1:A:28:ILE:HG21 | 13 | 0.14 |
| (3,8) | 1:A:35:ALA:H | 1:A:28:ILE:HG23 | 13 | 0.14 |
| (3,8) | 1:A:35:ALA:H | 1:A:28:ILE:HG22 | 13 | 0.14 |
| (3,8) | 1:A:35:ALA:H | 1:A:36:LEU:HD13 | 13 | 0.14 |
| (3,8) | 1:A:35:ALA:H | 1:A:36:LEU:HD12 | 13 | 0.14 |
| (3,8) | 1:A:35:ALA:H | 1:A:36:LEU:HD11 | 13 | 0.14 |
| (3,8) | 1:A:35:ALA:H | 1:A:36:LEU:HD22 | 13 | 0.14 |
| (3,8) | 1:A:35:ALA:H | 1:A:36:LEU:HD23 | 13 | 0.14 |
| (3,8) | 1:A:35:ALA:H | 1:A:36:LEU:HD21 | 13 | 0.14 |
| (3,73) | 1:A:29:LEU:H | 1:A:28:ILE:HG13 | 20 | 0.14 |
| (3,73) | 1:A:29:LEU:H | 1:A:38:ILE:HG12 | 20 | 0.14 |
| (3,55) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:55:LEU:HB2 | 11 | 0.14 |
| (3,55) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:55:LEU:HD21 | 11 | 0.14 |
| (3,55) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:55:LEU:HD22 | 11 | 0.14 |
| (3,55) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:55:LEU:HD23 | 11 | 0.14 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HB2 | 2 | 0.14 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 2 | 0.14 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 2 | 0.14 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 2 | 0.14 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HB2 | 3 | 0.14 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 3 | 0.14 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 3 | 0.14 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 3 | 0.14 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HB2 | 9 | 0.14 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 9 | 0.14 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 9 | 0.14 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 9 | 0.14 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HB2 | 20 | 0.14 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 20 | 0.14 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 20 | 0.14 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 20 | 0.14 |
| (3,44) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 8 | 0.14 |
| (3,44) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 8 | 0.14 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD11 | 7 | 0.14 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD13 | 7 | 0.14 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD12 | 7 | 0.14 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HG | 7 | 0.14 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD11 | 14 | 0.14 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD13 | 14 | 0.14 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD12 | 14 | 0.14 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HG | 14 | 0.14 |
| (3,41) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:59:GLN:HB2 | 4 | 0.14 |
| (3,41) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:60:GLU:HB3 | 4 | 0.14 |
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HD11 | 12 | 0.14 |
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HD13 | 12 | 0.14 |
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HD12 | 12 | 0.14 |
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HG | 12 | 0.14 |
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HD11 | 14 | 0.14 |
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HD13 | 14 | 0.14 |
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HD12 | 14 | 0.14 |
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HG | 14 | 0.14 |
| (3,30) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:24:LYS:HB3 | 8 | 0.14 |
| (3,30) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:41:ARG:HB2 | 8 | 0.14 |
| (3,30) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:24:LYS:HB3 | 10 | 0.14 |
| (3,30) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:41:ARG:HB2 | 10 | 0.14 |
| (3,30) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:24:LYS:HB3 | 14 | 0.14 |
| (3,30) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:41:ARG:HB2 | 14 | 0.14 |
| (3,282) | 1:A:65:ALA:HA | 1:A:28:ILE:HG12 | 11 | 0.14 |
| (3,282) | 1:A:65:ALA:HA | 1:A:66:LEU:HB3 | 11 | 0.14 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:18:ILE:HG23 | 5 | 0.14 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:18:ILE:HG22 | 5 | 0.14 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:18:ILE:HG21 | 5 | 0.14 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:39:VAL:HG23 | 5 | 0.14 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:39:VAL:HG21 | 5 | 0.14 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:39:VAL:HG22 | 5 | 0.14 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:49:VAL:HG11 | 5 | 0.14 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:49:VAL:HG13 | 5 | 0.14 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:49:VAL:HG12 | 5 | 0.14 |
| (3,268) | 1:A:58:ILE:HA | 1:A:55:LEU:H | 4 | 0.14 |
| (3,268) | 1:A:58:ILE:HA | 1:A:61:TYR:HD2 | 4 | 0.14 |
| (3,268) | 1:A:58:ILE:HA | 1:A:55:LEU:H | 10 | 0.14 |
| (3,268) | 1:A:58:ILE:HA | 1:A:61:TYR:HD2 | 10 | 0.14 |
| (3,268) | 1:A:58:ILE:HA | 1:A:55:LEU:H | 17 | 0.14 |
| (3,268) | 1:A:58:ILE:HA | 1:A:61:TYR:HD2 | 17 | 0.14 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD22 | 1:A:4:SER:HB3 | 7 | 0.14 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD23 | 1:A:4:SER:HB3 | 7 | 0.14 |
| (3,231) | 1:A:5:LEU:HD21 | 1:A:4:SER:HB3 | 7 | 0.14 |
| (3,231) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:29:LEU:HG | 7 | 0.14 |
| (3,231) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:66:LEU:HG | 7 | 0.14 |
| (3,183) | 1:A:32:PRO:HB2 | 1:A:32:PRO:HA | 1 | 0.14 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,183) | 1:A:10:PRO:HB2 | 1:A:10:PRO:HA | 1 | 0.14 |
| (3,183) | 1:A:32:PRO:HB2 | 1:A:32:PRO:HA | 7 | 0.14 |
| (3,183) | 1:A:10:PRO:HB2 | 1:A:10:PRO:HA | 7 | 0.14 |
| (3,183) | 1:A:32:PRO:HB2 | 1:A:32:PRO:HA | 8 | 0.14 |
| (3,183) | 1:A:10:PRO:HB2 | 1:A:10:PRO:HA | 8 | 0.14 |
| (3,183) | 1:A:32:PRO:HB2 | 1:A:32:PRO:HA | 13 | 0.14 |
| (3,183) | 1:A:10:PRO:HB2 | 1:A:10:PRO:HA | 13 | 0.14 |
| (3,183) | 1:A:32:PRO:HB2 | 1:A:32:PRO:HA | 18 | 0.14 |
| (3,183) | 1:A:10:PRO:HB2 | 1:A:10:PRO:HA | 18 | 0.14 |
| (3,132) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:26:LEU:HG | 5 | 0.14 |
| (3,132) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HG3 | 5 | 0.14 |
| (3,132) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:26:LEU:HG | 9 | 0.14 |
| (3,132) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HG3 | 9 | 0.14 |
| (3,132) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:26:LEU:HG | 19 | 0.14 |
| (3,132) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HG3 | 19 | 0.14 |
| (3,132) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:26:LEU:HG | 20 | 0.14 |
| (3,132) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HG3 | 20 | 0.14 |
| (3,121) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HB2 | 10 | 0.14 |
| (3,121) | 1:A:47:ARG:HA | 1:A:47:ARG:HG3 | 10 | 0.14 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HD13 | 1 | 0.14 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HD12 | 1 | 0.14 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HD11 | 1 | 0.14 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG21 | 1 | 0.14 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG23 | 1 | 0.14 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG22 | 1 | 0.14 |
| (1,987) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:28:ILE:HD13 | 4 | 0.14 |
| (1,987) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:28:ILE:HD12 | 4 | 0.14 |
| (1,987) | 1:A:62:LEU:HA | 1:A:28:ILE:HD11 | 4 | 0.14 |
| (1,982) | 1:A:28:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG12 | 1 | 0.14 |
| (1,982) | 1:A:28:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG12 | 6 | 0.14 |
| (1,967) | 1:A:24:LYS:HG2 | 1:A:42:LEU:HA | 7 | 0.14 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:23:VAL:H | 3 | 0.14 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:23:VAL:H | 3 | 0.14 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:23:VAL:H | 3 | 0.14 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:23:VAL:H | 9 | 0.14 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:23:VAL:H | 9 | 0.14 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:23:VAL:H | 9 | 0.14 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:23:VAL:H | 19 | 0.14 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:23:VAL:H | 19 | 0.14 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:23:VAL:H | 19 | 0.14 |
| (1,948) | 1:A:21:ALA:HA | 1:A:22:ASN:HA | 16 | 0.14 |
| (1,948) | 1:A:21:ALA:HA | 1:A:22:ASN:HA | 17 | 0.14 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,90) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HD12 | 13 | 0.14 |
| (1,90) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HD11 | 13 | 0.14 |
| (1,90) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HD13 | 13 | 0.14 |
| (1,90) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HD12 | 19 | 0.14 |
| (1,90) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HD11 | 19 | 0.14 |
| (1,90) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HD13 | 19 | 0.14 |
| (1,882) | 1:A:54:LYS:HD2 | 1:A:54:LYS:HA | 17 | 0.14 |
| (1,881) | 1:A:20:ARG:HB3 | 1:A:19:ALA:HA | 5 | 0.14 |
| (1,881) | 1:A:20:ARG:HB3 | 1:A:19:ALA:HA | 17 | 0.14 |
| (1,875) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:60:GLU:HB3 | 10 | 0.14 |
| (1,833) | 1:A:28:ILE:H | 1:A:27:LYS:HB3 | 9 | 0.14 |
| (1,833) | 1:A:28:ILE:H | 1:A:27:LYS:HB3 | 12 | 0.14 |
| (1,833) | 1:A:28:ILE:H | 1:A:27:LYS:HB3 | 15 | 0.14 |
| (1,827) | 1:A:15:GLU:HG3 | 1:A:15:GLU:HA | 7 | 0.14 |
| (1,825) | 1:A:15:GLU:HG3 | 1:A:18:ILE:HD12 | 5 | 0.14 |
| (1,825) | 1:A:15:GLU:HG3 | 1:A:18:ILE:HD13 | 5 | 0.14 |
| (1,825) | 1:A:15:GLU:HG3 | 1:A:18:ILE:HD11 | 5 | 0.14 |
| (1,815) | 1:A:33:ASN:HD22 | 1:A:33:ASN:HB2 | 14 | 0.14 |
| (1,764) | 1:A:14:PHE:HB2 | 1:A:51:ILE:HA | 5 | 0.14 |
| (1,763) | 1:A:14:PHE:HA | 1:A:14:PHE:HB2 | 3 | 0.14 |
| (1,745) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:59:GLN:HA | 9 | 0.14 |
| (1,744) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:68:LYS:HD2 | 4 | 0.14 |
| (1,744) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:68:LYS:HD2 | 11 | 0.14 |
| (1,741) | 1:A:66:LEU:HA | 1:A:66:LEU:HB2 | 2 | 0.14 |
| (1,741) | 1:A:66:LEU:HA | 1:A:66:LEU:HB2 | 3 | 0.14 |
| (1,741) | 1:A:66:LEU:HA | 1:A:66:LEU:HB2 | 4 | 0.14 |
| (1,741) | 1:A:66:LEU:HA | 1:A:66:LEU:HB2 | 8 | 0.14 |
| (1,741) | 1:A:66:LEU:HA | 1:A:66:LEU:HB2 | 11 | 0.14 |
| (1,741) | 1:A:66:LEU:HA | 1:A:66:LEU:HB2 | 16 | 0.14 |
| (1,741) | 1:A:66:LEU:HA | 1:A:66:LEU:HB2 | 17 | 0.14 |
| (1,741) | 1:A:66:LEU:HA | 1:A:66:LEU:HB2 | 18 | 0.14 |
| (1,741) | 1:A:66:LEU:HA | 1:A:66:LEU:HB2 | 19 | 0.14 |
| (1,719) | 1:A:47:ARG:HD2 | 1:A:47:ARG:HB3 | 13 | 0.14 |
| (1,712) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:37:GLN:HG3 | 7 | 0.14 |
| (1,7) | 1:A:23:VAL:CG2 | 1:A:40:ALA:HB2 | 6 | 0.14 |
| (1,7) | 1:A:23:VAL:CG2 | 1:A:40:ALA:HB3 | 6 | 0.14 |
| (1,7) | 1:A:23:VAL:CG2 | 1:A:40:ALA:HB1 | 6 | 0.14 |
| (1,7) | 1:A:23:VAL:CG2 | 1:A:40:ALA:HB2 | 8 | 0.14 |
| (1,7) | 1:A:23:VAL:CG2 | 1:A:40:ALA:HB3 | 8 | 0.14 |
| (1,7) | 1:A:23:VAL:CG2 | 1:A:40:ALA:HB1 | 8 | 0.14 |
| (1,691) | 1:A:53:PRO:HD2 | 1:A:14:PHE:HE2 | 13 | 0.14 |
| (1,691) | 1:A:53:PRO:HD2 | 1:A:14:PHE:HE1 | 13 | 0.14 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,69) | 1:A:35:ALA:H | 1:A:34:CYS:HB2 | 16 | 0.14 |
| (1,674) | 1:A:22:ASN:HA | 1:A:22:ASN:HB3 | 6 | 0.14 |
| (1,570) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:63:GLU:HG3 | 4 | 0.14 |
| (1,570) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:63:GLU:HG3 | 6 | 0.14 |
| (1,570) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:63:GLU:HG3 | 11 | 0.14 |
| (1,570) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:63:GLU:HG3 | 17 | 0.14 |
| (1,567) | 1:A:60:GLU:HA | 1:A:60:GLU:HG3 | 14 | 0.14 |
| (1,53) | 1:A:52:ASP:H | 1:A:16:SER:HA | 7 | 0.14 |
