# Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

Jun 4, 2023 – 02:03 AM EDT

| | | |
|---|---|---|
| PDB ID | : | 2L71 |
| BMRB ID | : | 17331 |
| Title | : | NMR solution structure of GIP in Bicellular media |
| Authors | : | Venneti, K.C.; Alana, I.; O'Harte, F.P.M.; Malthouse, P.J.G.; Hewage, C.M. |
| Deposited on | : | 2010-12-01 |

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:

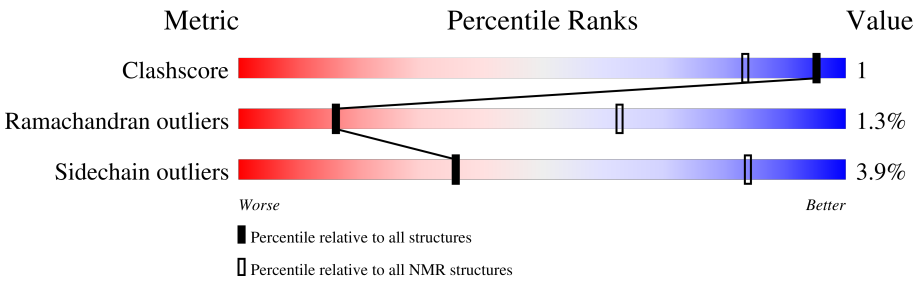
| | | |
|---|---|---|
| MolProbity | : | 4.02b-467 |
| Percentile statistics | : | 20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019) |
| wwPDB-RCI | : | v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005) |
| PANAV | : | Wang et al. (2010) |
| wwPDB-ShiftChecker | : | v1.2 |
| BMRB Restraints Analysis | : | 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 51%.

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 | 42 | 43% 5% 52% |

# 2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 15 models. Model 5 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *fewest violations*.

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:13-A:32 (20) | 0.95 | 5 |

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 2 clusters and 4 single-model clusters were found.

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

# 3 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 688 atoms, of which 336 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Gastric inhibitory polypeptide.

| Mol | Chain | Residues | Atoms | | | | | | Trace |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | Total | C | H | N | O | S | |
| 1 | A | 42 | 688 | 226 | 336 | 60 | 65 | 1 | 0 |

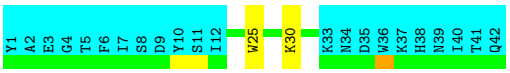
# 4 Residue-property plots (i)

## 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: Gastric inhibitory polypeptide

Chain A:

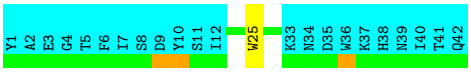

## 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

### 4.2.1 Score per residue for model 1

• Molecule 1: Gastric inhibitory polypeptide

Chain A:


### 4.2.2 Score per residue for model 2

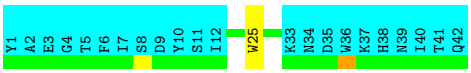
• Molecule 1: Gastric inhibitory polypeptide

Chain A:

### 4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Gastric inhibitory polypeptide

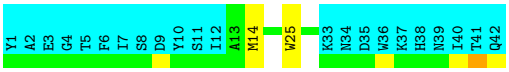
Chain A: 45% • 52%




### 4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Gastric inhibitory polypeptide

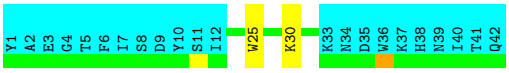
Chain A: 43% 5% 52%




### 4.2.5 Score per residue for model 5 (medoid)

- Molecule 1: Gastric inhibitory polypeptide

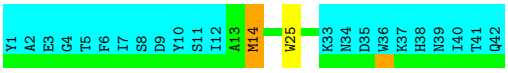
Chain A: 43% 5% 52%




### 4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Gastric inhibitory polypeptide

Chain A: 43% • • 52%




### 4.2.7 Score per residue for model 7

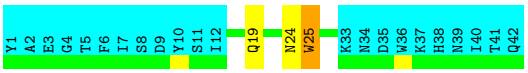
- Molecule 1: Gastric inhibitory polypeptide

Chain A: 40% 7% 52%

### 4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Gastric inhibitory polypeptide

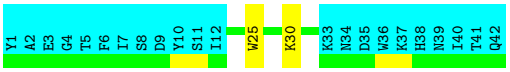
Chain A: 40% 5% 52%




### 4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Gastric inhibitory polypeptide

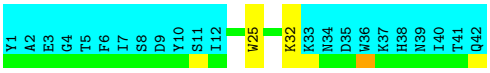
Chain A: 43% 5% 52%




### 4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Gastric inhibitory polypeptide

Chain A: 43% 5% 52%




### 4.2.11 Score per residue for model 11

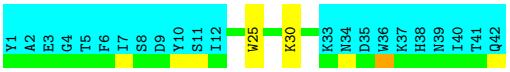
- Molecule 1: Gastric inhibitory polypeptide

Chain A: 38% 10% 52%

### 4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Gastric inhibitory polypeptide

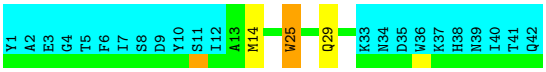
Chain A: 43% 5% 52%



### 4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Gastric inhibitory polypeptide

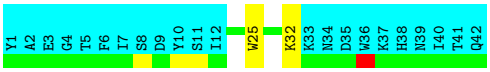
Chain A:




### 4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Gastric inhibitory polypeptide

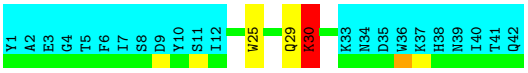
Chain A:




### 4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Gastric inhibitory polypeptide

Chain A:



# 5 Refinement protocol and experimental data overview (i)

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

Of the 200 calculated structures, 15 were deposited, based on the following criterion: *target function*.

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

| Software name | Classification | Version |
|---|---|---|
| CYANA | structure solution | 2.0 |
| CYANA | refinement | 2.0 |

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 | 294 |
| Number of shifts mapped to atoms | 294 |
| Number of unparsed shifts | 0 |
| Number of shifts with mapping errors | 0 |
| Number of shifts with mapping warnings | 0 |
| Assignment completeness (well-defined parts) | 51% |

# 6 Model quality (i)

## 6.1 Standard geometry (i)

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

| Mol | Chain | Bond lengths | | Bond angles | |
|---|---|---|---|---|---|
| | | RMSZ | #Z>5 | RMSZ | #Z>5 |
| 1 | A | 1.01±0.00 | 0±0/170 ( 0.0± 0.0%) | 1.01±0.03 | 1±0/228 ( 0.4± 0.0%) |
| All | All | 1.01 | 0/2550 ( 0.0%) | 1.01 | 15/3420 ( 0.4%) |

There are no bond-length outliers.

All unique angle outliers are listed below.

| Mol | Chain | Res | Type | Atoms | Z | Observed($^o$) | Ideal($^o$) | Models | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | | | | | | Worst | Total |
| 1 | A | 25 | TRP | CE2-CD2-CG | -6.24 | 102.31 | 107.30 | 11 | 15 |

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 | 166 | 167 | 167 | 0±0 |
| All | All | 2490 | 2505 | 2505 | 5 |

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 1.

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

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|---|---|---|---|---|---|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:25:TRP:CE2 | 1:A:29:GLN:NE2 | 0.44 | 2.85 | 13 | 1 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|---|---|---|---|---|---|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:24:ASN:OD1 | 1:A:25:TRP:N | 0.43 | 2.50 | 8 | 1 |
| 1:A:14:MET:SD | 1:A:14:MET:C | 0.41 | 2.99 | 4 | 2 |
| 1:A:29:GLN:O | 1:A:30:LYS:C | 0.40 | 2.59 | 15 | 1 |

## 6.3 Torsion angles (i)

### 6.3.1 Protein backbone (i)

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

| Mol | Chain | Analysed | Favoured | Allowed | Outliers | Percentiles | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | 20/42 (48%) | 18±1 (90±7%) | 2±1 (9±6%) | 0±0 (1±2%) | 16 | 63 |
| All | All | 300/630 (48%) | 270 (90%) | 26 (9%) | 4 (1%) | 16 | 63 |

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

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|---|---|---|---|---|
| 1 | A | 14 | MET | 2 |
| 1 | A | 30 | LYS | 2 |

### 6.3.2 Protein sidechains (i)

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

| Mol | Chain | Analysed | Rotameric | Outliers | Percentiles | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | 17/37 (46%) | 16±1 (96±4%) | 1±1 (4±4%) | 36 | 84 |
| All | All | 255/555 (46%) | 245 (96%) | 10 (4%) | 36 | 84 |

All 4 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 | 30 | LYS | 6 |
| 1 | A | 14 | MET | 2 |
| 1 | A | 19 | GLN | 1 |
| 1 | A | 32 | LYS | 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 51% for the well-defined parts and 50% for the entire structure.

## 7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *assigned_chem_shift_list_1*

### 7.1.1 Bookkeeping (i)

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

| | |
|---|---|
| Total number of shifts | 294 |
| Number of shifts mapped to atoms | 294 |
| Number of unparsed shifts | 0 |
| Number of shifts with mapping errors | 0 |
| Number of shifts with mapping warnings | 0 |
| Number of shift outliers (ShiftChecker) | 0 |

### 7.1.2 Chemical shift referencing (i)

No chemical shift referencing corrections were calculated (not enough data).