| (1,507) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:48:GLN:HB2 | 13 | 0.14 |
| (1,507) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:48:GLN:HB2 | 14 | 0.14 |
| (1,507) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:48:GLN:HB2 | 20 | 0.14 |
| (1,501) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:48:GLN:HE22 | 5 | 0.14 |
| (1,443) | 1:A:33:ASN:HD22 | 1:A:32:PRO:HB3 | 16 | 0.14 |
| (1,443) | 1:A:33:ASN:HD22 | 1:A:32:PRO:HB3 | 17 | 0.14 |
| (1,432) | 1:A:31:THR:H | 1:A:32:PRO:HD3 | 12 | 0.14 |
| (1,410) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:22:ASN:HB2 | 5 | 0.14 |
| (1,393) | 1:A:22:ASN:H | 1:A:22:ASN:HB3 | 3 | 0.14 |
| (1,352) | 1:A:11:CYS:H | 1:A:37:GLN:HE21 | 1 | 0.14 |
| (1,351) | 1:A:11:CYS:H | 1:A:10:PRO:HB3 | 12 | 0.14 |
| (1,351) | 1:A:11:CYS:H | 1:A:10:PRO:HB3 | 19 | 0.14 |
| (1,31) | 1:A:14:PHE:HE2 | 1:A:14:PHE:HA | 17 | 0.14 |
| (1,31) | 1:A:14:PHE:HE1 | 1:A:14:PHE:HA | 17 | 0.14 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD12 | 6 | 0.14 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD13 | 6 | 0.14 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD11 | 6 | 0.14 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB2 | 10 | 0.14 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB3 | 10 | 0.14 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB1 | 10 | 0.14 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB2 | 15 | 0.14 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB3 | 15 | 0.14 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB1 | 15 | 0.14 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB2 | 20 | 0.14 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB3 | 20 | 0.14 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB1 | 20 | 0.14 |
| (1,298) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:64:LYS:HG3 | 8 | 0.14 |
| (1,298) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:64:LYS:HG3 | 13 | 0.14 |
| (1,290) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:63:GLU:HG2 | 17 | 0.14 |
| (1,249) | 1:A:31:THR:H | 1:A:31:THR:HB | 14 | 0.14 |
| (1,249) | 1:A:31:THR:H | 1:A:31:THR:HB | 19 | 0.14 |
| (1,249) | 1:A:31:THR:H | 1:A:31:THR:HB | 20 | 0.14 |
| (1,244) | 1:A:18:ILE:H | 1:A:18:ILE:HG12 | 17 | 0.14 |
| (1,214) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:47:ARG:H | 8 | 0.14 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,214) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:47:ARG:H | 13 | 0.14 |
| (1,214) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:47:ARG:H | 16 | 0.14 |
| (1,214) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:47:ARG:H | 20 | 0.14 |
| (1,207) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:55:LEU:H | 9 | 0.14 |
| (1,207) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:55:LEU:H | 15 | 0.14 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD12 | 1:A:38:ILE:CG2 | 9 | 0.14 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD11 | 1:A:38:ILE:CG2 | 9 | 0.14 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD13 | 1:A:38:ILE:CG2 | 9 | 0.14 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD12 | 1:A:38:ILE:CG2 | 13 | 0.14 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD11 | 1:A:38:ILE:CG2 | 13 | 0.14 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD13 | 1:A:38:ILE:CG2 | 13 | 0.14 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD12 | 1:A:38:ILE:CG2 | 19 | 0.14 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD11 | 1:A:38:ILE:CG2 | 19 | 0.14 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD13 | 1:A:38:ILE:CG2 | 19 | 0.14 |
| (1,196) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:49:VAL:HG11 | 7 | 0.14 |
| (1,196) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:49:VAL:HG13 | 7 | 0.14 |
| (1,196) | 1:A:50:CYS:H | 1:A:49:VAL:HG12 | 7 | 0.14 |
| (1,169) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 8 | 0.14 |
| (1,169) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 20 | 0.14 |
| (1,163) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:67:ASN:HB3 | 6 | 0.14 |
| (1,16) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:26:LEU:HB2 | 9 | 0.14 |
| (1,145) | 1:A:7:TYR:H | 1:A:7:TYR:HB3 | 18 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:23:VAL:HB | 1 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:23:VAL:HB | 3 | 0.14 |
| (1,1206) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:67:ASN:HD22 | 7 | 0.14 |
| (1,1206) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:67:ASN:HD22 | 9 | 0.14 |
| (1,1206) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:67:ASN:HD22 | 18 | 0.14 |
| (1,120) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:37:GLN:HG3 | 13 | 0.14 |
| (1,120) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:37:GLN:HG3 | 19 | 0.14 |
| (1,120) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:37:GLN:HG3 | 20 | 0.14 |
| (1,1164) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:58:ILE:HG23 | 12 | 0.14 |
| (1,1164) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:58:ILE:HG22 | 12 | 0.14 |
| (1,1164) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:58:ILE:HG21 | 12 | 0.14 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:59:GLN:HB2 | 1 | 0.14 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:59:GLN:HB2 | 1 | 0.14 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:59:GLN:HB2 | 1 | 0.14 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:59:GLN:HB2 | 6 | 0.14 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:59:GLN:HB2 | 6 | 0.14 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:59:GLN:HB2 | 6 | 0.14 |
| (1,1091) | 1:A:44:ASN:HB2 | 1:A:45:ASN:HA | 5 | 0.14 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD21 | 15 | 0.14 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD22 | 15 | 0.14 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD23 | 15 | 0.14 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD21 | 18 | 0.14 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD22 | 18 | 0.14 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD23 | 18 | 0.14 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB2 | 19 | 0.14 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB3 | 19 | 0.14 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB1 | 19 | 0.14 |
| (1,1054) | 1:A:26:LEU:HA | 1:A:40:ALA:HB2 | 14 | 0.14 |
| (1,1054) | 1:A:26:LEU:HA | 1:A:40:ALA:HB3 | 14 | 0.14 |
| (1,1054) | 1:A:26:LEU:HA | 1:A:40:ALA:HB1 | 14 | 0.14 |
| (1,103) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:20:ARG:HB3 | 15 | 0.14 |
| (1,1022) | 1:A:38:ILE:HG21 | 1:A:28:ILE:HG12 | 19 | 0.14 |
| (1,1022) | 1:A:38:ILE:HG23 | 1:A:28:ILE:HG12 | 19 | 0.14 |
| (1,1022) | 1:A:38:ILE:HG22 | 1:A:28:ILE:HG12 | 19 | 0.14 |
| (1,1008) | 1:A:32:PRO:HG3 | 1:A:31:THR:HG23 | 15 | 0.14 |
| (1,1008) | 1:A:32:PRO:HG3 | 1:A:31:THR:HG21 | 15 | 0.14 |
| (1,1008) | 1:A:32:PRO:HG3 | 1:A:31:THR:HG22 | 15 | 0.14 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG22 | 5 | 0.14 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG21 | 5 | 0.14 |
| (1,1) | 1:A:58:ILE:CD1 | 1:A:51:ILE:HG23 | 5 | 0.14 |
| (3,98) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:46:ASN:HB2 | 2 | 0.13 |
| (3,98) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:47:ARG:HD2 | 2 | 0.13 |
| (3,93) | 1:A:41:ARG:H | 1:A:24:LYS:HG3 | 11 | 0.13 |
| (3,93) | 1:A:41:ARG:H | 1:A:51:ILE:HG13 | 11 | 0.13 |
| (3,74) | 1:A:30:ASN:HD21 | 1:A:36:LEU:HD13 | 15 | 0.13 |
| (3,74) | 1:A:30:ASN:HD21 | 1:A:36:LEU:HD12 | 15 | 0.13 |
| (3,74) | 1:A:30:ASN:HD21 | 1:A:36:LEU:HD11 | 15 | 0.13 |
| (3,74) | 1:A:30:ASN:HD21 | 1:A:28:ILE:HG21 | 15 | 0.13 |
| (3,74) | 1:A:30:ASN:HD21 | 1:A:28:ILE:HG23 | 15 | 0.13 |
| (3,74) | 1:A:30:ASN:HD21 | 1:A:28:ILE:HG22 | 15 | 0.13 |
| (3,74) | 1:A:30:ASN:HD21 | 1:A:29:LEU:HD13 | 15 | 0.13 |
| (3,74) | 1:A:30:ASN:HD21 | 1:A:29:LEU:HD12 | 15 | 0.13 |
| (3,74) | 1:A:30:ASN:HD21 | 1:A:29:LEU:HD11 | 15 | 0.13 |
| (3,55) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:55:LEU:HB2 | 5 | 0.13 |
| (3,55) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:55:LEU:HD21 | 5 | 0.13 |
| (3,55) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:55:LEU:HD22 | 5 | 0.13 |
| (3,55) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:55:LEU:HD23 | 5 | 0.13 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HB2 | 10 | 0.13 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 10 | 0.13 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 10 | 0.13 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 10 | 0.13 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HB2 | 14 | 0.13 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 14 | 0.13 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 14 | 0.13 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 14 | 0.13 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HB2 | 19 | 0.13 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 19 | 0.13 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 19 | 0.13 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 19 | 0.13 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB2 | 14 | 0.13 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB3 | 14 | 0.13 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:19:ALA:HB1 | 14 | 0.13 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB2 | 14 | 0.13 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB3 | 14 | 0.13 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:21:ALA:HB1 | 14 | 0.13 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB2 | 14 | 0.13 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB3 | 14 | 0.13 |
| (3,49) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:40:ALA:HB1 | 14 | 0.13 |
| (3,30) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:24:LYS:HB3 | 17 | 0.13 |
| (3,30) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:41:ARG:HB2 | 17 | 0.13 |
| (3,30) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:24:LYS:HB3 | 20 | 0.13 |
| (3,30) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:41:ARG:HB2 | 20 | 0.13 |
| (3,287) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:61:TYR:HD1 | 2 | 0.13 |
| (3,287) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:61:TYR:HD1 | 2 | 0.13 |
| (3,287) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:61:TYR:HD1 | 2 | 0.13 |
| (3,287) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:61:TYR:HE1 | 2 | 0.13 |
| (3,287) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:61:TYR:HE1 | 2 | 0.13 |
| (3,287) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:61:TYR:HE1 | 2 | 0.13 |
| (3,286) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:68:LYS:HD2 | 4 | 0.13 |
| (3,286) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:64:LYS:HD2 | 4 | 0.13 |
| (3,286) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:66:LEU:HB3 | 4 | 0.13 |
| (3,286) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:68:LYS:HD2 | 8 | 0.13 |
| (3,286) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:64:LYS:HD2 | 8 | 0.13 |
| (3,286) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:66:LEU:HB3 | 8 | 0.13 |
| (3,279) | 1:A:22:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD21 | 3 | 0.13 |
| (3,279) | 1:A:22:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD23 | 3 | 0.13 |
| (3,279) | 1:A:22:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD22 | 3 | 0.13 |
| (3,279) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:61:TYR:HD2 | 3 | 0.13 |
| (3,279) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:61:TYR:HD2 | 3 | 0.13 |
| (3,279) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:61:TYR:HD2 | 3 | 0.13 |
| (3,277) | 1:A:37:GLN:HG3 | 1:A:37:GLN:HB2 | 6 | 0.13 |
| (3,277) | 1:A:59:GLN:HB2 | 1:A:59:GLN:HG2 | 6 | 0.13 |
| (3,277) | 1:A:37:GLN:HG3 | 1:A:37:GLN:HB2 | 7 | 0.13 |