### 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 51%, i.e. 147 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 290. 0 out of 3 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

| | **Total** | **$^{1}$H** | **$^{13}$C** | **$^{15}$N** |
|---|---|---|---|---|
| Backbone | 41/101 (41%) | 41/41 (100%) | 0/40 (0%) | 0/20 (0%) |
| Sidechain | 95/160 (59%) | 95/103 (92%) | 0/50 (0%) | 0/7 (0%) |
| Aromatic | 11/29 (38%) | 11/15 (73%) | 0/12 (0%) | 0/2 (0%) |
| Overall | 147/290 (51%) | 147/159 (92%) | 0/102 (0%) | 0/29 (0%) |

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 50%, i.e. 294 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 589. 0 out of 3 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

| | Total | $^{1}$H | $^{13}$C | $^{15}$N |
|---|---|---|---|---|
| Backbone | 85/212 (40%) | 85/86 (99%) | 0/84 (0%) | 0/42 (0%) |
| Sidechain | 179/301 (59%) | 179/193 (93%) | 0/96 (0%) | 0/12 (0%) |
| Aromatic | 30/76 (39%) | 30/38 (79%) | 0/34 (0%) | 0/4 (0%) |
| Overall | 294/589 (50%) | 294/317 (93%) | 0/214 (0%) | 0/58 (0%) |

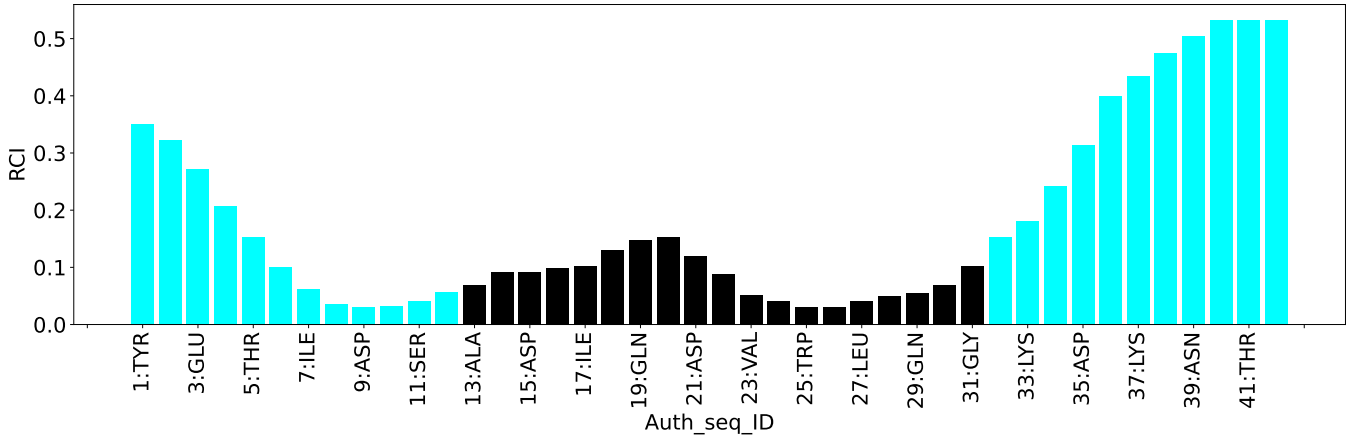
### 7.1.4 Statistically unusual chemical shifts (i)

There are no statistically unusual chemical shifts.

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

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

Random coil index (RCI) for chain A:



# 8 NMR restraints analysis (i)

## 8.1 Conformationally restricting restraints (i)

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

| Description | Value |
|---|---|
| Total distance restraints | 529 |
| Intra-residue (\|i-j\|=0) | 226 |
| Sequential (\|i-j\|=1) | 181 |
| Medium range (\|i-j\|>1 and \|i-j\|<5) | 120 |
| Long range (\|i-j\|≥5) | 2 |
| 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 | 12.6 |
| Number of long range restraints per residue[1] | 0.0 |

[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) | 25.2 | 0.2 |
| 0.2-0.5 (Medium) | 52.6 | 0.5 |
| >0.5 (Large) | 117.1 | 6.71 |

### 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)

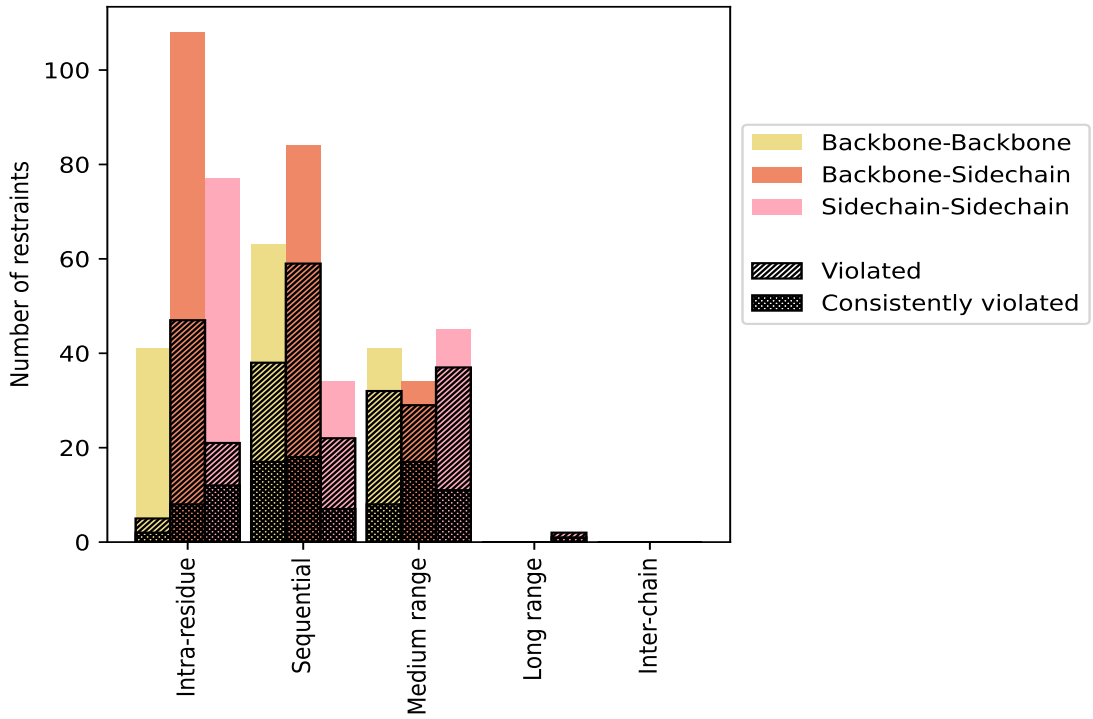
## 9.1 Summary of distance violations (i)

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) | 226 | 42.7 | 73 | 32.3 | 13.8 | 22 | 9.7 | 4.2 |
| Backbone-Backbone | 41 | 7.8 | 5 | 12.2 | 0.9 | 2 | 4.9 | 0.4 |
| Backbone-Sidechain | 108 | 20.4 | 47 | 43.5 | 8.9 | 8 | 7.4 | 1.5 |
| Sidechain-Sidechain | 77 | 14.6 | 21 | 27.3 | 4.0 | 12 | 15.6 | 2.3 |
| Sequential (\|i-j\|=1) | 181 | 34.2 | 119 | 65.7 | 22.5 | 42 | 23.2 | 7.9 |
| Backbone-Backbone | 63 | 11.9 | 38 | 60.3 | 7.2 | 17 | 27.0 | 3.2 |
| Backbone-Sidechain | 84 | 15.9 | 59 | 70.2 | 11.2 | 18 | 21.4 | 3.4 |
| Sidechain-Sidechain | 34 | 6.4 | 22 | 64.7 | 4.2 | 7 | 20.6 | 1.3 |
| Medium range (\|i-j\|>1 & \|i-j\|<5) | 120 | 22.7 | 98 | 81.7 | 18.5 | 36 | 30.0 | 6.8 |
| Backbone-Backbone | 41 | 7.8 | 32 | 78.0 | 6.0 | 8 | 19.5 | 1.5 |
| Backbone-Sidechain | 34 | 6.4 | 29 | 85.3 | 5.5 | 17 | 50.0 | 3.2 |
| Sidechain-Sidechain | 45 | 8.5 | 37 | 82.2 | 7.0 | 11 | 24.4 | 2.1 |
| Long range (\|i-j\|≥5) | 2 | 0.4 | 2 | 100.0 | 0.4 | 1 | 50.0 | 0.2 |
| 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 | 2 | 0.4 | 2 | 100.0 | 0.4 | 1 | 50.0 | 0.2 |
| 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 | 529 | 100.0 | 292 | 55.2 | 55.2 | 101 | 19.1 | 19.1 |
| Backbone-Backbone | 145 | 27.4 | 75 | 51.7 | 14.2 | 27 | 18.6 | 5.1 |
| Backbone-Sidechain | 226 | 42.7 | 135 | 59.7 | 25.5 | 43 | 19.0 | 8.1 |
| Sidechain-Sidechain | 158 | 29.9 | 82 | 51.9 | 15.5 | 31 | 19.6 | 5.9 |

[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 | 52 | 87 | 66 | 2 | 0 | 207 | 1.02 | 5.06 | 0.91 | 0.74 |
| 2 | 46 | 85 | 62 | 2 | 0 | 195 | 0.98 | 5.52 | 0.96 | 0.61 |
| 3 | 49 | 79 | 66 | 2 | 0 | 196 | 1.06 | 5.66 | 0.97 | 0.82 |
| 4 | 47 | 79 | 59 | 2 | 0 | 187 | 0.99 | 5.61 | 0.94 | 0.67 |
| 5 | 47 | 78 | 59 | 2 | 0 | 186 | 1.01 | 5.52 | 0.91 | 0.66 |
| 6 | 45 | 80 | 60 | 2 | 0 | 187 | 1.02 | 5.27 | 0.9 | 0.73 |
| 7 | 49 | 83 | 61 | 2 | 0 | 195 | 1.02 | 5.1 | 1.03 | 0.68 |
| 8 | 48 | 82 | 69 | 2 | 0 | 201 | 1.03 | 6.07 | 0.97 | 0.71 |
| 9 | 47 | 87 | 67 | 2 | 0 | 203 | 0.99 | 4.92 | 0.96 | 0.63 |
| 10 | 53 | 81 | 63 | 2 | 0 | 199 | 1.03 | 5.32 | 0.97 | 0.74 |
| 11 | 50 | 83 | 61 | 2 | 0 | 196 | 1.02 | 5.38 | 0.96 | 0.8 |

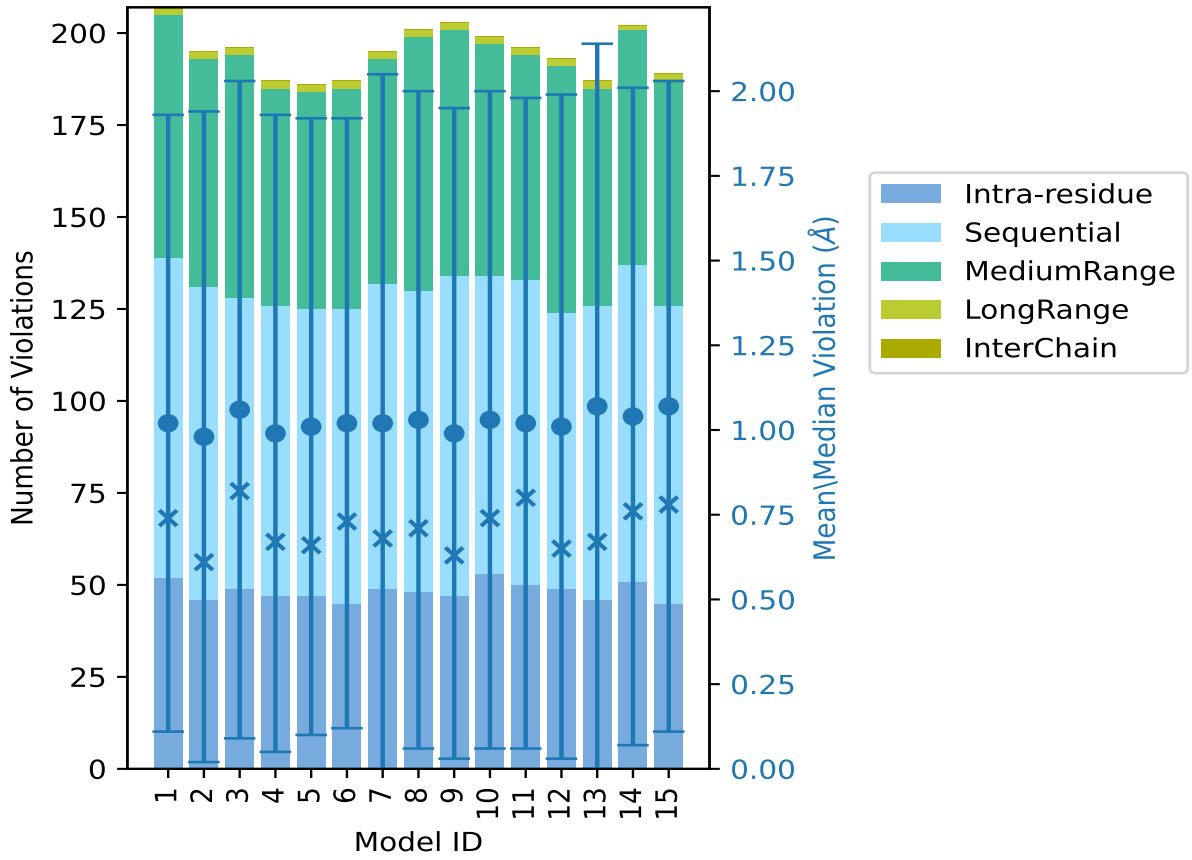
*Continued on next page...*

*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 | 49 | 75 | 67 | 2 | 0 | 193 | 1.01 | 5.44 | 0.98 | 0.65 |
| 13 | 46 | 80 | 59 | 2 | 0 | 187 | 1.07 | 6.71 | 1.07 | 0.67 |
| 14 | 51 | 86 | 64 | 1 | 0 | 202 | 1.04 | 5.69 | 0.97 | 0.76 |
| 15 | 45 | 81 | 61 | 2 | 0 | 189 | 1.07 | 5.61 | 0.96 | 0.78 |

[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)

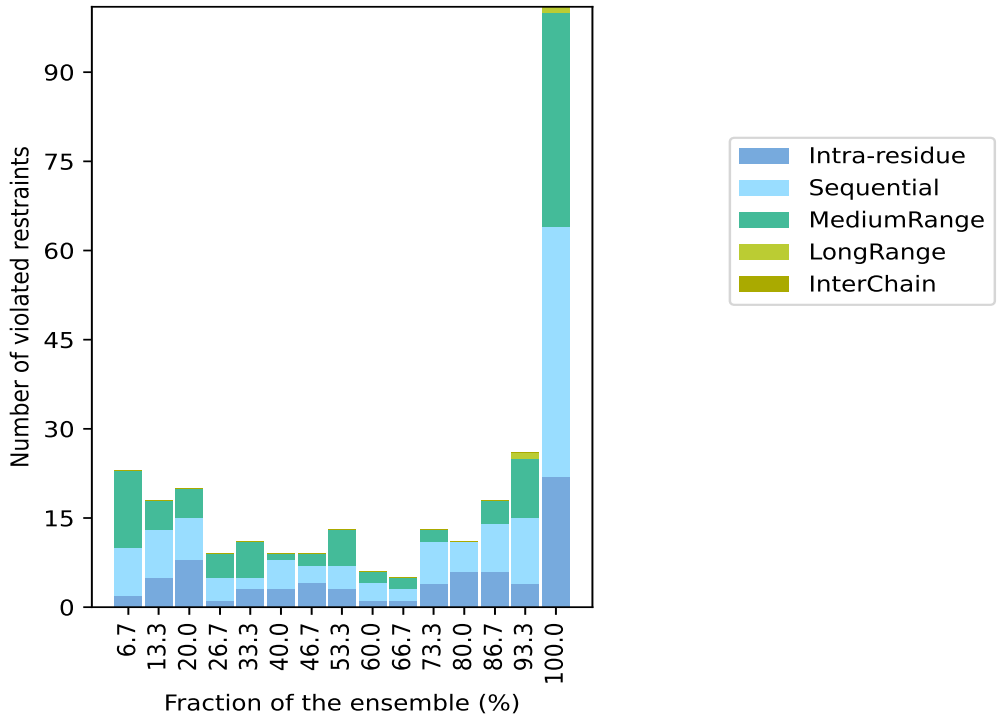
Violation analysis may find that some restraints are violated in few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints

for a given fraction of the ensemble. In total, 237(IR:153, SQ:62, MR:22, LR:0, IC:0) restraints are not violated in the ensemble.

| **Number of violated restraints** | | | | | | **Fraction of the ensemble** | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| IR[1] | SQ[2] | MR[3] | LR[4] | IC[5] | Total | Count[6] | % |
| 2 | 8 | 13 | 0 | 0 | 23 | 1 | 6.7 |
| 5 | 8 | 5 | 0 | 0 | 18 | 2 | 13.3 |
| 8 | 7 | 5 | 0 | 0 | 20 | 3 | 20.0 |
| 1 | 4 | 4 | 0 | 0 | 9 | 4 | 26.7 |
| 3 | 2 | 6 | 0 | 0 | 11 | 5 | 33.3 |
| 3 | 5 | 1 | 0 | 0 | 9 | 6 | 40.0 |
| 4 | 3 | 2 | 0 | 0 | 9 | 7 | 46.7 |
| 3 | 4 | 6 | 0 | 0 | 13 | 8 | 53.3 |
| 1 | 3 | 2 | 0 | 0 | 6 | 9 | 60.0 |
| 1 | 2 | 2 | 0 | 0 | 5 | 10 | 66.7 |
| 4 | 7 | 2 | 0 | 0 | 13 | 11 | 73.3 |
| 6 | 5 | 0 | 0 | 0 | 11 | 12 | 80.0 |
| 6 | 8 | 4 | 0 | 0 | 18 | 13 | 86.7 |
| 4 | 11 | 10 | 1 | 0 | 26 | 14 | 93.3 |
| 22 | 42 | 36 | 1 | 0 | 101 | 15 | 100.0 |