| (3,277) | 1:A:59:GLN:HB2 | 1:A:59:GLN:HG2 | 7 | 0.13 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:18:ILE:HG23 | 12 | 0.13 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:18:ILE:HG22 | 12 | 0.13 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:18:ILE:HG21 | 12 | 0.13 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:39:VAL:HG23 | 12 | 0.13 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:39:VAL:HG21 | 12 | 0.13 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:39:VAL:HG22 | 12 | 0.13 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:49:VAL:HG11 | 12 | 0.13 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:49:VAL:HG13 | 12 | 0.13 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:49:VAL:HG12 | 12 | 0.13 |
| (3,268) | 1:A:58:ILE:HA | 1:A:55:LEU:H | 19 | 0.13 |
| (3,268) | 1:A:58:ILE:HA | 1:A:61:TYR:HD2 | 19 | 0.13 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HD1 | 13 | 0.13 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HD1 | 13 | 0.13 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HD1 | 13 | 0.13 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HE1 | 13 | 0.13 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HE1 | 13 | 0.13 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HE1 | 13 | 0.13 |
| (3,183) | 1:A:32:PRO:HB2 | 1:A:32:PRO:HA | 2 | 0.13 |
| (3,183) | 1:A:10:PRO:HB2 | 1:A:10:PRO:HA | 2 | 0.13 |
| (3,183) | 1:A:32:PRO:HB2 | 1:A:32:PRO:HA | 5 | 0.13 |
| (3,183) | 1:A:10:PRO:HB2 | 1:A:10:PRO:HA | 5 | 0.13 |
| (3,183) | 1:A:32:PRO:HB2 | 1:A:32:PRO:HA | 6 | 0.13 |
| (3,183) | 1:A:10:PRO:HB2 | 1:A:10:PRO:HA | 6 | 0.13 |
| (3,183) | 1:A:32:PRO:HB2 | 1:A:32:PRO:HA | 9 | 0.13 |
| (3,183) | 1:A:10:PRO:HB2 | 1:A:10:PRO:HA | 9 | 0.13 |
| (3,183) | 1:A:32:PRO:HB2 | 1:A:32:PRO:HA | 10 | 0.13 |
| (3,183) | 1:A:10:PRO:HB2 | 1:A:10:PRO:HA | 10 | 0.13 |
| (3,183) | 1:A:32:PRO:HB2 | 1:A:32:PRO:HA | 14 | 0.13 |
| (3,183) | 1:A:10:PRO:HB2 | 1:A:10:PRO:HA | 14 | 0.13 |
| (3,18) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:20:ARG:HG3 | 2 | 0.13 |
| (3,18) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 2 | 0.13 |
| (3,18) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 2 | 0.13 |
| (3,18) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 2 | 0.13 |
| (3,18) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:20:ARG:HG3 | 20 | 0.13 |
| (3,18) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 20 | 0.13 |
| (3,18) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 20 | 0.13 |
| (3,18) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 20 | 0.13 |
| (3,135) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:10:PRO:HG2 | 20 | 0.13 |
| (3,135) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:32:PRO:HG2 | 20 | 0.13 |
| (3,134) | 1:A:41:ARG:HA | 1:A:42:LEU:HB3 | 3 | 0.13 |
| (3,134) | 1:A:41:ARG:HA | 1:A:48:GLN:HG2 | 3 | 0.13 |
| (3,134) | 1:A:41:ARG:HA | 1:A:48:GLN:HG3 | 3 | 0.13 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,132) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:26:LEU:HG | 3 | 0.13 |
| (3,132) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HG3 | 3 | 0.13 |
| (3,132) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:26:LEU:HG | 8 | 0.13 |
| (3,132) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HG3 | 8 | 0.13 |
| (3,132) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:26:LEU:HG | 14 | 0.13 |
| (3,132) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HG3 | 14 | 0.13 |
| (3,122) | 1:A:47:ARG:HA | 1:A:41:ARG:HA | 3 | 0.13 |
| (3,122) | 1:A:47:ARG:HA | 1:A:48:GLN:HA | 3 | 0.13 |
| (3,122) | 1:A:47:ARG:HA | 1:A:41:ARG:HA | 7 | 0.13 |
| (3,122) | 1:A:47:ARG:HA | 1:A:48:GLN:HA | 7 | 0.13 |
| (3,122) | 1:A:47:ARG:HA | 1:A:41:ARG:HA | 12 | 0.13 |
| (3,122) | 1:A:47:ARG:HA | 1:A:48:GLN:HA | 12 | 0.13 |
| (3,122) | 1:A:47:ARG:HA | 1:A:41:ARG:HA | 15 | 0.13 |
| (3,122) | 1:A:47:ARG:HA | 1:A:48:GLN:HA | 15 | 0.13 |
| (3,122) | 1:A:47:ARG:HA | 1:A:41:ARG:HA | 17 | 0.13 |
| (3,122) | 1:A:47:ARG:HA | 1:A:48:GLN:HA | 17 | 0.13 |
| (3,107) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:57:TRP:HD1 | 12 | 0.13 |
| (3,107) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:61:TYR:H | 12 | 0.13 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HD13 | 15 | 0.13 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HD12 | 15 | 0.13 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HD11 | 15 | 0.13 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG21 | 15 | 0.13 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG23 | 15 | 0.13 |
| (3,10) | 1:A:38:ILE:H | 1:A:28:ILE:HG22 | 15 | 0.13 |
| (1,967) | 1:A:24:LYS:HG2 | 1:A:42:LEU:HA | 8 | 0.13 |
| (1,963) | 1:A:24:LYS:HA | 1:A:23:VAL:HG13 | 3 | 0.13 |
| (1,963) | 1:A:24:LYS:HA | 1:A:23:VAL:HG11 | 3 | 0.13 |
| (1,963) | 1:A:24:LYS:HA | 1:A:23:VAL:HG12 | 3 | 0.13 |
| (1,963) | 1:A:24:LYS:HA | 1:A:23:VAL:HG13 | 16 | 0.13 |
| (1,963) | 1:A:24:LYS:HA | 1:A:23:VAL:HG11 | 16 | 0.13 |
| (1,963) | 1:A:24:LYS:HA | 1:A:23:VAL:HG12 | 16 | 0.13 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:23:VAL:H | 5 | 0.13 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:23:VAL:H | 5 | 0.13 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:23:VAL:H | 5 | 0.13 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:23:VAL:H | 8 | 0.13 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:23:VAL:H | 8 | 0.13 |
| (1,958) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:23:VAL:H | 8 | 0.13 |
| (1,924) | 1:A:16:SER:HB3 | 1:A:55:LEU:HD21 | 14 | 0.13 |
| (1,924) | 1:A:16:SER:HB3 | 1:A:55:LEU:HD22 | 14 | 0.13 |
| (1,924) | 1:A:16:SER:HB3 | 1:A:55:LEU:HD23 | 14 | 0.13 |
| (1,915) | 1:A:12:ARG:HA | 1:A:12:ARG:HG3 | 4 | 0.13 |
| (1,882) | 1:A:54:LYS:HD2 | 1:A:54:LYS:HA | 18 | 0.13 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,829) | 1:A:28:ILE:H | 1:A:27:LYS:HB2 | 2 | 0.13 |
| (1,815) | 1:A:33:ASN:HD22 | 1:A:33:ASN:HB2 | 16 | 0.13 |
| (1,802) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:67:ASN:HA | 13 | 0.13 |
| (1,791) | 1:A:30:ASN:HD22 | 1:A:30:ASN:HB3 | 1 | 0.13 |
| (1,789) | 1:A:45:ASN:HB3 | 1:A:45:ASN:HA | 12 | 0.13 |
| (1,764) | 1:A:14:PHE:HB2 | 1:A:51:ILE:HA | 8 | 0.13 |
| (1,745) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:59:GLN:HA | 2 | 0.13 |
| (1,745) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:59:GLN:HA | 15 | 0.13 |
| (1,745) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:59:GLN:HA | 20 | 0.13 |
| (1,744) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:68:LYS:HD2 | 16 | 0.13 |
| (1,741) | 1:A:66:LEU:HA | 1:A:66:LEU:HB2 | 1 | 0.13 |
| (1,741) | 1:A:66:LEU:HA | 1:A:66:LEU:HB2 | 14 | 0.13 |
| (1,741) | 1:A:66:LEU:HA | 1:A:66:LEU:HB2 | 15 | 0.13 |
| (1,741) | 1:A:66:LEU:HA | 1:A:66:LEU:HB2 | 20 | 0.13 |
| (1,735) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:46:ASN:HA | 8 | 0.13 |
| (1,719) | 1:A:47:ARG:HD2 | 1:A:47:ARG:HB3 | 7 | 0.13 |
| (1,715) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HB3 | 3 | 0.13 |
| (1,7) | 1:A:23:VAL:CG2 | 1:A:40:ALA:HB2 | 11 | 0.13 |
| (1,7) | 1:A:23:VAL:CG2 | 1:A:40:ALA:HB3 | 11 | 0.13 |
| (1,7) | 1:A:23:VAL:CG2 | 1:A:40:ALA:HB1 | 11 | 0.13 |
| (1,666) | 1:A:67:ASN:HA | 1:A:67:ASN:HB3 | 9 | 0.13 |
| (1,615) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:54:LYS:HG3 | 17 | 0.13 |
| (1,592) | 1:A:64:LYS:HA | 1:A:67:ASN:HB2 | 9 | 0.13 |
| (1,570) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:63:GLU:HG3 | 1 | 0.13 |
| (1,570) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:63:GLU:HG3 | 13 | 0.13 |
| (1,553) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:26:LEU:HD22 | 17 | 0.13 |
| (1,553) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:26:LEU:HD21 | 17 | 0.13 |
| (1,553) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:26:LEU:HD23 | 17 | 0.13 |
| (1,53) | 1:A:52:ASP:H | 1:A:16:SER:HA | 15 | 0.13 |
| (1,507) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:48:GLN:HB2 | 8 | 0.13 |
| (1,507) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:48:GLN:HB2 | 9 | 0.13 |
| (1,507) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:48:GLN:HB2 | 17 | 0.13 |
| (1,507) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:48:GLN:HB2 | 18 | 0.13 |
| (1,462) | 1:A:37:GLN:HE21 | 1:A:9:CYS:HB3 | 9 | 0.13 |
| (1,432) | 1:A:31:THR:H | 1:A:32:PRO:HD3 | 3 | 0.13 |
| (1,431) | 1:A:30:ASN:HD21 | 1:A:30:ASN:HA | 1 | 0.13 |
| (1,399) | 1:A:22:ASN:HD22 | 1:A:19:ALA:HB2 | 16 | 0.13 |
| (1,399) | 1:A:22:ASN:HD22 | 1:A:19:ALA:HB3 | 16 | 0.13 |
| (1,399) | 1:A:22:ASN:HD22 | 1:A:19:ALA:HB1 | 16 | 0.13 |
| (1,393) | 1:A:22:ASN:H | 1:A:22:ASN:HB3 | 12 | 0.13 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD2 | 1:A:13:PHE:HE1 | 1 | 0.13 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD2 | 1:A:13:PHE:HE2 | 1 | 0.13 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD1 | 1:A:13:PHE:HE1 | 1 | 0.13 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD1 | 1:A:13:PHE:HE2 | 1 | 0.13 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD2 | 1:A:13:PHE:HE1 | 2 | 0.13 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD2 | 1:A:13:PHE:HE2 | 2 | 0.13 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD1 | 1:A:13:PHE:HE1 | 2 | 0.13 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD1 | 1:A:13:PHE:HE2 | 2 | 0.13 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD2 | 1:A:13:PHE:HE1 | 7 | 0.13 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD2 | 1:A:13:PHE:HE2 | 7 | 0.13 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD1 | 1:A:13:PHE:HE1 | 7 | 0.13 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD1 | 1:A:13:PHE:HE2 | 7 | 0.13 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD2 | 1:A:13:PHE:HE1 | 11 | 0.13 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD2 | 1:A:13:PHE:HE2 | 11 | 0.13 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD1 | 1:A:13:PHE:HE1 | 11 | 0.13 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD1 | 1:A:13:PHE:HE2 | 11 | 0.13 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD2 | 1:A:13:PHE:HE1 | 17 | 0.13 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD2 | 1:A:13:PHE:HE2 | 17 | 0.13 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD1 | 1:A:13:PHE:HE1 | 17 | 0.13 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD1 | 1:A:13:PHE:HE2 | 17 | 0.13 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD2 | 1:A:13:PHE:HE1 | 18 | 0.13 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD2 | 1:A:13:PHE:HE2 | 18 | 0.13 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD1 | 1:A:13:PHE:HE1 | 18 | 0.13 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD1 | 1:A:13:PHE:HE2 | 18 | 0.13 |
| (1,377) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:18:ILE:H | 11 | 0.13 |
| (1,352) | 1:A:11:CYS:H | 1:A:37:GLN:HE21 | 6 | 0.13 |
| (1,34) | 1:A:25:HIS:HE1 | 1:A:41:ARG:HG3 | 3 | 0.13 |
| (1,309) | 1:A:34:CYS:H | 1:A:34:CYS:HB3 | 20 | 0.13 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD12 | 14 | 0.13 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD13 | 14 | 0.13 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD11 | 14 | 0.13 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB2 | 9 | 0.13 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB3 | 9 | 0.13 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB1 | 9 | 0.13 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB2 | 19 | 0.13 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB3 | 19 | 0.13 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB1 | 19 | 0.13 |
| (1,298) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:64:LYS:HG3 | 4 | 0.13 |
| (1,298) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:64:LYS:HG3 | 15 | 0.13 |
| (1,282) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:64:LYS:H | 8 | 0.13 |
| (1,282) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:64:LYS:H | 14 | 0.13 |
| (1,282) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:64:LYS:H | 20 | 0.13 |