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

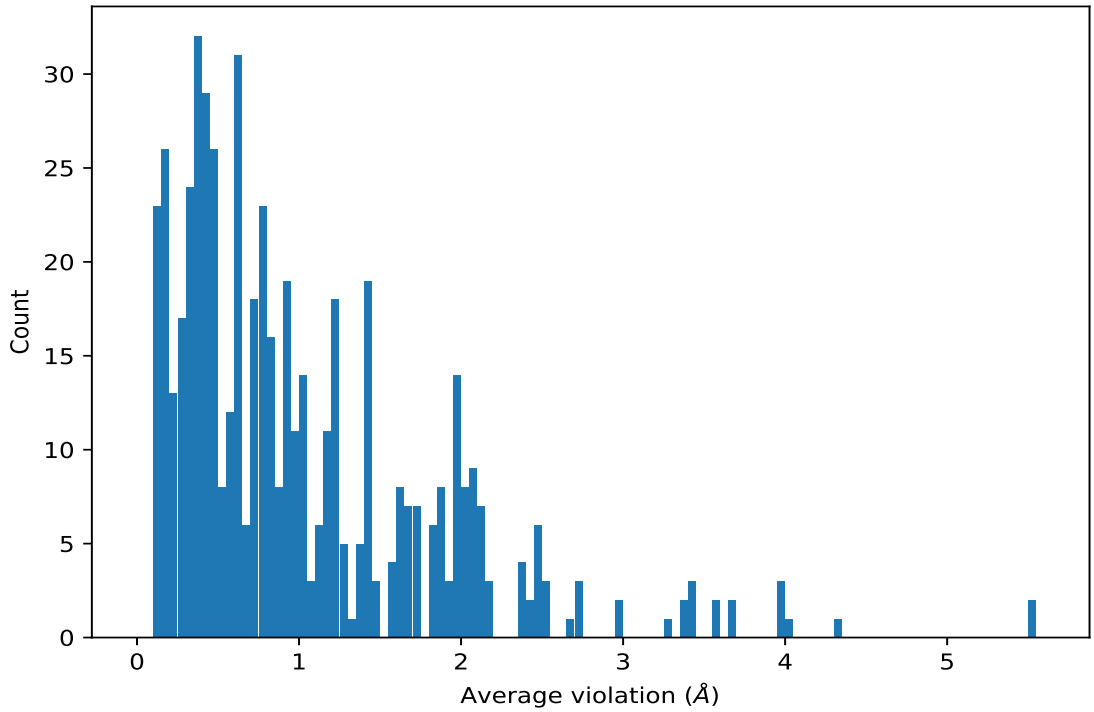
### 9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble (i)




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

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

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




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

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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,369) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:25:TRP:HH2 | 15 | 5.53 | 0.42 | 5.52 |
| (1,369) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:25:TRP:HH2 | 15 | 5.53 | 0.42 | 5.52 |
| (1,363) | 1:A:25:TRP:HZ3 | 1:A:25:TRP:HD1 | 15 | 4.31 | 0.0 | 4.31 |
| (1,362) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HD1 | 15 | 4.03 | 0.0 | 4.03 |
| (1,368) | 1:A:22:PHE:HD1 | 1:A:25:TRP:HH2 | 15 | 3.67 | 0.36 | 3.61 |
| (1,368) | 1:A:22:PHE:HD2 | 1:A:25:TRP:HH2 | 15 | 3.67 | 0.36 | 3.61 |
| (1,367) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 15 | 3.57 | 0.46 | 3.53 |
| (1,367) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 15 | 3.57 | 0.46 | 3.53 |
| (1,312) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:3:GLU:HA | 15 | 3.36 | 0.5 | 3.38 |
| (1,312) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:3:GLU:HA | 15 | 3.36 | 0.5 | 3.38 |
| (1,327) | 1:A:34:ASN:HD22 | 1:A:38:HIS:HA | 15 | 3.28 | 1.01 | 3.42 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 15 | 2.72 | 0.06 | 2.72 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 15 | 2.72 | 0.06 | 2.72 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 15 | 2.72 | 0.06 | 2.72 |
| (1,336) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:24:ASN:HD22 | 15 | 2.65 | 0.74 | 3.14 |
| (1,372) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:25:TRP:HZ2 | 15 | 2.41 | 0.01 | 2.41 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,407) | 1:A:25:TRP:HZ2 | 1:A:26:LEU:HG | 15 | 2.4 | 0.46 | 2.22 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:6:PHE:HB2 | 15 | 2.39 | 0.87 | 2.23 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:6:PHE:HB3 | 15 | 2.39 | 0.87 | 2.23 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 15 | 2.39 | 0.87 | 2.23 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:6:PHE:HB3 | 15 | 2.39 | 0.87 | 2.23 |
| (1,384) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HE1 | 15 | 2.18 | 0.01 | 2.18 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:29:GLN:H | 15 | 2.1 | 0.1 | 2.08 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:29:GLN:H | 15 | 2.1 | 0.1 | 2.08 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:29:GLN:H | 15 | 2.1 | 0.1 | 2.08 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:HG2 | 15 | 2.1 | 0.67 | 1.86 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:HG3 | 15 | 2.1 | 0.67 | 1.86 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:HG2 | 15 | 2.1 | 0.67 | 1.86 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:HG3 | 15 | 2.1 | 0.67 | 1.86 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD11 | 15 | 2.06 | 0.1 | 2.05 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD12 | 15 | 2.06 | 0.1 | 2.05 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD13 | 15 | 2.06 | 0.1 | 2.05 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD11 | 15 | 2.06 | 0.1 | 2.05 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD12 | 15 | 2.06 | 0.1 | 2.05 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD13 | 15 | 2.06 | 0.1 | 2.05 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD11 | 15 | 2.06 | 0.1 | 2.05 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD12 | 15 | 2.06 | 0.1 | 2.05 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD13 | 15 | 2.06 | 0.1 | 2.05 |
| (1,388) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:HE21 | 15 | 2.04 | 0.8 | 1.99 |
| (1,388) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:HE22 | 15 | 2.04 | 0.8 | 1.99 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 15 | 2.02 | 0.58 | 1.84 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 15 | 2.02 | 0.58 | 1.84 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 15 | 2.02 | 0.58 | 1.84 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD11 | 15 | 2.02 | 0.58 | 1.84 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD12 | 15 | 2.02 | 0.58 | 1.84 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD13 | 15 | 2.02 | 0.58 | 1.84 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HG2 | 15 | 1.97 | 1.16 | 1.81 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HG3 | 15 | 1.97 | 1.16 | 1.81 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HG2 | 15 | 1.97 | 1.16 | 1.81 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HG3 | 15 | 1.97 | 1.16 | 1.81 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HB2 | 15 | 1.96 | 0.76 | 2.01 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HB3 | 15 | 1.96 | 0.76 | 2.01 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HB2 | 15 | 1.96 | 0.76 | 2.01 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HB3 | 15 | 1.96 | 0.76 | 2.01 |
| (1,263) | 1:A:12:ILE:HG12 | 1:A:13:ALA:H | 15 | 1.93 | 0.4 | 2.18 |
| (1,361) | 1:A:25:TRP:HZ3 | 1:A:25:TRP:HZ2 | 15 | 1.92 | 0.0 | 1.92 |
| (1,359) | 1:A:36:TRP:HH2 | 1:A:36:TRP:HE3 | 15 | 1.92 | 0.01 | 1.91 |
| (1,365) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HE3 | 15 | 1.89 | 0.0 | 1.89 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,210) | 1:A:4:GLY:HA2 | 1:A:6:PHE:H | 15 | 1.86 | 0.32 | 1.9 |
| (1,366) | 1:A:22:PHE:HD1 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 15 | 1.84 | 0.4 | 1.81 |
| (1,366) | 1:A:22:PHE:HD2 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 15 | 1.84 | 0.4 | 1.81 |
| (1,333) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HE1 | 15 | 1.7 | 0.25 | 1.77 |
| (1,333) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HE2 | 15 | 1.7 | 0.25 | 1.77 |
| (1,373) | 1:A:36:TRP:HD1 | 1:A:36:TRP:HZ2 | 15 | 1.66 | 0.01 | 1.66 |
| (1,207) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:37:LYS:HB2 | 15 | 1.62 | 0.28 | 1.66 |
| (1,207) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:37:LYS:HB3 | 15 | 1.62 | 0.28 | 1.66 |
| (2,6) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:2:ALA:HA | 15 | 1.62 | 0.07 | 1.62 |
| (2,6) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:2:ALA:HA | 15 | 1.62 | 0.07 | 1.62 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:H | 15 | 1.61 | 0.19 | 1.59 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:H | 15 | 1.61 | 0.19 | 1.59 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:H | 15 | 1.61 | 0.19 | 1.59 |
| (1,357) | 1:A:36:TRP:HZ3 | 1:A:36:TRP:HZ2 | 15 | 1.58 | 0.0 | 1.58 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG21 | 1:A:7:ILE:H | 15 | 1.57 | 0.25 | 1.64 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG22 | 1:A:7:ILE:H | 15 | 1.57 | 0.25 | 1.64 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG23 | 1:A:7:ILE:H | 15 | 1.57 | 0.25 | 1.64 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:29:GLN:H | 15 | 1.45 | 0.38 | 1.37 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:29:GLN:H | 15 | 1.45 | 0.38 | 1.37 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:29:GLN:H | 15 | 1.45 | 0.38 | 1.37 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD11 | 1:A:21:ASP:H | 15 | 1.44 | 0.13 | 1.48 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD12 | 1:A:21:ASP:H | 15 | 1.44 | 0.13 | 1.48 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD13 | 1:A:21:ASP:H | 15 | 1.44 | 0.13 | 1.48 |
| (1,261) | 1:A:32:LYS:HG2 | 1:A:36:TRP:H | 15 | 1.43 | 0.48 | 1.47 |
| (1,261) | 1:A:32:LYS:HG3 | 1:A:36:TRP:H | 15 | 1.43 | 0.48 | 1.47 |
| (1,323) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HB2 | 15 | 1.41 | 0.36 | 1.46 |
| (1,323) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HB3 | 15 | 1.41 | 0.36 | 1.46 |
| (1,310) | 1:A:8:SER:HB3 | 1:A:10:TYR:HD1 | 15 | 1.37 | 0.52 | 1.08 |
| (1,310) | 1:A:8:SER:HB3 | 1:A:10:TYR:HD2 | 15 | 1.37 | 0.52 | 1.08 |
| (2,3) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:11:SER:HA | 15 | 1.35 | 0.04 | 1.34 |
| (2,3) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:11:SER:HA | 15 | 1.35 | 0.04 | 1.34 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG21 | 15 | 1.28 | 0.15 | 1.28 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG22 | 15 | 1.28 | 0.15 | 1.28 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG23 | 15 | 1.28 | 0.15 | 1.28 |
| (1,27) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB3 | 15 | 1.27 | 0.01 | 1.27 |
| (1,25) | 1:A:18:HIS:HB3 | 1:A:19:GLN:H | 15 | 1.26 | 0.09 | 1.27 |
| (1,2) | 1:A:1:TYR:HB2 | 1:A:2:ALA:H | 15 | 1.24 | 0.09 | 1.25 |
| (1,208) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:HB2 | 15 | 1.2 | 0.14 | 1.2 |
| (1,208) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:HB3 | 15 | 1.2 | 0.14 | 1.2 |
| (1,232) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG12 | 15 | 1.2 | 0.09 | 1.16 |
| (1,8) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:10:TYR:HB2 | 15 | 1.19 | 0.31 | 1.35 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:ALA:H | 15 | 1.1 | 0.17 | 1.06 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:ALA:H | 15 | 1.1 | 0.17 | 1.06 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:ALA:H | 15 | 1.1 | 0.17 | 1.06 |
| (1,222) | 1:A:20:GLN:HA | 1:A:24:ASN:H | 15 | 1.1 | 0.23 | 1.07 |
| (1,26) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:H | 15 | 1.05 | 0.09 | 1.05 |
| (1,303) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:11:SER:HA | 15 | 1.04 | 0.04 | 1.04 |
| (1,303) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:11:SER:HA | 15 | 1.04 | 0.04 | 1.04 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD11 | 15 | 1.01 | 0.12 | 1.02 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD12 | 15 | 1.01 | 0.12 | 1.02 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD13 | 15 | 1.01 | 0.12 | 1.02 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD21 | 15 | 1.0 | 0.3 | 1.09 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD22 | 15 | 1.0 | 0.3 | 1.09 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD23 | 15 | 1.0 | 0.3 | 1.09 |
| (1,137) | 1:A:38:HIS:HA | 1:A:40:ILE:H | 15 | 0.95 | 0.36 | 0.96 |
| (1,274) | 1:A:24:ASN:HB3 | 1:A:24:ASN:HD22 | 15 | 0.93 | 0.07 | 0.97 |