| (1,259) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:60:GLU:HA | 2 | 0.13 |
| (1,259) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:60:GLU:HA | 5 | 0.13 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,259) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:60:GLU:HA | 13 | 0.13 |
| (1,259) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:60:GLU:HA | 15 | 0.13 |
| (1,255) | 1:A:16:SER:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 9 | 0.13 |
| (1,249) | 1:A:31:THR:H | 1:A:31:THR:HB | 2 | 0.13 |
| (1,249) | 1:A:31:THR:H | 1:A:31:THR:HB | 5 | 0.13 |
| (1,249) | 1:A:31:THR:H | 1:A:31:THR:HB | 6 | 0.13 |
| (1,249) | 1:A:31:THR:H | 1:A:31:THR:HB | 7 | 0.13 |
| (1,249) | 1:A:31:THR:H | 1:A:31:THR:HB | 18 | 0.13 |
| (1,248) | 1:A:31:THR:H | 1:A:36:LEU:HA | 2 | 0.13 |
| (1,248) | 1:A:31:THR:H | 1:A:36:LEU:HA | 3 | 0.13 |
| (1,244) | 1:A:18:ILE:H | 1:A:18:ILE:HG12 | 5 | 0.13 |
| (1,241) | 1:A:18:ILE:H | 1:A:17:HIS:HB3 | 1 | 0.13 |
| (1,234) | 1:A:4:SER:H | 1:A:3:VAL:HA | 14 | 0.13 |
| (1,217) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:45:ASN:HB2 | 6 | 0.13 |
| (1,217) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:45:ASN:HB2 | 13 | 0.13 |
| (1,217) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:45:ASN:HB2 | 20 | 0.13 |
| (1,207) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:55:LEU:H | 1 | 0.13 |
| (1,207) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:55:LEU:H | 2 | 0.13 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD12 | 1:A:38:ILE:CG2 | 1 | 0.13 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD11 | 1:A:38:ILE:CG2 | 1 | 0.13 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD13 | 1:A:38:ILE:CG2 | 1 | 0.13 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD12 | 1:A:38:ILE:CG2 | 3 | 0.13 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD11 | 1:A:38:ILE:CG2 | 3 | 0.13 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD13 | 1:A:38:ILE:CG2 | 3 | 0.13 |
| (1,178) | 1:A:3:VAL:H | 1:A:3:VAL:HB | 2 | 0.13 |
| (1,17) | 1:A:25:HIS:HD2 | 1:A:24:LYS:HD2 | 4 | 0.13 |
| (1,169) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 7 | 0.13 |
| (1,161) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:67:ASN:HA | 18 | 0.13 |
| (1,159) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:ARG:HA | 7 | 0.13 |
| (1,145) | 1:A:7:TYR:H | 1:A:7:TYR:HB3 | 12 | 0.13 |
| (1,142) | 1:A:8:ARG:H | 1:A:8:ARG:HB2 | 12 | 0.13 |
| (1,132) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:23:VAL:HB | 2 | 0.13 |
| (1,1180) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:59:GLN:HA | 7 | 0.13 |
| (1,1180) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:59:GLN:HA | 20 | 0.13 |
| (1,1164) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:58:ILE:HG23 | 14 | 0.13 |
| (1,1164) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:58:ILE:HG22 | 14 | 0.13 |
| (1,1164) | 1:A:53:PRO:HB2 | 1:A:58:ILE:HG21 | 14 | 0.13 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:59:GLN:HB2 | 4 | 0.13 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:59:GLN:HB2 | 4 | 0.13 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:59:GLN:HB2 | 4 | 0.13 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:59:GLN:HB2 | 5 | 0.13 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:59:GLN:HB2 | 5 | 0.13 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:59:GLN:HB2 | 5 | 0.13 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:59:GLN:HB2 | 15 | 0.13 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:59:GLN:HB2 | 15 | 0.13 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:59:GLN:HB2 | 15 | 0.13 |
| (1,1158) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:58:ILE:HA | 7 | 0.13 |
| (1,1148) | 1:A:56:LYS:HE3 | 1:A:56:LYS:HA | 1 | 0.13 |
| (1,1101) | 1:A:48:GLN:HB3 | 1:A:39:VAL:HG23 | 14 | 0.13 |
| (1,1101) | 1:A:48:GLN:HB3 | 1:A:39:VAL:HG21 | 14 | 0.13 |
| (1,1101) | 1:A:48:GLN:HB3 | 1:A:39:VAL:HG22 | 14 | 0.13 |
| (1,1101) | 1:A:48:GLN:HB3 | 1:A:39:VAL:HG23 | 19 | 0.13 |
| (1,1101) | 1:A:48:GLN:HB3 | 1:A:39:VAL:HG21 | 19 | 0.13 |
| (1,1101) | 1:A:48:GLN:HB3 | 1:A:39:VAL:HG22 | 19 | 0.13 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ARG:HB3 | 4 | 0.13 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ARG:HB3 | 4 | 0.13 |
| (1,1096) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ARG:HB3 | 4 | 0.13 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD21 | 9 | 0.13 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD22 | 9 | 0.13 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD23 | 9 | 0.13 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD21 | 14 | 0.13 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD22 | 14 | 0.13 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD23 | 14 | 0.13 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD21 | 16 | 0.13 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD22 | 16 | 0.13 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD23 | 16 | 0.13 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD21 | 19 | 0.13 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD22 | 19 | 0.13 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD23 | 19 | 0.13 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB2 | 1:A:26:LEU:HD12 | 6 | 0.13 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB2 | 1:A:26:LEU:HD11 | 6 | 0.13 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB2 | 1:A:26:LEU:HD13 | 6 | 0.13 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB3 | 1:A:26:LEU:HD12 | 6 | 0.13 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB3 | 1:A:26:LEU:HD11 | 6 | 0.13 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB3 | 1:A:26:LEU:HD13 | 6 | 0.13 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB1 | 1:A:26:LEU:HD12 | 6 | 0.13 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB1 | 1:A:26:LEU:HD11 | 6 | 0.13 |
| (1,1058) | 1:A:40:ALA:HB1 | 1:A:26:LEU:HD13 | 6 | 0.13 |
| (1,1008) | 1:A:32:PRO:HG3 | 1:A:31:THR:HG23 | 2 | 0.13 |
| (1,1008) | 1:A:32:PRO:HG3 | 1:A:31:THR:HG21 | 2 | 0.13 |
| (1,1008) | 1:A:32:PRO:HG3 | 1:A:31:THR:HG22 | 2 | 0.13 |
| (1,1008) | 1:A:32:PRO:HG3 | 1:A:31:THR:HG23 | 11 | 0.13 |
| (1,1008) | 1:A:32:PRO:HG3 | 1:A:31:THR:HG21 | 11 | 0.13 |
| (1,1008) | 1:A:32:PRO:HG3 | 1:A:31:THR:HG22 | 11 | 0.13 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1008) | 1:A:32:PRO:HG3 | 1:A:31:THR:HG23 | 14 | 0.13 |
| (1,1008) | 1:A:32:PRO:HG3 | 1:A:31:THR:HG21 | 14 | 0.13 |
| (1,1008) | 1:A:32:PRO:HG3 | 1:A:31:THR:HG22 | 14 | 0.13 |
| (3,93) | 1:A:41:ARG:H | 1:A:24:LYS:HG3 | 6 | 0.12 |
| (3,93) | 1:A:41:ARG:H | 1:A:51:ILE:HG13 | 6 | 0.12 |
| (3,93) | 1:A:41:ARG:H | 1:A:24:LYS:HG3 | 8 | 0.12 |
| (3,93) | 1:A:41:ARG:H | 1:A:51:ILE:HG13 | 8 | 0.12 |
| (3,93) | 1:A:41:ARG:H | 1:A:24:LYS:HG3 | 13 | 0.12 |
| (3,93) | 1:A:41:ARG:H | 1:A:51:ILE:HG13 | 13 | 0.12 |
| (3,75) | 1:A:31:THR:H | 1:A:33:ASN:HD22 | 20 | 0.12 |
| (3,75) | 1:A:31:THR:H | 1:A:37:GLN:HE21 | 20 | 0.12 |
| (3,55) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:55:LEU:HB2 | 1 | 0.12 |
| (3,55) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:55:LEU:HD21 | 1 | 0.12 |
| (3,55) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:55:LEU:HD22 | 1 | 0.12 |
| (3,55) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:55:LEU:HD23 | 1 | 0.12 |
| (3,55) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:55:LEU:HB2 | 2 | 0.12 |
| (3,55) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:55:LEU:HD21 | 2 | 0.12 |
| (3,55) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:55:LEU:HD22 | 2 | 0.12 |
| (3,55) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:55:LEU:HD23 | 2 | 0.12 |
| (3,55) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:55:LEU:HB2 | 3 | 0.12 |
| (3,55) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:55:LEU:HD21 | 3 | 0.12 |
| (3,55) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:55:LEU:HD22 | 3 | 0.12 |
| (3,55) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:55:LEU:HD23 | 3 | 0.12 |
| (3,55) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:55:LEU:HB2 | 10 | 0.12 |
| (3,55) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:55:LEU:HD21 | 10 | 0.12 |
| (3,55) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:55:LEU:HD22 | 10 | 0.12 |
| (3,55) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:55:LEU:HD23 | 10 | 0.12 |
| (3,55) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:55:LEU:HB2 | 12 | 0.12 |
| (3,55) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:55:LEU:HD21 | 12 | 0.12 |
| (3,55) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:55:LEU:HD22 | 12 | 0.12 |
| (3,55) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:55:LEU:HD23 | 12 | 0.12 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HB2 | 1 | 0.12 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 1 | 0.12 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 1 | 0.12 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 1 | 0.12 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HB2 | 6 | 0.12 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 6 | 0.12 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 6 | 0.12 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 6 | 0.12 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HB2 | 7 | 0.12 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 7 | 0.12 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 7 | 0.12 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 7 | 0.12 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HB2 | 8 | 0.12 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 8 | 0.12 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 8 | 0.12 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 8 | 0.12 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HB2 | 17 | 0.12 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 17 | 0.12 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 17 | 0.12 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 17 | 0.12 |
| (3,48) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:20:ARG:HG3 | 3 | 0.12 |
| (3,48) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 3 | 0.12 |
| (3,48) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 3 | 0.12 |
| (3,48) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 3 | 0.12 |
| (3,44) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 2 | 0.12 |
| (3,44) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 2 | 0.12 |
| (3,44) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 6 | 0.12 |
| (3,44) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 6 | 0.12 |
| (3,44) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 13 | 0.12 |
| (3,44) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 13 | 0.12 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD11 | 6 | 0.12 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD13 | 6 | 0.12 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD12 | 6 | 0.12 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HG | 6 | 0.12 |
| (3,41) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:59:GLN:HB2 | 2 | 0.12 |
| (3,41) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:60:GLU:HB3 | 2 | 0.12 |
| (3,41) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:59:GLN:HB2 | 3 | 0.12 |
| (3,41) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:60:GLU:HB3 | 3 | 0.12 |
| (3,41) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:59:GLN:HB2 | 13 | 0.12 |
| (3,41) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:60:GLU:HB3 | 13 | 0.12 |
| (3,41) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:59:GLN:HB2 | 15 | 0.12 |
| (3,41) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:60:GLU:HB3 | 15 | 0.12 |
| (3,41) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:59:GLN:HB2 | 20 | 0.12 |
| (3,41) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:60:GLU:HB3 | 20 | 0.12 |