| (1,274) | 1:A:24:ASN:HB2 | 1:A:24:ASN:HD22 | 15 | 0.93 | 0.07 | 0.97 |
| (1,252) | 1:A:32:LYS:HD2 | 1:A:33:LYS:H | 15 | 0.92 | 0.24 | 0.92 |
| (1,252) | 1:A:32:LYS:HD3 | 1:A:33:LYS:H | 15 | 0.92 | 0.24 | 0.92 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HB2 | 15 | 0.91 | 0.18 | 0.88 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HB3 | 15 | 0.91 | 0.18 | 0.88 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HB2 | 15 | 0.91 | 0.18 | 0.88 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HB3 | 15 | 0.91 | 0.18 | 0.88 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HB2 | 15 | 0.91 | 0.18 | 0.88 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HB3 | 15 | 0.91 | 0.18 | 0.88 |
| (1,85) | 1:A:18:HIS:HA | 1:A:22:PHE:H | 15 | 0.9 | 0.18 | 0.97 |
| (1,86) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:25:TRP:H | 15 | 0.87 | 0.16 | 0.83 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG21 | 1:A:9:ASP:H | 15 | 0.87 | 0.26 | 0.84 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG22 | 1:A:9:ASP:H | 15 | 0.87 | 0.26 | 0.84 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG23 | 1:A:9:ASP:H | 15 | 0.87 | 0.26 | 0.84 |
| (1,318) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HG | 15 | 0.84 | 0.45 | 0.57 |
| (1,164) | 1:A:10:TYR:HB3 | 1:A:11:SER:H | 15 | 0.78 | 0.29 | 0.89 |
| (1,311) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:11:SER:HB2 | 15 | 0.76 | 0.52 | 0.6 |
| (1,311) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:11:SER:HB2 | 15 | 0.76 | 0.52 | 0.6 |
| (1,82) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:35:ASP:H | 15 | 0.74 | 0.2 | 0.7 |
| (1,290) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:25:TRP:HD1 | 15 | 0.74 | 0.14 | 0.77 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG21 | 15 | 0.72 | 0.43 | 0.73 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG22 | 15 | 0.72 | 0.43 | 0.73 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG23 | 15 | 0.72 | 0.43 | 0.73 |
| (1,265) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:H | 15 | 0.7 | 0.41 | 0.55 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:25:TRP:H | 15 | 0.7 | 0.08 | 0.73 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:25:TRP:H | 15 | 0.7 | 0.08 | 0.73 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:25:TRP:H | 15 | 0.7 | 0.08 | 0.73 |
| (1,326) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:HD1 | 15 | 0.7 | 0.15 | 0.72 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,326) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:HD2 | 15 | 0.7 | 0.15 | 0.72 |
| (1,206) | 1:A:7:ILE:HB | 1:A:9:ASP:H | 15 | 0.62 | 0.35 | 0.49 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD11 | 15 | 0.6 | 0.29 | 0.52 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD12 | 15 | 0.6 | 0.29 | 0.52 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD13 | 15 | 0.6 | 0.29 | 0.52 |
| (1,176) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:36:TRP:H | 15 | 0.6 | 0.18 | 0.6 |
| (1,193) | 1:A:13:ALA:H | 1:A:14:MET:H | 15 | 0.6 | 0.28 | 0.54 |
| (1,53) | 1:A:32:LYS:HB2 | 1:A:33:LYS:H | 15 | 0.58 | 0.22 | 0.55 |
| (1,178) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:36:TRP:H | 15 | 0.54 | 0.15 | 0.56 |
| (1,179) | 1:A:25:TRP:H | 1:A:26:LEU:H | 15 | 0.51 | 0.09 | 0.52 |
| (1,189) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:33:LYS:H | 15 | 0.47 | 0.18 | 0.41 |
| (1,175) | 1:A:6:PHE:H | 1:A:7:ILE:H | 15 | 0.46 | 0.21 | 0.43 |
| (1,186) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:37:LYS:H | 15 | 0.45 | 0.18 | 0.42 |
| (1,202) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:25:TRP:H | 15 | 0.45 | 0.06 | 0.45 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG21 | 15 | 0.44 | 0.02 | 0.43 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG22 | 15 | 0.44 | 0.02 | 0.43 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG23 | 15 | 0.44 | 0.02 | 0.43 |
| (1,180) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:34:ASN:H | 15 | 0.44 | 0.13 | 0.43 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG21 | 15 | 0.44 | 0.02 | 0.45 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG22 | 15 | 0.44 | 0.02 | 0.45 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG23 | 15 | 0.44 | 0.02 | 0.45 |
| (1,134) | 1:A:22:PHE:HB2 | 1:A:23:VAL:H | 15 | 0.43 | 0.04 | 0.42 |
| (1,134) | 1:A:22:PHE:HB3 | 1:A:23:VAL:H | 15 | 0.43 | 0.04 | 0.42 |
| (1,169) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:H | 15 | 0.41 | 0.14 | 0.44 |
| (1,181) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:35:ASP:H | 15 | 0.4 | 0.11 | 0.4 |
| (1,335) | 1:A:17:ILE:HA | 1:A:18:HIS:HD2 | 15 | 0.39 | 0.18 | 0.38 |
| (1,129) | 1:A:31:GLY:HA2 | 1:A:32:LYS:H | 15 | 0.39 | 0.11 | 0.39 |
| (1,129) | 1:A:31:GLY:HA3 | 1:A:32:LYS:H | 15 | 0.39 | 0.11 | 0.39 |
| (1,196) | 1:A:28:ALA:H | 1:A:29:GLN:H | 15 | 0.35 | 0.19 | 0.28 |
| (1,381) | 1:A:25:TRP:HZ2 | 1:A:25:TRP:HE1 | 15 | 0.34 | 0.01 | 0.34 |
| (1,191) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:17:ILE:H | 15 | 0.33 | 0.07 | 0.33 |
| (1,28) | 1:A:20:GLN:HA | 1:A:21:ASP:H | 15 | 0.31 | 0.01 | 0.3 |
| (1,152) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:24:ASN:HB2 | 15 | 0.3 | 0.27 | 0.24 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:28:ALA:H | 15 | 0.25 | 0.06 | 0.23 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:28:ALA:H | 15 | 0.25 | 0.06 | 0.23 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:28:ALA:H | 15 | 0.25 | 0.06 | 0.23 |
| (1,10) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:ALA:H | 15 | 0.25 | 0.01 | 0.25 |
| (1,190) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:18:HIS:H | 15 | 0.25 | 0.07 | 0.26 |
| (1,55) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:34:ASN:H | 15 | 0.24 | 0.03 | 0.25 |
| (1,157) | 1:A:18:HIS:H | 1:A:18:HIS:HB2 | 15 | 0.22 | 0.05 | 0.21 |
| (1,170) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:20:GLN:H | 15 | 0.22 | 0.07 | 0.23 |
| (1,380) | 1:A:36:TRP:HZ2 | 1:A:36:TRP:HE1 | 15 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,64) | 1:A:36:TRP:H | 1:A:36:TRP:HA | 15 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (1,132) | 1:A:27:LEU:H | 1:A:27:LEU:HA | 15 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG21 | 14 | 3.97 | 0.39 | 4.04 |
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG22 | 14 | 3.97 | 0.39 | 4.04 |
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG23 | 14 | 3.97 | 0.39 | 4.04 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG21 | 14 | 3.41 | 0.46 | 3.49 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG22 | 14 | 3.41 | 0.46 | 3.49 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG23 | 14 | 3.41 | 0.46 | 3.49 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE1 | 14 | 1.98 | 1.06 | 1.66 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE2 | 14 | 1.98 | 1.06 | 1.66 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE3 | 14 | 1.98 | 1.06 | 1.66 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE1 | 14 | 1.98 | 1.06 | 1.66 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE2 | 14 | 1.98 | 1.06 | 1.66 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE3 | 14 | 1.98 | 1.06 | 1.66 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:6:PHE:HB2 | 14 | 1.72 | 0.96 | 1.78 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:6:PHE:HB3 | 14 | 1.72 | 0.96 | 1.78 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 14 | 1.72 | 0.96 | 1.78 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:6:PHE:HB3 | 14 | 1.72 | 0.96 | 1.78 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG21 | 14 | 1.15 | 0.73 | 0.85 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG22 | 14 | 1.15 | 0.73 | 0.85 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG23 | 14 | 1.15 | 0.73 | 0.85 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG21 | 14 | 1.15 | 0.73 | 0.85 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG22 | 14 | 1.15 | 0.73 | 0.85 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG23 | 14 | 1.15 | 0.73 | 0.85 |
| (1,258) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:H | 14 | 1.05 | 0.34 | 0.9 |
| (1,258) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:H | 14 | 1.05 | 0.34 | 0.9 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 14 | 1.0 | 0.32 | 0.88 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 14 | 1.0 | 0.32 | 0.88 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 14 | 1.0 | 0.32 | 0.88 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 14 | 1.0 | 0.32 | 0.88 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 14 | 1.0 | 0.32 | 0.88 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 14 | 1.0 | 0.32 | 0.88 |
| (1,168) | 1:A:4:GLY:H | 1:A:5:THR:H | 14 | 0.96 | 0.33 | 0.78 |
| (1,298) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HD1 | 14 | 0.89 | 0.1 | 0.85 |
| (1,298) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HD2 | 14 | 0.89 | 0.1 | 0.85 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG21 | 14 | 0.81 | 0.34 | 0.79 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG22 | 14 | 0.81 | 0.34 | 0.79 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG23 | 14 | 0.81 | 0.34 | 0.79 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG21 | 14 | 0.81 | 0.34 | 0.79 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG22 | 14 | 0.81 | 0.34 | 0.79 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG23 | 14 | 0.81 | 0.34 | 0.79 |
| (1,244) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HD2 | 14 | 0.79 | 0.35 | 0.7 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,244) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HD3 | 14 | 0.79 | 0.35 | 0.7 |
| (1,246) | 1:A:33:LYS:HD2 | 1:A:34:ASN:H | 14 | 0.78 | 0.38 | 0.67 |
| (1,246) | 1:A:33:LYS:HD3 | 1:A:34:ASN:H | 14 | 0.78 | 0.38 | 0.67 |
| (1,223) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:36:TRP:H | 14 | 0.6 | 0.38 | 0.46 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG21 | 1:A:6:PHE:H | 14 | 0.56 | 0.16 | 0.55 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG22 | 1:A:6:PHE:H | 14 | 0.56 | 0.16 | 0.55 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG23 | 1:A:6:PHE:H | 14 | 0.56 | 0.16 | 0.55 |