| (3,35) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:46:ASN:HB2 | 5 | 0.12 |
| (3,35) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:47:ARG:HD2 | 5 | 0.12 |
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HD11 | 3 | 0.12 |
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HD13 | 3 | 0.12 |
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HD12 | 3 | 0.12 |
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HG | 3 | 0.12 |
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HD11 | 13 | 0.12 |
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HD13 | 13 | 0.12 |
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HD12 | 13 | 0.12 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HG | 13 | 0.12 |
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HD11 | 18 | 0.12 |
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HD13 | 18 | 0.12 |
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HD12 | 18 | 0.12 |
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HG | 18 | 0.12 |
| (3,31) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:50:CYS:HB3 | 1 | 0.12 |
| (3,31) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:52:ASP:HA | 1 | 0.12 |
| (3,30) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:24:LYS:HB3 | 1 | 0.12 |
| (3,30) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:41:ARG:HB2 | 1 | 0.12 |
| (3,30) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:24:LYS:HB3 | 6 | 0.12 |
| (3,30) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:41:ARG:HB2 | 6 | 0.12 |
| (3,282) | 1:A:65:ALA:HA | 1:A:28:ILE:HG12 | 3 | 0.12 |
| (3,282) | 1:A:65:ALA:HA | 1:A:66:LEU:HB3 | 3 | 0.12 |
| (3,282) | 1:A:65:ALA:HA | 1:A:28:ILE:HG12 | 5 | 0.12 |
| (3,282) | 1:A:65:ALA:HA | 1:A:66:LEU:HB3 | 5 | 0.12 |
| (3,279) | 1:A:22:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD21 | 1 | 0.12 |
| (3,279) | 1:A:22:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD23 | 1 | 0.12 |
| (3,279) | 1:A:22:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD22 | 1 | 0.12 |
| (3,279) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:61:TYR:HD2 | 1 | 0.12 |
| (3,279) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:61:TYR:HD2 | 1 | 0.12 |
| (3,279) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:61:TYR:HD2 | 1 | 0.12 |
| (3,279) | 1:A:22:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD21 | 2 | 0.12 |
| (3,279) | 1:A:22:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD23 | 2 | 0.12 |
| (3,279) | 1:A:22:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD22 | 2 | 0.12 |
| (3,279) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:61:TYR:HD2 | 2 | 0.12 |
| (3,279) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:61:TYR:HD2 | 2 | 0.12 |
| (3,279) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:61:TYR:HD2 | 2 | 0.12 |
| (3,279) | 1:A:22:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD21 | 13 | 0.12 |
| (3,279) | 1:A:22:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD23 | 13 | 0.12 |
| (3,279) | 1:A:22:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD22 | 13 | 0.12 |
| (3,279) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:61:TYR:HD2 | 13 | 0.12 |
| (3,279) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:61:TYR:HD2 | 13 | 0.12 |
| (3,279) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:61:TYR:HD2 | 13 | 0.12 |
| (3,279) | 1:A:22:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD21 | 20 | 0.12 |
| (3,279) | 1:A:22:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD23 | 20 | 0.12 |
| (3,279) | 1:A:22:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD22 | 20 | 0.12 |
| (3,279) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:61:TYR:HD2 | 20 | 0.12 |
| (3,279) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:61:TYR:HD2 | 20 | 0.12 |
| (3,279) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:61:TYR:HD2 | 20 | 0.12 |
| (3,277) | 1:A:37:GLN:HG3 | 1:A:37:GLN:HB2 | 12 | 0.12 |
| (3,277) | 1:A:59:GLN:HB2 | 1:A:59:GLN:HG2 | 12 | 0.12 |
| (3,254) | 1:A:40:ALA:HB2 | 1:A:49:VAL:HB | 2 | 0.12 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,254) | 1:A:40:ALA:HB3 | 1:A:49:VAL:HB | 2 | 0.12 |
| (3,254) | 1:A:40:ALA:HB1 | 1:A:49:VAL:HB | 2 | 0.12 |
| (3,254) | 1:A:49:VAL:HB | 1:A:51:ILE:HG12 | 2 | 0.12 |
| (3,237) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:35:ALA:HA | 19 | 0.12 |
| (3,237) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:35:ALA:HA | 19 | 0.12 |
| (3,237) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:35:ALA:HA | 19 | 0.12 |
| (3,237) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD22 | 19 | 0.12 |
| (3,237) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD23 | 19 | 0.12 |
| (3,237) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD21 | 19 | 0.12 |
| (3,233) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:10:PRO:HD3 | 5 | 0.12 |
| (3,233) | 1:A:34:CYS:HB3 | 1:A:32:PRO:HD2 | 5 | 0.12 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG21 | 13 | 0.12 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG23 | 13 | 0.12 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:28:ILE:HG22 | 13 | 0.12 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD13 | 13 | 0.12 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD12 | 13 | 0.12 |
| (3,232) | 1:A:30:ASN:HB3 | 1:A:29:LEU:HD11 | 13 | 0.12 |
| (3,217) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HA | 6 | 0.12 |
| (3,217) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:24:LYS:HE2 | 6 | 0.12 |
| (3,217) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:43:LYS:HE2 | 6 | 0.12 |
| (3,183) | 1:A:32:PRO:HB2 | 1:A:32:PRO:HA | 4 | 0.12 |
| (3,183) | 1:A:10:PRO:HB2 | 1:A:10:PRO:HA | 4 | 0.12 |
| (3,183) | 1:A:32:PRO:HB2 | 1:A:32:PRO:HA | 15 | 0.12 |
| (3,183) | 1:A:10:PRO:HB2 | 1:A:10:PRO:HA | 15 | 0.12 |
| (3,156) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HG2 | 11 | 0.12 |
| (3,156) | 1:A:43:LYS:HE2 | 1:A:43:LYS:HG3 | 11 | 0.12 |
| (3,132) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:26:LEU:HG | 6 | 0.12 |
| (3,132) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HG3 | 6 | 0.12 |
| (3,132) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:26:LEU:HG | 11 | 0.12 |
| (3,132) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HG3 | 11 | 0.12 |
| (3,132) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:26:LEU:HG | 17 | 0.12 |
| (3,132) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HG3 | 17 | 0.12 |
| (3,122) | 1:A:47:ARG:HA | 1:A:41:ARG:HA | 4 | 0.12 |
| (3,122) | 1:A:47:ARG:HA | 1:A:48:GLN:HA | 4 | 0.12 |
| (3,122) | 1:A:47:ARG:HA | 1:A:41:ARG:HA | 14 | 0.12 |
| (3,122) | 1:A:47:ARG:HA | 1:A:48:GLN:HA | 14 | 0.12 |
| (3,107) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:57:TRP:HD1 | 5 | 0.12 |
| (3,107) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:61:TYR:H | 5 | 0.12 |
| (1,967) | 1:A:24:LYS:HG2 | 1:A:42:LEU:HA | 3 | 0.12 |
| (1,967) | 1:A:24:LYS:HG2 | 1:A:42:LEU:HA | 17 | 0.12 |
| (1,965) | 1:A:24:LYS:HB3 | 1:A:24:LYS:HG2 | 2 | 0.12 |
| (1,948) | 1:A:21:ALA:HA | 1:A:22:ASN:HA | 12 | 0.12 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,941) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:18:ILE:HD12 | 7 | 0.12 |
| (1,941) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:18:ILE:HD13 | 7 | 0.12 |
| (1,941) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:18:ILE:HD11 | 7 | 0.12 |
| (1,90) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HD12 | 12 | 0.12 |
| (1,90) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HD11 | 12 | 0.12 |
| (1,90) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HD13 | 12 | 0.12 |
| (1,90) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HD12 | 20 | 0.12 |
| (1,90) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HD11 | 20 | 0.12 |
| (1,90) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HD13 | 20 | 0.12 |
| (1,887) | 1:A:59:GLN:HA | 1:A:59:GLN:HB2 | 8 | 0.12 |
| (1,869) | 1:A:8:ARG:HB3 | 1:A:8:ARG:HD3 | 13 | 0.12 |
| (1,833) | 1:A:28:ILE:H | 1:A:27:LYS:HB3 | 1 | 0.12 |
| (1,833) | 1:A:28:ILE:H | 1:A:27:LYS:HB3 | 4 | 0.12 |
| (1,833) | 1:A:28:ILE:H | 1:A:27:LYS:HB3 | 13 | 0.12 |
| (1,833) | 1:A:28:ILE:H | 1:A:27:LYS:HB3 | 20 | 0.12 |
| (1,815) | 1:A:33:ASN:HD22 | 1:A:33:ASN:HB2 | 17 | 0.12 |
| (1,801) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:68:LYS:H | 17 | 0.12 |
| (1,789) | 1:A:45:ASN:HB3 | 1:A:45:ASN:HA | 2 | 0.12 |
| (1,789) | 1:A:45:ASN:HB3 | 1:A:45:ASN:HA | 4 | 0.12 |
| (1,789) | 1:A:45:ASN:HB3 | 1:A:45:ASN:HA | 11 | 0.12 |
| (1,789) | 1:A:45:ASN:HB3 | 1:A:45:ASN:HA | 19 | 0.12 |
| (1,789) | 1:A:45:ASN:HB3 | 1:A:45:ASN:HA | 20 | 0.12 |
| (1,778) | 1:A:19:ALA:H | 1:A:18:ILE:HB | 8 | 0.12 |
| (1,745) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:59:GLN:HA | 18 | 0.12 |
| (1,744) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:68:LYS:HD2 | 6 | 0.12 |
| (1,741) | 1:A:66:LEU:HA | 1:A:66:LEU:HB2 | 13 | 0.12 |
| (1,703) | 1:A:50:CYS:HB3 | 1:A:14:PHE:HA | 7 | 0.12 |
| (1,7) | 1:A:23:VAL:CG2 | 1:A:40:ALA:HB2 | 12 | 0.12 |
| (1,7) | 1:A:23:VAL:CG2 | 1:A:40:ALA:HB3 | 12 | 0.12 |
| (1,7) | 1:A:23:VAL:CG2 | 1:A:40:ALA:HB1 | 12 | 0.12 |
| (1,7) | 1:A:23:VAL:CG2 | 1:A:40:ALA:HB2 | 13 | 0.12 |
| (1,7) | 1:A:23:VAL:CG2 | 1:A:40:ALA:HB3 | 13 | 0.12 |
| (1,7) | 1:A:23:VAL:CG2 | 1:A:40:ALA:HB1 | 13 | 0.12 |
| (1,7) | 1:A:23:VAL:CG2 | 1:A:40:ALA:HB2 | 15 | 0.12 |
| (1,7) | 1:A:23:VAL:CG2 | 1:A:40:ALA:HB3 | 15 | 0.12 |
| (1,7) | 1:A:23:VAL:CG2 | 1:A:40:ALA:HB1 | 15 | 0.12 |
| (1,687) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG23 | 5 | 0.12 |
| (1,687) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG21 | 5 | 0.12 |
| (1,687) | 1:A:10:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG22 | 5 | 0.12 |
| (1,654) | 1:A:37:GLN:HA | 1:A:37:GLN:HG3 | 11 | 0.12 |
| (1,615) | 1:A:54:LYS:HA | 1:A:54:LYS:HG3 | 19 | 0.12 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG23 | 8 | 0.12 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG22 | 8 | 0.12 |
| (1,58) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:49:VAL:HG21 | 8 | 0.12 |
| (1,570) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:63:GLU:HG3 | 14 | 0.12 |
| (1,507) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:48:GLN:HB2 | 1 | 0.12 |
| (1,507) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:48:GLN:HB2 | 3 | 0.12 |
| (1,477) | 1:A:42:LEU:H | 1:A:48:GLN:H | 14 | 0.12 |
| (1,477) | 1:A:42:LEU:H | 1:A:48:GLN:H | 19 | 0.12 |
| (1,443) | 1:A:33:ASN:HD22 | 1:A:32:PRO:HB3 | 2 | 0.12 |
| (1,393) | 1:A:22:ASN:H | 1:A:22:ASN:HB3 | 10 | 0.12 |
| (1,391) | 1:A:22:ASN:H | 1:A:43:LYS:HD2 | 10 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD2 | 1:A:13:PHE:HE1 | 3 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD2 | 1:A:13:PHE:HE2 | 3 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD1 | 1:A:13:PHE:HE1 | 3 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD1 | 1:A:13:PHE:HE2 | 3 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD2 | 1:A:13:PHE:HE1 | 4 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD2 | 1:A:13:PHE:HE2 | 4 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD1 | 1:A:13:PHE:HE1 | 4 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD1 | 1:A:13:PHE:HE2 | 4 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD2 | 1:A:13:PHE:HE1 | 5 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD2 | 1:A:13:PHE:HE2 | 5 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD1 | 1:A:13:PHE:HE1 | 5 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD1 | 1:A:13:PHE:HE2 | 5 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD2 | 1:A:13:PHE:HE1 | 6 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD2 | 1:A:13:PHE:HE2 | 6 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD1 | 1:A:13:PHE:HE1 | 6 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD1 | 1:A:13:PHE:HE2 | 6 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD2 | 1:A:13:PHE:HE1 | 8 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD2 | 1:A:13:PHE:HE2 | 8 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD1 | 1:A:13:PHE:HE1 | 8 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD1 | 1:A:13:PHE:HE2 | 8 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD2 | 1:A:13:PHE:HE1 | 9 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD2 | 1:A:13:PHE:HE2 | 9 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD1 | 1:A:13:PHE:HE1 | 9 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD1 | 1:A:13:PHE:HE2 | 9 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD2 | 1:A:13:PHE:HE1 | 10 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD2 | 1:A:13:PHE:HE2 | 10 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD1 | 1:A:13:PHE:HE1 | 10 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD1 | 1:A:13:PHE:HE2 | 10 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD2 | 1:A:13:PHE:HE1 | 12 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD2 | 1:A:13:PHE:HE2 | 12 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD1 | 1:A:13:PHE:HE1 | 12 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD1 | 1:A:13:PHE:HE2 | 12 | 0.12 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD2 | 1:A:13:PHE:HE1 | 13 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD2 | 1:A:13:PHE:HE2 | 13 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD1 | 1:A:13:PHE:HE1 | 13 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD1 | 1:A:13:PHE:HE2 | 13 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD2 | 1:A:13:PHE:HE1 | 14 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD2 | 1:A:13:PHE:HE2 | 14 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD1 | 1:A:13:PHE:HE1 | 14 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD1 | 1:A:13:PHE:HE2 | 14 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD2 | 1:A:13:PHE:HE1 | 15 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD2 | 1:A:13:PHE:HE2 | 15 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD1 | 1:A:13:PHE:HE1 | 15 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD1 | 1:A:13:PHE:HE2 | 15 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD2 | 1:A:13:PHE:HE1 | 16 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD2 | 1:A:13:PHE:HE2 | 16 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD1 | 1:A:13:PHE:HE1 | 16 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD1 | 1:A:13:PHE:HE2 | 16 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD2 | 1:A:13:PHE:HE1 | 19 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD2 | 1:A:13:PHE:HE2 | 19 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD1 | 1:A:13:PHE:HE1 | 19 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD1 | 1:A:13:PHE:HE2 | 19 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD2 | 1:A:13:PHE:HE1 | 20 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD2 | 1:A:13:PHE:HE2 | 20 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD1 | 1:A:13:PHE:HE1 | 20 | 0.12 |
| (1,39) | 1:A:13:PHE:HD1 | 1:A:13:PHE:HE2 | 20 | 0.12 |
| (1,335) | 1:A:25:HIS:H | 1:A:41:ARG:H | 14 | 0.12 |
| (1,31) | 1:A:14:PHE:HE2 | 1:A:14:PHE:HA | 11 | 0.12 |
| (1,31) | 1:A:14:PHE:HE1 | 1:A:14:PHE:HA | 11 | 0.12 |
| (1,309) | 1:A:34:CYS:H | 1:A:34:CYS:HB3 | 9 | 0.12 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD12 | 5 | 0.12 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD13 | 5 | 0.12 |
| (1,3) | 1:A:49:VAL:CG1 | 1:A:18:ILE:HD11 | 5 | 0.12 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB2 | 5 | 0.12 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB3 | 5 | 0.12 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB1 | 5 | 0.12 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB2 | 8 | 0.12 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB3 | 8 | 0.12 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB1 | 8 | 0.12 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB2 | 11 | 0.12 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB3 | 11 | 0.12 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB1 | 11 | 0.12 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB2 | 17 | 0.12 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB3 | 17 | 0.12 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB1 | 17 | 0.12 |
| (1,298) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:64:LYS:HG3 | 11 | 0.12 |
| (1,298) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:64:LYS:HG3 | 12 | 0.12 |
| (1,290) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:63:GLU:HG2 | 10 | 0.12 |
| (1,286) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:67:ASN:HB2 | 9 | 0.12 |
| (1,282) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:64:LYS:H | 19 | 0.12 |
| (1,259) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:60:GLU:HA | 19 | 0.12 |
| (1,254) | 1:A:16:SER:H | 1:A:15:GLU:HB2 | 4 | 0.12 |
| (1,249) | 1:A:31:THR:H | 1:A:31:THR:HB | 9 | 0.12 |
| (1,249) | 1:A:31:THR:H | 1:A:31:THR:HB | 11 | 0.12 |
| (1,249) | 1:A:31:THR:H | 1:A:31:THR:HB | 15 | 0.12 |
| (1,248) | 1:A:31:THR:H | 1:A:36:LEU:HA | 14 | 0.12 |
| (1,244) | 1:A:18:ILE:H | 1:A:18:ILE:HG12 | 8 | 0.12 |
| (1,214) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:47:ARG:H | 2 | 0.12 |
| (1,214) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:47:ARG:H | 6 | 0.12 |
| (1,214) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:47:ARG:H | 10 | 0.12 |
| (1,214) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:47:ARG:H | 17 | 0.12 |
| (1,214) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:47:ARG:H | 19 | 0.12 |
| (1,207) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:55:LEU:H | 7 | 0.12 |
| (1,207) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:55:LEU:H | 13 | 0.12 |
| (1,207) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:55:LEU:H | 16 | 0.12 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD12 | 1:A:38:ILE:CG2 | 4 | 0.12 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD11 | 1:A:38:ILE:CG2 | 4 | 0.12 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD13 | 1:A:38:ILE:CG2 | 4 | 0.12 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD12 | 1:A:38:ILE:CG2 | 8 | 0.12 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD11 | 1:A:38:ILE:CG2 | 8 | 0.12 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD13 | 1:A:38:ILE:CG2 | 8 | 0.12 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD12 | 1:A:38:ILE:CG2 | 11 | 0.12 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD11 | 1:A:38:ILE:CG2 | 11 | 0.12 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD13 | 1:A:38:ILE:CG2 | 11 | 0.12 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD12 | 1:A:38:ILE:CG2 | 12 | 0.12 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD11 | 1:A:38:ILE:CG2 | 12 | 0.12 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD13 | 1:A:38:ILE:CG2 | 12 | 0.12 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD12 | 1:A:38:ILE:CG2 | 20 | 0.12 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD11 | 1:A:38:ILE:CG2 | 20 | 0.12 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD13 | 1:A:38:ILE:CG2 | 20 | 0.12 |
| (1,17) | 1:A:25:HIS:HD2 | 1:A:24:LYS:HD2 | 8 | 0.12 |
| (1,169) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 2 | 0.12 |
| (1,169) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 4 | 0.12 |
| (1,169) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 9 | 0.12 |
| (1,169) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 16 | 0.12 |
| (1,164) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:9:CYS:HB3 | 3 | 0.12 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,163) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:67:ASN:HB3 | 20 | 0.12 |
| (1,161) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:67:ASN:HA | 7 | 0.12 |
| (1,161) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:67:ASN:HA | 19 | 0.12 |
| (1,16) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:26:LEU:HB2 | 18 | 0.12 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HB2 | 1 | 0.12 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HB2 | 1 | 0.12 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HB2 | 1 | 0.12 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HB2 | 10 | 0.12 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HB2 | 10 | 0.12 |
| (1,1203) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HB2 | 10 | 0.12 |
| (1,120) | 1:A:37:GLN:H | 1:A:37:GLN:HG3 | 4 | 0.12 |
| (1,1188) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 15 | 0.12 |
| (1,1180) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:59:GLN:HA | 1 | 0.12 |
| (1,1180) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:59:GLN:HA | 3 | 0.12 |
| (1,1180) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:59:GLN:HA | 10 | 0.12 |
| (1,1180) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:59:GLN:HA | 13 | 0.12 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:59:GLN:HB2 | 2 | 0.12 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:59:GLN:HB2 | 2 | 0.12 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:59:GLN:HB2 | 2 | 0.12 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:59:GLN:HB2 | 7 | 0.12 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:59:GLN:HB2 | 7 | 0.12 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:59:GLN:HB2 | 7 | 0.12 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:59:GLN:HB2 | 8 | 0.12 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:59:GLN:HB2 | 8 | 0.12 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:59:GLN:HB2 | 8 | 0.12 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:59:GLN:HB2 | 9 | 0.12 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:59:GLN:HB2 | 9 | 0.12 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:59:GLN:HB2 | 9 | 0.12 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:59:GLN:HB2 | 13 | 0.12 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:59:GLN:HB2 | 13 | 0.12 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:59:GLN:HB2 | 13 | 0.12 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG23 | 1:A:59:GLN:HB2 | 19 | 0.12 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG22 | 1:A:59:GLN:HB2 | 19 | 0.12 |
| (1,1162) | 1:A:58:ILE:HG21 | 1:A:59:GLN:HB2 | 19 | 0.12 |
| (1,1158) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:58:ILE:HA | 15 | 0.12 |
| (1,1154) | 1:A:58:ILE:HA | 1:A:57:TRP:HZ3 | 18 | 0.12 |
| (1,1146) | 1:A:59:GLN:HG2 | 1:A:56:LYS:HA | 17 | 0.12 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD21 | 3 | 0.12 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD22 | 3 | 0.12 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD23 | 3 | 0.12 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD21 | 20 | 0.12 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD22 | 20 | 0.12 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD23 | 20 | 0.12 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB2 | 6 | 0.12 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB3 | 6 | 0.12 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB1 | 6 | 0.12 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB2 | 9 | 0.12 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB3 | 9 | 0.12 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB1 | 9 | 0.12 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB2 | 13 | 0.12 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB3 | 13 | 0.12 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB1 | 13 | 0.12 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB2 | 18 | 0.12 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB3 | 18 | 0.12 |
| (1,1055) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:40:ALA:HB1 | 18 | 0.12 |
| (1,1054) | 1:A:26:LEU:HA | 1:A:40:ALA:HB2 | 15 | 0.12 |
| (1,1054) | 1:A:26:LEU:HA | 1:A:40:ALA:HB3 | 15 | 0.12 |
| (1,1054) | 1:A:26:LEU:HA | 1:A:40:ALA:HB1 | 15 | 0.12 |