| (1,291) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:25:TRP:HE3 | 14 | 0.56 | 0.36 | 0.45 |
| (1,217) | 1:A:1:TYR:HA | 1:A:3:GLU:H | 14 | 0.52 | 0.27 | 0.55 |
| (1,220) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:36:TRP:H | 14 | 0.43 | 0.19 | 0.41 |
| (1,47) | 1:A:30:LYS:HA | 1:A:31:GLY:H | 14 | 0.36 | 0.04 | 0.37 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD11 | 14 | 0.31 | 0.06 | 0.32 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD12 | 14 | 0.31 | 0.06 | 0.32 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD13 | 14 | 0.31 | 0.06 | 0.32 |
| (1,183) | 1:A:9:ASP:H | 1:A:10:TYR:H | 14 | 0.29 | 0.08 | 0.3 |
| (1,75) | 1:A:39:ASN:HA | 1:A:40:ILE:H | 14 | 0.2 | 0.03 | 0.2 |
| (1,184) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:H | 14 | 0.19 | 0.04 | 0.19 |
| (1,95) | 1:A:1:TYR:HA | 1:A:2:ALA:H | 14 | 0.14 | 0.04 | 0.14 |
| (1,293) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:22:PHE:HE1 | 14 | 0.13 | 0.01 | 0.14 |
| (1,293) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:22:PHE:HE2 | 14 | 0.13 | 0.01 | 0.14 |
| (1,67) | 1:A:36:TRP:HA | 1:A:37:LYS:H | 14 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,383) | 1:A:36:TRP:HD1 | 1:A:36:TRP:HE1 | 14 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,449) | 1:A:28:ALA:HB1 | 1:A:29:GLN:HE21 | 13 | 2.5 | 0.72 | 2.71 |
| (1,449) | 1:A:28:ALA:HB2 | 1:A:29:GLN:HE21 | 13 | 2.5 | 0.72 | 2.71 |
| (1,449) | 1:A:28:ALA:HB3 | 1:A:29:GLN:HE21 | 13 | 2.5 | 0.72 | 2.71 |
| (2,8) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:4:GLY:HA2 | 13 | 2.17 | 1.11 | 2.6 |
| (2,8) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:4:GLY:HA2 | 13 | 2.17 | 1.11 | 2.6 |
| (1,328) | 1:A:34:ASN:HD22 | 1:A:38:HIS:HB2 | 13 | 1.81 | 0.71 | 1.71 |
| (1,376) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HE22 | 13 | 1.8 | 0.65 | 2.05 |
| (1,376) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HE21 | 13 | 1.8 | 0.65 | 2.05 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG21 | 13 | 1.67 | 0.54 | 1.53 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG22 | 13 | 1.67 | 0.54 | 1.53 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG23 | 13 | 1.67 | 0.54 | 1.53 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:41:THR:HG21 | 13 | 1.67 | 0.54 | 1.53 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:41:THR:HG22 | 13 | 1.67 | 0.54 | 1.53 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:41:THR:HG23 | 13 | 1.67 | 0.54 | 1.53 |
| (1,90) | 1:A:32:LYS:HB3 | 1:A:33:LYS:H | 13 | 1.24 | 0.71 | 1.65 |
| (1,343) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:36:TRP:HD1 | 13 | 1.22 | 0.48 | 1.09 |
| (1,420) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HE1 | 13 | 1.2 | 0.28 | 1.11 |
| (1,420) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HE2 | 13 | 1.2 | 0.28 | 1.11 |
| (1,420) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HE3 | 13 | 1.2 | 0.28 | 1.11 |
| (1,276) | 1:A:36:TRP:HA | 1:A:36:TRP:HE3 | 13 | 1.17 | 0.42 | 1.0 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,172) | 1:A:4:GLY:H | 1:A:6:PHE:H | 13 | 0.97 | 0.31 | 1.07 |
| (1,249) | 1:A:37:LYS:HD2 | 1:A:38:HIS:H | 13 | 0.82 | 0.34 | 0.81 |
| (1,249) | 1:A:37:LYS:HD3 | 1:A:38:HIS:H | 13 | 0.82 | 0.34 | 0.81 |
| (1,243) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HG2 | 13 | 0.78 | 0.13 | 0.81 |
| (1,243) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HG3 | 13 | 0.78 | 0.13 | 0.81 |
| (1,341) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:H | 13 | 0.77 | 0.28 | 0.83 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:20:GLN:HB2 | 13 | 0.73 | 0.32 | 0.68 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:20:GLN:HB3 | 13 | 0.73 | 0.32 | 0.68 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HB2 | 13 | 0.73 | 0.32 | 0.68 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HB3 | 13 | 0.73 | 0.32 | 0.68 |
| (2,34) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:28:ALA:HB1 | 13 | 0.54 | 0.18 | 0.5 |
| (2,34) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:28:ALA:HB2 | 13 | 0.54 | 0.18 | 0.5 |
| (2,34) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:28:ALA:HB3 | 13 | 0.54 | 0.18 | 0.5 |
| (1,7) | 1:A:6:PHE:HB2 | 1:A:7:ILE:H | 13 | 0.35 | 0.1 | 0.33 |
| (1,7) | 1:A:6:PHE:HB3 | 1:A:7:ILE:H | 13 | 0.35 | 0.1 | 0.33 |
| (1,89) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HB3 | 13 | 0.33 | 0.4 | 0.23 |
| (1,240) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG2 | 13 | 0.31 | 0.05 | 0.28 |
| (1,240) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG3 | 13 | 0.31 | 0.05 | 0.28 |
| (1,272) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG12 | 12 | 1.74 | 0.99 | 1.5 |
| (1,233) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HG13 | 12 | 1.31 | 0.73 | 1.1 |
| (1,479) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HD11 | 12 | 1.15 | 0.67 | 0.76 |
| (1,479) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HD12 | 12 | 1.15 | 0.67 | 0.76 |
| (1,479) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HD13 | 12 | 1.15 | 0.67 | 0.76 |
| (1,199) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:ALA:H | 12 | 0.75 | 0.55 | 0.53 |
| (1,332) | 1:A:38:HIS:HA | 1:A:38:HIS:HD2 | 12 | 0.72 | 0.39 | 0.84 |
| (1,257) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HD2 | 12 | 0.61 | 0.1 | 0.61 |
| (1,257) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HD3 | 12 | 0.61 | 0.1 | 0.61 |
| (1,174) | 1:A:38:HIS:H | 1:A:39:ASN:H | 12 | 0.4 | 0.17 | 0.34 |
| (1,188) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:31:GLY:H | 12 | 0.37 | 0.25 | 0.26 |
| (1,237) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HD2 | 12 | 0.33 | 0.15 | 0.3 |
| (1,237) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HD3 | 12 | 0.33 | 0.15 | 0.3 |
| (1,21) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HB | 12 | 0.2 | 0.07 | 0.2 |
| (1,382) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:25:TRP:HE1 | 12 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:13:ALA:HB1 | 11 | 1.89 | 0.84 | 1.76 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:13:ALA:HB2 | 11 | 1.89 | 0.84 | 1.76 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:13:ALA:HB3 | 11 | 1.89 | 0.84 | 1.76 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:13:ALA:HB1 | 11 | 1.89 | 0.84 | 1.76 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:13:ALA:HB2 | 11 | 1.89 | 0.84 | 1.76 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:13:ALA:HB3 | 11 | 1.89 | 0.84 | 1.76 |
| (2,39) | 1:A:28:ALA:HB1 | 1:A:29:GLN:HE22 | 11 | 1.2 | 0.33 | 1.06 |
| (2,39) | 1:A:28:ALA:HB2 | 1:A:29:GLN:HE22 | 11 | 1.2 | 0.33 | 1.06 |
| (2,39) | 1:A:28:ALA:HB3 | 1:A:29:GLN:HE22 | 11 | 1.2 | 0.33 | 1.06 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,421) | 1:A:14:MET:HE1 | 1:A:15:ASP:H | 11 | 0.83 | 0.35 | 0.74 |
| (1,421) | 1:A:14:MET:HE2 | 1:A:15:ASP:H | 11 | 0.83 | 0.35 | 0.74 |
| (1,421) | 1:A:14:MET:HE3 | 1:A:15:ASP:H | 11 | 0.83 | 0.35 | 0.74 |
| (1,259) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:31:GLY:H | 11 | 0.82 | 0.47 | 0.8 |
| (1,259) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:31:GLY:H | 11 | 0.82 | 0.47 | 0.8 |
| (1,266) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HG2 | 11 | 0.76 | 0.01 | 0.76 |
| (1,266) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HG3 | 11 | 0.76 | 0.01 | 0.76 |
| (1,416) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HD11 | 11 | 0.69 | 0.34 | 0.76 |
| (1,416) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HD12 | 11 | 0.69 | 0.34 | 0.76 |
| (1,416) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HD13 | 11 | 0.69 | 0.34 | 0.76 |
| (1,107) | 1:A:38:HIS:HA | 1:A:39:ASN:H | 11 | 0.64 | 0.02 | 0.64 |
| (1,187) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:38:HIS:H | 11 | 0.57 | 0.45 | 0.44 |
| (1,200) | 1:A:14:MET:H | 1:A:15:ASP:H | 11 | 0.51 | 0.15 | 0.51 |
| (1,334) | 1:A:14:MET:HA | 1:A:18:HIS:HD2 | 11 | 0.44 | 0.23 | 0.4 |
| (1,236) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HG2 | 11 | 0.34 | 0.03 | 0.33 |
| (1,236) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HG3 | 11 | 0.34 | 0.03 | 0.33 |
| (1,348) | 1:A:36:TRP:HD1 | 1:A:37:LYS:H | 11 | 0.32 | 0.07 | 0.34 |
| (1,58) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HB2 | 11 | 0.23 | 0.09 | 0.22 |
| (1,245) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD2 | 10 | 0.79 | 0.28 | 0.92 |
| (1,245) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD3 | 10 | 0.79 | 0.28 | 0.92 |
| (1,73) | 1:A:38:HIS:HB2 | 1:A:39:ASN:H | 10 | 0.73 | 0.65 | 0.32 |
| (1,73) | 1:A:38:HIS:HB3 | 1:A:39:ASN:H | 10 | 0.73 | 0.65 | 0.32 |
| (1,215) | 1:A:36:TRP:H | 1:A:38:HIS:H | 10 | 0.59 | 0.42 | 0.48 |
| (2,13) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HG | 10 | 0.41 | 0.19 | 0.4 |
| (2,13) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HG | 10 | 0.41 | 0.19 | 0.4 |
| (1,147) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:24:ASN:H | 10 | 0.2 | 0.05 | 0.21 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:5:THR:HG21 | 9 | 2.47 | 0.51 | 2.52 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:5:THR:HG22 | 9 | 2.47 | 0.51 | 2.52 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:5:THR:HG23 | 9 | 2.47 | 0.51 | 2.52 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:5:THR:HG21 | 9 | 2.47 | 0.51 | 2.52 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:5:THR:HG22 | 9 | 2.47 | 0.51 | 2.52 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:5:THR:HG23 | 9 | 2.47 | 0.51 | 2.52 |
| (1,117) | 1:A:11:SER:HB2 | 1:A:12:ILE:H | 9 | 1.6 | 0.57 | 1.86 |
| (1,401) | 1:A:12:ILE:HB | 1:A:12:ILE:HG12 | 9 | 0.68 | 0.01 | 0.68 |
| (1,135) | 1:A:5:THR:HB | 1:A:8:SER:H | 9 | 0.41 | 0.32 | 0.26 |
| (1,409) | 1:A:2:ALA:HB1 | 1:A:3:GLU:H | 9 | 0.37 | 0.08 | 0.4 |
| (1,409) | 1:A:2:ALA:HB2 | 1:A:3:GLU:H | 9 | 0.37 | 0.08 | 0.4 |
| (1,409) | 1:A:2:ALA:HB3 | 1:A:3:GLU:H | 9 | 0.37 | 0.08 | 0.4 |