| (1,1022) | 1:A:38:ILE:HG21 | 1:A:28:ILE:HG12 | 18 | 0.12 |
| (1,1022) | 1:A:38:ILE:HG23 | 1:A:28:ILE:HG12 | 18 | 0.12 |
| (1,1022) | 1:A:38:ILE:HG22 | 1:A:28:ILE:HG12 | 18 | 0.12 |
| (3,98) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:46:ASN:HB2 | 4 | 0.11 |
| (3,98) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:47:ARG:HD2 | 4 | 0.11 |
| (3,93) | 1:A:41:ARG:H | 1:A:24:LYS:HG3 | 5 | 0.11 |
| (3,93) | 1:A:41:ARG:H | 1:A:51:ILE:HG13 | 5 | 0.11 |
| (3,78) | 1:A:34:CYS:H | 1:A:36:LEU:HD13 | 1 | 0.11 |
| (3,78) | 1:A:34:CYS:H | 1:A:36:LEU:HD12 | 1 | 0.11 |
| (3,78) | 1:A:34:CYS:H | 1:A:36:LEU:HD11 | 1 | 0.11 |
| (3,78) | 1:A:34:CYS:H | 1:A:36:LEU:HD22 | 1 | 0.11 |
| (3,78) | 1:A:34:CYS:H | 1:A:36:LEU:HD23 | 1 | 0.11 |
| (3,78) | 1:A:34:CYS:H | 1:A:36:LEU:HD21 | 1 | 0.11 |
| (3,78) | 1:A:34:CYS:H | 1:A:36:LEU:HD13 | 12 | 0.11 |
| (3,78) | 1:A:34:CYS:H | 1:A:36:LEU:HD12 | 12 | 0.11 |
| (3,78) | 1:A:34:CYS:H | 1:A:36:LEU:HD11 | 12 | 0.11 |
| (3,78) | 1:A:34:CYS:H | 1:A:36:LEU:HD22 | 12 | 0.11 |
| (3,78) | 1:A:34:CYS:H | 1:A:36:LEU:HD23 | 12 | 0.11 |
| (3,78) | 1:A:34:CYS:H | 1:A:36:LEU:HD21 | 12 | 0.11 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG23 | 8 | 0.11 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG22 | 8 | 0.11 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:18:ILE:HG21 | 8 | 0.11 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG11 | 8 | 0.11 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG13 | 8 | 0.11 |
| (3,60) | 1:A:16:SER:H | 1:A:49:VAL:HG12 | 8 | 0.11 |
| (3,55) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:55:LEU:HB2 | 20 | 0.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,55) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:55:LEU:HD21 | 20 | 0.11 |
| (3,55) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:55:LEU:HD22 | 20 | 0.11 |
| (3,55) | 1:A:57:TRP:H | 1:A:55:LEU:HD23 | 20 | 0.11 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HB2 | 16 | 0.11 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD12 | 16 | 0.11 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD11 | 16 | 0.11 |
| (3,54) | 1:A:54:LYS:H | 1:A:55:LEU:HD13 | 16 | 0.11 |
| (3,48) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:20:ARG:HG3 | 6 | 0.11 |
| (3,48) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 6 | 0.11 |
| (3,48) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 6 | 0.11 |
| (3,48) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 6 | 0.11 |
| (3,44) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:62:LEU:HB3 | 19 | 0.11 |
| (3,44) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:64:LYS:HB3 | 19 | 0.11 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD11 | 17 | 0.11 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD13 | 17 | 0.11 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HD12 | 17 | 0.11 |
| (3,42) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:62:LEU:HG | 17 | 0.11 |
| (3,41) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:59:GLN:HB2 | 16 | 0.11 |
| (3,41) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:60:GLU:HB3 | 16 | 0.11 |
| (3,41) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:59:GLN:HB2 | 19 | 0.11 |
| (3,41) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:60:GLU:HB3 | 19 | 0.11 |
| (3,39) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:59:GLN:HA | 8 | 0.11 |
| (3,39) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:62:LEU:HA | 8 | 0.11 |
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HD11 | 6 | 0.11 |
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HD13 | 6 | 0.11 |
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HD12 | 6 | 0.11 |
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HG | 6 | 0.11 |
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HD11 | 7 | 0.11 |
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HD13 | 7 | 0.11 |
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HD12 | 7 | 0.11 |
| (3,34) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:LEU:HG | 7 | 0.11 |
| (3,30) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:24:LYS:HB3 | 12 | 0.11 |
| (3,30) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:41:ARG:HB2 | 12 | 0.11 |
| (3,279) | 1:A:22:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD21 | 10 | 0.11 |
| (3,279) | 1:A:22:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD23 | 10 | 0.11 |
| (3,279) | 1:A:22:ASN:HD22 | 1:A:42:LEU:HD22 | 10 | 0.11 |
| (3,279) | 1:A:66:LEU:HD11 | 1:A:61:TYR:HD2 | 10 | 0.11 |
| (3,279) | 1:A:66:LEU:HD12 | 1:A:61:TYR:HD2 | 10 | 0.11 |
| (3,279) | 1:A:66:LEU:HD13 | 1:A:61:TYR:HD2 | 10 | 0.11 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:18:ILE:HG23 | 6 | 0.11 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:18:ILE:HG22 | 6 | 0.11 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:18:ILE:HG21 | 6 | 0.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:39:VAL:HG23 | 6 | 0.11 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:39:VAL:HG21 | 6 | 0.11 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:39:VAL:HG22 | 6 | 0.11 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:49:VAL:HG11 | 6 | 0.11 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:49:VAL:HG13 | 6 | 0.11 |
| (3,27) | 1:A:51:ILE:H | 1:A:49:VAL:HG12 | 6 | 0.11 |
| (3,268) | 1:A:58:ILE:HA | 1:A:55:LEU:H | 9 | 0.11 |
| (3,268) | 1:A:58:ILE:HA | 1:A:61:TYR:HD2 | 9 | 0.11 |
| (3,239) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:38:ILE:HG21 | 19 | 0.11 |
| (3,239) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:38:ILE:HG23 | 19 | 0.11 |
| (3,239) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:38:ILE:HG22 | 19 | 0.11 |
| (3,239) | 1:A:38:ILE:HG21 | 1:A:40:ALA:H | 19 | 0.11 |
| (3,239) | 1:A:38:ILE:HG23 | 1:A:40:ALA:H | 19 | 0.11 |
| (3,239) | 1:A:38:ILE:HG22 | 1:A:40:ALA:H | 19 | 0.11 |
| (3,237) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:35:ALA:HA | 13 | 0.11 |
| (3,237) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:35:ALA:HA | 13 | 0.11 |
| (3,237) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:35:ALA:HA | 13 | 0.11 |
| (3,237) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD22 | 13 | 0.11 |
| (3,237) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD23 | 13 | 0.11 |
| (3,237) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD21 | 13 | 0.11 |
| (3,237) | 1:A:36:LEU:HD22 | 1:A:35:ALA:HA | 16 | 0.11 |
| (3,237) | 1:A:36:LEU:HD23 | 1:A:35:ALA:HA | 16 | 0.11 |
| (3,237) | 1:A:36:LEU:HD21 | 1:A:35:ALA:HA | 16 | 0.11 |
| (3,237) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD22 | 16 | 0.11 |
| (3,237) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD23 | 16 | 0.11 |
| (3,237) | 1:A:36:LEU:HA | 1:A:36:LEU:HD21 | 16 | 0.11 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD13 | 9 | 0.11 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD12 | 9 | 0.11 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:36:LEU:HD11 | 9 | 0.11 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD13 | 9 | 0.11 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD12 | 9 | 0.11 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:36:LEU:HD11 | 9 | 0.11 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD13 | 9 | 0.11 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD12 | 9 | 0.11 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:36:LEU:HD11 | 9 | 0.11 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:62:LEU:HD11 | 9 | 0.11 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:62:LEU:HD13 | 9 | 0.11 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:62:LEU:HD12 | 9 | 0.11 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:62:LEU:HD11 | 9 | 0.11 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:62:LEU:HD13 | 9 | 0.11 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:62:LEU:HD12 | 9 | 0.11 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:62:LEU:HD11 | 9 | 0.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:62:LEU:HD13 | 9 | 0.11 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:62:LEU:HD12 | 9 | 0.11 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:66:LEU:HD11 | 9 | 0.11 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:66:LEU:HD12 | 9 | 0.11 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB2 | 1:A:66:LEU:HD13 | 9 | 0.11 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:66:LEU:HD11 | 9 | 0.11 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:66:LEU:HD12 | 9 | 0.11 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB3 | 1:A:66:LEU:HD13 | 9 | 0.11 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:66:LEU:HD11 | 9 | 0.11 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:66:LEU:HD12 | 9 | 0.11 |
| (3,235) | 1:A:35:ALA:HB1 | 1:A:66:LEU:HD13 | 9 | 0.11 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HD1 | 17 | 0.11 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HD1 | 17 | 0.11 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HD1 | 17 | 0.11 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HE1 | 17 | 0.11 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HE1 | 17 | 0.11 |
| (3,230) | 1:A:28:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HE1 | 17 | 0.11 |
| (3,217) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HA | 12 | 0.11 |
| (3,217) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:24:LYS:HE2 | 12 | 0.11 |
| (3,217) | 1:A:44:ASN:HA | 1:A:43:LYS:HE2 | 12 | 0.11 |
| (3,183) | 1:A:32:PRO:HB2 | 1:A:32:PRO:HA | 20 | 0.11 |
| (3,183) | 1:A:10:PRO:HB2 | 1:A:10:PRO:HA | 20 | 0.11 |
| (3,18) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:20:ARG:HG3 | 3 | 0.11 |
| (3,18) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 3 | 0.11 |
| (3,18) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 3 | 0.11 |
| (3,18) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 3 | 0.11 |
| (3,18) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:20:ARG:HG3 | 6 | 0.11 |
| (3,18) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 6 | 0.11 |
| (3,18) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 6 | 0.11 |
| (3,18) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 6 | 0.11 |
| (3,18) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:20:ARG:HG3 | 10 | 0.11 |
| (3,18) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 10 | 0.11 |
| (3,18) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 10 | 0.11 |
| (3,18) | 1:A:20:ARG:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 10 | 0.11 |
| (3,171) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:48:GLN:HG2 | 14 | 0.11 |
| (3,171) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:48:GLN:HG3 | 14 | 0.11 |
| (3,132) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:26:LEU:HG | 18 | 0.11 |
| (3,132) | 1:A:27:LYS:HA | 1:A:27:LYS:HG3 | 18 | 0.11 |
| (3,122) | 1:A:47:ARG:HA | 1:A:41:ARG:HA | 10 | 0.11 |
| (3,122) | 1:A:47:ARG:HA | 1:A:48:GLN:HA | 10 | 0.11 |
| (3,122) | 1:A:47:ARG:HA | 1:A:41:ARG:HA | 13 | 0.11 |
| (3,122) | 1:A:47:ARG:HA | 1:A:48:GLN:HA | 13 | 0.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (3,122) | 1:A:47:ARG:HA | 1:A:41:ARG:HA | 18 | 0.11 |
| (3,122) | 1:A:47:ARG:HA | 1:A:48:GLN:HA | 18 | 0.11 |
| (3,108) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:56:LYS:HD2 | 13 | 0.11 |
| (3,108) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:55:LEU:HG | 13 | 0.11 |
| (3,107) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:57:TRP:HD1 | 6 | 0.11 |
| (3,107) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:61:TYR:H | 6 | 0.11 |
| (3,107) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:57:TRP:HD1 | 11 | 0.11 |
| (3,107) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:61:TYR:H | 11 | 0.11 |
| (1,967) | 1:A:24:LYS:HG2 | 1:A:42:LEU:HA | 4 | 0.11 |
| (1,967) | 1:A:24:LYS:HG2 | 1:A:42:LEU:HA | 15 | 0.11 |
| (1,965) | 1:A:24:LYS:HB3 | 1:A:24:LYS:HG2 | 19 | 0.11 |
| (1,963) | 1:A:24:LYS:HA | 1:A:23:VAL:HG13 | 6 | 0.11 |
| (1,963) | 1:A:24:LYS:HA | 1:A:23:VAL:HG11 | 6 | 0.11 |
| (1,963) | 1:A:24:LYS:HA | 1:A:23:VAL:HG12 | 6 | 0.11 |
| (1,963) | 1:A:24:LYS:HA | 1:A:23:VAL:HG13 | 9 | 0.11 |
| (1,963) | 1:A:24:LYS:HA | 1:A:23:VAL:HG11 | 9 | 0.11 |
| (1,963) | 1:A:24:LYS:HA | 1:A:23:VAL:HG12 | 9 | 0.11 |
| (1,963) | 1:A:24:LYS:HA | 1:A:23:VAL:HG13 | 20 | 0.11 |
| (1,963) | 1:A:24:LYS:HA | 1:A:23:VAL:HG11 | 20 | 0.11 |
| (1,963) | 1:A:24:LYS:HA | 1:A:23:VAL:HG12 | 20 | 0.11 |
| (1,957) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:23:VAL:HG23 | 19 | 0.11 |
| (1,957) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:23:VAL:HG22 | 19 | 0.11 |
| (1,957) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:23:VAL:HG21 | 19 | 0.11 |
| (1,924) | 1:A:16:SER:HB3 | 1:A:55:LEU:HD21 | 3 | 0.11 |
| (1,924) | 1:A:16:SER:HB3 | 1:A:55:LEU:HD22 | 3 | 0.11 |
| (1,924) | 1:A:16:SER:HB3 | 1:A:55:LEU:HD23 | 3 | 0.11 |
| (1,923) | 1:A:15:GLU:HB3 | 1:A:49:VAL:HG11 | 19 | 0.11 |
| (1,923) | 1:A:15:GLU:HB3 | 1:A:49:VAL:HG13 | 19 | 0.11 |
| (1,923) | 1:A:15:GLU:HB3 | 1:A:49:VAL:HG12 | 19 | 0.11 |
| (1,90) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HD12 | 9 | 0.11 |
| (1,90) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HD11 | 9 | 0.11 |
| (1,90) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HD13 | 9 | 0.11 |
| (1,90) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HD12 | 11 | 0.11 |
| (1,90) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HD11 | 11 | 0.11 |
| (1,90) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HD13 | 11 | 0.11 |
| (1,90) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HD12 | 17 | 0.11 |
| (1,90) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HD11 | 17 | 0.11 |
| (1,90) | 1:A:27:LYS:H | 1:A:26:LEU:HD13 | 17 | 0.11 |
| (1,887) | 1:A:59:GLN:HA | 1:A:59:GLN:HB2 | 1 | 0.11 |
| (1,887) | 1:A:59:GLN:HA | 1:A:59:GLN:HB2 | 2 | 0.11 |
| (1,887) | 1:A:59:GLN:HA | 1:A:59:GLN:HB2 | 7 | 0.11 |
| (1,887) | 1:A:59:GLN:HA | 1:A:59:GLN:HB2 | 9 | 0.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,887) | 1:A:59:GLN:HA | 1:A:59:GLN:HB2 | 10 | 0.11 |
| (1,887) | 1:A:59:GLN:HA | 1:A:59:GLN:HB2 | 15 | 0.11 |
| (1,887) | 1:A:59:GLN:HA | 1:A:59:GLN:HB2 | 16 | 0.11 |
| (1,887) | 1:A:59:GLN:HA | 1:A:59:GLN:HB2 | 17 | 0.11 |
| (1,887) | 1:A:59:GLN:HA | 1:A:59:GLN:HB2 | 19 | 0.11 |
| (1,887) | 1:A:59:GLN:HA | 1:A:59:GLN:HB2 | 20 | 0.11 |
| (1,875) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:60:GLU:HB3 | 18 | 0.11 |
| (1,872) | 1:A:41:ARG:H | 1:A:25:HIS:HB2 | 7 | 0.11 |
| (1,864) | 1:A:48:GLN:H | 1:A:47:ARG:HB3 | 20 | 0.11 |
| (1,86) | 1:A:42:LEU:H | 1:A:42:LEU:HG | 7 | 0.11 |
| (1,854) | 1:A:53:PRO:HD3 | 1:A:53:PRO:HB2 | 20 | 0.11 |
| (1,833) | 1:A:28:ILE:H | 1:A:27:LYS:HB3 | 17 | 0.11 |
| (1,833) | 1:A:28:ILE:H | 1:A:27:LYS:HB3 | 18 | 0.11 |
| (1,833) | 1:A:28:ILE:H | 1:A:27:LYS:HB3 | 19 | 0.11 |
| (1,815) | 1:A:33:ASN:HD22 | 1:A:33:ASN:HB2 | 1 | 0.11 |
| (1,812) | 1:A:67:ASN:HB3 | 1:A:67:ASN:HB2 | 13 | 0.11 |
| (1,789) | 1:A:45:ASN:HB3 | 1:A:45:ASN:HA | 6 | 0.11 |
| (1,789) | 1:A:45:ASN:HB3 | 1:A:45:ASN:HA | 9 | 0.11 |
| (1,789) | 1:A:45:ASN:HB3 | 1:A:45:ASN:HA | 16 | 0.11 |
| (1,789) | 1:A:45:ASN:HB3 | 1:A:45:ASN:HA | 17 | 0.11 |
| (1,753) | 1:A:54:LYS:HE3 | 1:A:54:LYS:HD2 | 4 | 0.11 |
| (1,753) | 1:A:54:LYS:HE3 | 1:A:54:LYS:HD2 | 8 | 0.11 |
| (1,75) | 1:A:5:LEU:H | 1:A:4:SER:HB3 | 13 | 0.11 |
| (1,745) | 1:A:62:LEU:HB3 | 1:A:59:GLN:HA | 5 | 0.11 |
| (1,741) | 1:A:66:LEU:HA | 1:A:66:LEU:HB2 | 10 | 0.11 |
| (1,720) | 1:A:47:ARG:HD2 | 1:A:42:LEU:HD12 | 5 | 0.11 |
| (1,720) | 1:A:47:ARG:HD2 | 1:A:42:LEU:HD11 | 5 | 0.11 |
| (1,720) | 1:A:47:ARG:HD2 | 1:A:42:LEU:HD13 | 5 | 0.11 |
| (1,719) | 1:A:47:ARG:HD2 | 1:A:47:ARG:HB3 | 12 | 0.11 |
| (1,7) | 1:A:23:VAL:CG2 | 1:A:40:ALA:HB2 | 1 | 0.11 |
| (1,7) | 1:A:23:VAL:CG2 | 1:A:40:ALA:HB3 | 1 | 0.11 |
| (1,7) | 1:A:23:VAL:CG2 | 1:A:40:ALA:HB1 | 1 | 0.11 |
| (1,7) | 1:A:23:VAL:CG2 | 1:A:40:ALA:HB2 | 5 | 0.11 |
| (1,7) | 1:A:23:VAL:CG2 | 1:A:40:ALA:HB3 | 5 | 0.11 |
| (1,7) | 1:A:23:VAL:CG2 | 1:A:40:ALA:HB1 | 5 | 0.11 |
| (1,7) | 1:A:23:VAL:CG2 | 1:A:40:ALA:HB2 | 9 | 0.11 |
| (1,7) | 1:A:23:VAL:CG2 | 1:A:40:ALA:HB3 | 9 | 0.11 |
| (1,7) | 1:A:23:VAL:CG2 | 1:A:40:ALA:HB1 | 9 | 0.11 |
| (1,7) | 1:A:23:VAL:CG2 | 1:A:40:ALA:HB2 | 14 | 0.11 |
| (1,7) | 1:A:23:VAL:CG2 | 1:A:40:ALA:HB3 | 14 | 0.11 |
| (1,7) | 1:A:23:VAL:CG2 | 1:A:40:ALA:HB1 | 14 | 0.11 |
| (1,7) | 1:A:23:VAL:CG2 | 1:A:40:ALA:HB2 | 19 | 0.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,7) | 1:A:23:VAL:CG2 | 1:A:40:ALA:HB3 | 19 | 0.11 |
| (1,7) | 1:A:23:VAL:CG2 | 1:A:40:ALA:HB1 | 19 | 0.11 |
| (1,69) | 1:A:35:ALA:H | 1:A:34:CYS:HB2 | 20 | 0.11 |
| (1,688) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG23 | 3 | 0.11 |
| (1,688) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG21 | 3 | 0.11 |
| (1,688) | 1:A:32:PRO:HD3 | 1:A:31:THR:HG22 | 3 | 0.11 |
| (1,675) | 1:A:22:ASN:HA | 1:A:43:LYS:HD2 | 16 | 0.11 |
| (1,641) | 1:A:5:LEU:HA | 1:A:5:LEU:HD22 | 18 | 0.11 |
| (1,641) | 1:A:5:LEU:HA | 1:A:5:LEU:HD23 | 18 | 0.11 |
| (1,641) | 1:A:5:LEU:HA | 1:A:5:LEU:HD21 | 18 | 0.11 |
| (1,62) | 1:A:56:LYS:H | 1:A:56:LYS:HD2 | 8 | 0.11 |
| (1,570) | 1:A:63:GLU:HA | 1:A:63:GLU:HG3 | 16 | 0.11 |
| (1,567) | 1:A:60:GLU:HA | 1:A:60:GLU:HG3 | 4 | 0.11 |
| (1,53) | 1:A:52:ASP:H | 1:A:16:SER:HA | 6 | 0.11 |
| (1,519) | 1:A:52:ASP:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 15 | 0.11 |
| (1,507) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:48:GLN:HB2 | 6 | 0.11 |
| (1,507) | 1:A:49:VAL:H | 1:A:48:GLN:HB2 | 19 | 0.11 |
| (1,504) | 1:A:48:GLN:HE21 | 1:A:48:GLN:HB3 | 2 | 0.11 |
| (1,465) | 1:A:37:GLN:HE21 | 1:A:29:LEU:HB2 | 10 | 0.11 |
| (1,433) | 1:A:31:THR:H | 1:A:34:CYS:HB2 | 15 | 0.11 |
| (1,393) | 1:A:22:ASN:H | 1:A:22:ASN:HB3 | 1 | 0.11 |
| (1,382) | 1:A:18:ILE:H | 1:A:15:GLU:HA | 9 | 0.11 |
| (1,377) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:18:ILE:H | 10 | 0.11 |
| (1,377) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:18:ILE:H | 14 | 0.11 |
| (1,358) | 1:A:11:CYS:H | 1:A:9:CYS:HB2 | 7 | 0.11 |
| (1,352) | 1:A:11:CYS:H | 1:A:37:GLN:HE21 | 12 | 0.11 |
| (1,35) | 1:A:25:HIS:HD2 | 1:A:24:LYS:HG3 | 17 | 0.11 |
| (1,34) | 1:A:25:HIS:HE1 | 1:A:41:ARG:HG3 | 5 | 0.11 |
| (1,34) | 1:A:25:HIS:HE1 | 1:A:41:ARG:HG3 | 17 | 0.11 |
| (1,326) | 1:A:6:SER:H | 1:A:5:LEU:HB2 | 5 | 0.11 |
| (1,302) | 1:A:21:ALA:H | 1:A:19:ALA:HA | 15 | 0.11 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB2 | 1 | 0.11 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB3 | 1 | 0.11 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB1 | 1 | 0.11 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB2 | 6 | 0.11 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB3 | 6 | 0.11 |
| (1,299) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:65:ALA:HB1 | 6 | 0.11 |
| (1,298) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:64:LYS:HG3 | 5 | 0.11 |
| (1,298) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:64:LYS:HG3 | 14 | 0.11 |
| (1,295) | 1:A:64:LYS:H | 1:A:62:LEU:HA | 17 | 0.11 |
| (1,282) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:64:LYS:H | 11 | 0.11 |
| (1,282) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:64:LYS:H | 12 | 0.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,282) | 1:A:66:LEU:H | 1:A:64:LYS:H | 15 | 0.11 |
| (1,259) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:60:GLU:HA | 9 | 0.11 |
| (1,259) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:60:GLU:HA | 12 | 0.11 |
| (1,255) | 1:A:16:SER:H | 1:A:15:GLU:HB3 | 5 | 0.11 |
| (1,249) | 1:A:31:THR:H | 1:A:31:THR:HB | 4 | 0.11 |
| (1,249) | 1:A:31:THR:H | 1:A:31:THR:HB | 10 | 0.11 |
| (1,249) | 1:A:31:THR:H | 1:A:31:THR:HB | 13 | 0.11 |
| (1,248) | 1:A:31:THR:H | 1:A:36:LEU:HA | 18 | 0.11 |
| (1,244) | 1:A:18:ILE:H | 1:A:18:ILE:HG12 | 9 | 0.11 |
| (1,217) | 1:A:47:ARG:H | 1:A:45:ASN:HB2 | 16 | 0.11 |
| (1,207) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:55:LEU:H | 6 | 0.11 |
| (1,207) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:55:LEU:H | 8 | 0.11 |
| (1,207) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:55:LEU:H | 11 | 0.11 |
| (1,207) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:55:LEU:H | 12 | 0.11 |
| (1,207) | 1:A:58:ILE:H | 1:A:55:LEU:H | 19 | 0.11 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD12 | 1:A:38:ILE:CG2 | 17 | 0.11 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD11 | 1:A:38:ILE:CG2 | 17 | 0.11 |
| (1,2) | 1:A:26:LEU:HD13 | 1:A:38:ILE:CG2 | 17 | 0.11 |
| (1,179) | 1:A:3:VAL:H | 1:A:2:PRO:HB2 | 14 | 0.11 |
| (1,159) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:ARG:HA | 11 | 0.11 |
| (1,158) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HD22 | 1 | 0.11 |
| (1,158) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HD23 | 1 | 0.11 |
| (1,158) | 1:A:36:LEU:H | 1:A:36:LEU:HD21 | 1 | 0.11 |
| (1,141) | 1:A:8:ARG:H | 1:A:7:TYR:HB3 | 1 | 0.11 |
| (1,1208) | 1:A:69:GLY:HA2 | 1:A:68:LYS:HB3 | 4 | 0.11 |
| (1,1206) | 1:A:67:ASN:HB2 | 1:A:67:ASN:HD22 | 6 | 0.11 |
| (1,1204) | 1:A:65:ALA:HB2 | 1:A:28:ILE:HG12 | 10 | 0.11 |
| (1,1204) | 1:A:65:ALA:HB3 | 1:A:28:ILE:HG12 | 10 | 0.11 |
| (1,1204) | 1:A:65:ALA:HB1 | 1:A:28:ILE:HG12 | 10 | 0.11 |
| (1,1188) | 1:A:60:GLU:H | 1:A:61:TYR:HB2 | 1 | 0.11 |
| (1,1180) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:59:GLN:HA | 2 | 0.11 |
| (1,1180) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:59:GLN:HA | 6 | 0.11 |
| (1,1180) | 1:A:63:GLU:H | 1:A:59:GLN:HA | 9 | 0.11 |
| (1,1158) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:58:ILE:HA | 8 | 0.11 |
| (1,1158) | 1:A:61:TYR:HB2 | 1:A:58:ILE:HA | 12 | 0.11 |
| (1,1154) | 1:A:58:ILE:HA | 1:A:57:TRP:HZ3 | 8 | 0.11 |
| (1,1128) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:53:PRO:HA | 3 | 0.11 |
| (1,1128) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:53:PRO:HA | 3 | 0.11 |
| (1,1128) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:53:PRO:HA | 3 | 0.11 |
| (1,1101) | 1:A:48:GLN:HB3 | 1:A:39:VAL:HG23 | 1 | 0.11 |
| (1,1101) | 1:A:48:GLN:HB3 | 1:A:39:VAL:HG21 | 1 | 0.11 |
| (1,1101) | 1:A:48:GLN:HB3 | 1:A:39:VAL:HG22 | 1 | 0.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1101) | 1:A:48:GLN:HB3 | 1:A:39:VAL:HG23 | 3 | 0.11 |
| (1,1101) | 1:A:48:GLN:HB3 | 1:A:39:VAL:HG21 | 3 | 0.11 |
| (1,1101) | 1:A:48:GLN:HB3 | 1:A:39:VAL:HG22 | 3 | 0.11 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD21 | 2 | 0.11 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD22 | 2 | 0.11 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD23 | 2 | 0.11 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD21 | 5 | 0.11 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD22 | 5 | 0.11 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD23 | 5 | 0.11 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD21 | 13 | 0.11 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD22 | 13 | 0.11 |
| (1,1071) | 1:A:55:LEU:H | 1:A:55:LEU:HD23 | 13 | 0.11 |
| (1,1060) | 1:A:41:ARG:HA | 1:A:41:ARG:HG3 | 13 | 0.11 |
| (1,1035) | 1:A:38:ILE:HD11 | 1:A:38:ILE:HA | 4 | 0.11 |
| (1,1035) | 1:A:38:ILE:HD12 | 1:A:38:ILE:HA | 4 | 0.11 |
| (1,1035) | 1:A:38:ILE:HD13 | 1:A:38:ILE:HA | 4 | 0.11 |
| (1,1022) | 1:A:38:ILE:HG21 | 1:A:28:ILE:HG12 | 9 | 0.11 |
| (1,1022) | 1:A:38:ILE:HG23 | 1:A:28:ILE:HG12 | 9 | 0.11 |
| (1,1022) | 1:A:38:ILE:HG22 | 1:A:28:ILE:HG12 | 9 | 0.11 |
| (1,1008) | 1:A:32:PRO:HG3 | 1:A:31:THR:HG23 | 6 | 0.11 |
| (1,1008) | 1:A:32:PRO:HG3 | 1:A:31:THR:HG21 | 6 | 0.11 |
| (1,1008) | 1:A:32:PRO:HG3 | 1:A:31:THR:HG22 | 6 | 0.11 |
| (1,1008) | 1:A:32:PRO:HG3 | 1:A:31:THR:HG23 | 18 | 0.11 |
| (1,1008) | 1:A:32:PRO:HG3 | 1:A:31:THR:HG21 | 18 | 0.11 |
| (1,1008) | 1:A:32:PRO:HG3 | 1:A:31:THR:HG22 | 18 | 0.11 |

# 10 Dihedral-angle violation analysis (i)

No dihedral-angle restraints found