| (1,143) | 1:A:8:SER:HA | 1:A:9:ASP:H | 9 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HE1 | 8 | 1.2 | 0.79 | 1.06 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HE2 | 8 | 1.2 | 0.79 | 1.06 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HE3 | 8 | 1.2 | 0.79 | 1.06 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HE1 | 8 | 1.2 | 0.79 | 1.06 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HE2 | 8 | 1.2 | 0.79 | 1.06 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HE3 | 8 | 1.2 | 0.79 | 1.06 |
| (1,260) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:34:ASN:H | 8 | 0.61 | 0.43 | 0.47 |
| (1,260) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:34:ASN:H | 8 | 0.61 | 0.43 | 0.47 |
| (1,165) | 1:A:9:ASP:HB2 | 1:A:11:SER:H | 8 | 0.58 | 0.44 | 0.35 |
| (1,165) | 1:A:9:ASP:HB3 | 1:A:11:SER:H | 8 | 0.58 | 0.44 | 0.35 |
| (1,139) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:42:GLN:HB3 | 8 | 0.45 | 0.39 | 0.29 |
| (2,5) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:12:ILE:HA | 8 | 0.39 | 0.16 | 0.34 |
| (2,5) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:12:ILE:HA | 8 | 0.39 | 0.16 | 0.34 |
| (1,434) | 1:A:13:ALA:HB1 | 1:A:14:MET:H | 8 | 0.37 | 0.07 | 0.4 |
| (1,434) | 1:A:13:ALA:HB2 | 1:A:14:MET:H | 8 | 0.37 | 0.07 | 0.4 |
| (1,434) | 1:A:13:ALA:HB3 | 1:A:14:MET:H | 8 | 0.37 | 0.07 | 0.4 |
| (1,197) | 1:A:8:SER:H | 1:A:9:ASP:H | 8 | 0.36 | 0.25 | 0.26 |
| (1,79) | 1:A:14:MET:HA | 1:A:17:ILE:H | 8 | 0.34 | 0.22 | 0.29 |
| (1,19) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:15:ASP:H | 8 | 0.28 | 0.03 | 0.28 |
| (1,19) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:15:ASP:H | 8 | 0.28 | 0.03 | 0.28 |
| (1,77) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:40:ILE:HB | 8 | 0.25 | 0.1 | 0.26 |
| (1,214) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:25:TRP:H | 8 | 0.23 | 0.05 | 0.24 |
| (1,94) | 1:A:24:ASN:HB2 | 1:A:25:TRP:H | 8 | 0.18 | 0.08 | 0.15 |
| (1,102) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HA | 8 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG21 | 1:A:10:TYR:HD1 | 7 | 1.4 | 0.53 | 1.34 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG21 | 1:A:10:TYR:HD2 | 7 | 1.4 | 0.53 | 1.34 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG22 | 1:A:10:TYR:HD1 | 7 | 1.4 | 0.53 | 1.34 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG22 | 1:A:10:TYR:HD2 | 7 | 1.4 | 0.53 | 1.34 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG23 | 1:A:10:TYR:HD1 | 7 | 1.4 | 0.53 | 1.34 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG23 | 1:A:10:TYR:HD2 | 7 | 1.4 | 0.53 | 1.34 |
| (1,248) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:37:LYS:HD2 | 7 | 1.12 | 0.17 | 1.1 |
| (1,248) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:37:LYS:HD3 | 7 | 1.12 | 0.17 | 1.1 |
| (1,235) | 1:A:14:MET:HG2 | 1:A:15:ASP:H | 7 | 0.77 | 0.36 | 0.85 |
| (1,235) | 1:A:14:MET:HG3 | 1:A:15:ASP:H | 7 | 0.77 | 0.36 | 0.85 |
| (1,247) | 1:A:30:LYS:HG2 | 1:A:31:GLY:H | 7 | 0.76 | 0.16 | 0.73 |
| (1,247) | 1:A:30:LYS:HG3 | 1:A:31:GLY:H | 7 | 0.76 | 0.16 | 0.73 |
| (1,436) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:40:ILE:HD11 | 7 | 0.63 | 0.34 | 0.65 |
| (1,436) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:40:ILE:HD12 | 7 | 0.63 | 0.34 | 0.65 |
| (1,436) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:40:ILE:HD13 | 7 | 0.63 | 0.34 | 0.65 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:5:THR:HG21 | 7 | 0.61 | 0.37 | 0.49 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:5:THR:HG22 | 7 | 0.61 | 0.37 | 0.49 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:5:THR:HG23 | 7 | 0.61 | 0.37 | 0.49 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:5:THR:HG21 | 7 | 0.61 | 0.37 | 0.49 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:5:THR:HG22 | 7 | 0.61 | 0.37 | 0.49 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:5:THR:HG23 | 7 | 0.61 | 0.37 | 0.49 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,269) | 1:A:20:GLN:H | 1:A:20:GLN:HG2 | 7 | 0.35 | 0.01 | 0.35 |
| (1,269) | 1:A:20:GLN:H | 1:A:20:GLN:HG3 | 7 | 0.35 | 0.01 | 0.35 |
| (1,203) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HB | 7 | 0.3 | 0.12 | 0.27 |
| (1,250) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:37:LYS:HG2 | 7 | 0.2 | 0.04 | 0.19 |
| (1,250) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:37:LYS:HG3 | 7 | 0.2 | 0.04 | 0.19 |
| (1,397) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG12 | 6 | 0.61 | 0.35 | 0.58 |
| (1,397) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG13 | 6 | 0.61 | 0.35 | 0.58 |
| (1,397) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG12 | 6 | 0.61 | 0.35 | 0.58 |
| (1,397) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG13 | 6 | 0.61 | 0.35 | 0.58 |
| (1,80) | 1:A:16:LYS:HA | 1:A:19:GLN:H | 6 | 0.45 | 0.15 | 0.5 |
| (1,435) | 1:A:41:THR:H | 1:A:41:THR:HG21 | 6 | 0.41 | 0.03 | 0.4 |
| (1,435) | 1:A:41:THR:H | 1:A:41:THR:HG22 | 6 | 0.41 | 0.03 | 0.4 |
| (1,435) | 1:A:41:THR:H | 1:A:41:THR:HG23 | 6 | 0.41 | 0.03 | 0.4 |
| (1,198) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:H | 6 | 0.4 | 0.28 | 0.33 |
| (1,1) | 1:A:2:ALA:HA | 1:A:3:GLU:H | 6 | 0.34 | 0.01 | 0.34 |
| (1,115) | 1:A:13:ALA:HA | 1:A:14:MET:H | 6 | 0.27 | 0.06 | 0.28 |
| (1,17) | 1:A:15:ASP:H | 1:A:15:ASP:HB3 | 6 | 0.21 | 0.02 | 0.21 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:28:ALA:HB1 | 6 | 0.19 | 0.06 | 0.18 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:28:ALA:HB2 | 6 | 0.19 | 0.06 | 0.18 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:28:ALA:HB3 | 6 | 0.19 | 0.06 | 0.18 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:28:ALA:HB1 | 6 | 0.19 | 0.06 | 0.18 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:28:ALA:HB2 | 6 | 0.19 | 0.06 | 0.18 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:28:ALA:HB3 | 6 | 0.19 | 0.06 | 0.18 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:28:ALA:HB1 | 6 | 0.19 | 0.06 | 0.18 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:28:ALA:HB2 | 6 | 0.19 | 0.06 | 0.18 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:28:ALA:HB3 | 6 | 0.19 | 0.06 | 0.18 |
| (1,228) | 1:A:5:THR:H | 1:A:5:THR:HA | 6 | 0.15 | 0.04 | 0.14 |
| (1,212) | 1:A:6:PHE:HA | 1:A:10:TYR:H | 5 | 0.82 | 0.41 | 0.83 |
| (2,9) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HB2 | 5 | 0.75 | 0.46 | 0.62 |
| (2,9) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HB3 | 5 | 0.75 | 0.46 | 0.62 |
| (2,9) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HB2 | 5 | 0.75 | 0.46 | 0.62 |
| (2,9) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HB3 | 5 | 0.75 | 0.46 | 0.62 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HD21 | 5 | 0.45 | 0.34 | 0.37 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HD22 | 5 | 0.45 | 0.34 | 0.37 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HD23 | 5 | 0.45 | 0.34 | 0.37 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HD21 | 5 | 0.45 | 0.34 | 0.37 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HD22 | 5 | 0.45 | 0.34 | 0.37 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HD23 | 5 | 0.45 | 0.34 | 0.37 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HD21 | 5 | 0.45 | 0.34 | 0.37 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HD22 | 5 | 0.45 | 0.34 | 0.37 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HD23 | 5 | 0.45 | 0.34 | 0.37 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HD11 | 5 | 0.45 | 0.34 | 0.37 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HD12 | 5 | 0.45 | 0.34 | 0.37 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HD13 | 5 | 0.45 | 0.34 | 0.37 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HD11 | 5 | 0.45 | 0.34 | 0.37 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HD12 | 5 | 0.45 | 0.34 | 0.37 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HD13 | 5 | 0.45 | 0.34 | 0.37 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HD11 | 5 | 0.45 | 0.34 | 0.37 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HD12 | 5 | 0.45 | 0.34 | 0.37 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HD13 | 5 | 0.45 | 0.34 | 0.37 |
| (1,254) | 1:A:33:LYS:HG2 | 1:A:34:ASN:H | 5 | 0.43 | 0.12 | 0.4 |
| (1,254) | 1:A:33:LYS:HG3 | 1:A:34:ASN:H | 5 | 0.43 | 0.12 | 0.4 |
| (1,448) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:28:ALA:HB1 | 5 | 0.38 | 0.21 | 0.31 |
| (1,448) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:28:ALA:HB2 | 5 | 0.38 | 0.21 | 0.31 |
| (1,448) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:28:ALA:HB3 | 5 | 0.38 | 0.21 | 0.31 |
| (1,219) | 1:A:30:LYS:HA | 1:A:32:LYS:H | 5 | 0.35 | 0.18 | 0.39 |
| (1,84) | 1:A:34:ASN:HA | 1:A:37:LYS:H | 5 | 0.32 | 0.11 | 0.34 |
| (1,110) | 1:A:5:THR:HB | 1:A:6:PHE:H | 5 | 0.29 | 0.26 | 0.17 |
| (1,402) | 1:A:33:LYS:HB3 | 1:A:33:LYS:HD2 | 5 | 0.15 | 0.06 | 0.14 |
| (1,402) | 1:A:33:LYS:HB3 | 1:A:33:LYS:HD3 | 5 | 0.15 | 0.06 | 0.14 |
| (1,41) | 1:A:25:TRP:H | 1:A:25:TRP:HB3 | 5 | 0.15 | 0.01 | 0.15 |
| (1,61) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:35:ASP:HB3 | 5 | 0.15 | 0.04 | 0.13 |
| (1,61) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:35:ASP:HB2 | 5 | 0.15 | 0.04 | 0.13 |
| (1,385) | 1:A:25:TRP:HE1 | 1:A:29:GLN:HE22 | 4 | 0.93 | 0.45 | 1.08 |
| (1,385) | 1:A:25:TRP:HE1 | 1:A:29:GLN:HE21 | 4 | 0.93 | 0.45 | 1.08 |
| (1,51) | 1:A:30:LYS:HB2 | 1:A:31:GLY:H | 4 | 0.55 | 0.19 | 0.56 |
| (1,51) | 1:A:30:LYS:HB3 | 1:A:31:GLY:H | 4 | 0.55 | 0.19 | 0.56 |
| (1,239) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:H | 4 | 0.35 | 0.01 | 0.34 |
| (1,239) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:H | 4 | 0.35 | 0.01 | 0.34 |
| (1,218) | 1:A:29:GLN:HA | 1:A:31:GLY:H | 4 | 0.32 | 0.13 | 0.35 |
| (1,119) | 1:A:11:SER:HA | 1:A:14:MET:H | 4 | 0.32 | 0.15 | 0.31 |
| (1,437) | 1:A:17:ILE:HG21 | 1:A:18:HIS:H | 4 | 0.25 | 0.05 | 0.26 |
| (1,437) | 1:A:17:ILE:HG22 | 1:A:18:HIS:H | 4 | 0.25 | 0.05 | 0.26 |
| (1,437) | 1:A:17:ILE:HG23 | 1:A:18:HIS:H | 4 | 0.25 | 0.05 | 0.26 |
| (1,230) | 1:A:15:ASP:HA | 1:A:18:HIS:H | 4 | 0.23 | 0.07 | 0.26 |
| (1,346) | 1:A:36:TRP:H | 1:A:36:TRP:HD1 | 4 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (1,36) | 1:A:21:ASP:HB2 | 1:A:22:PHE:H | 4 | 0.16 | 0.02 | 0.15 |
| (1,322) | 1:A:6:PHE:HE1 | 1:A:7:ILE:HG12 | 3 | 2.97 | 0.34 | 2.74 |
| (1,322) | 1:A:6:PHE:HE2 | 1:A:7:ILE:HG12 | 3 | 2.97 | 0.34 | 2.74 |
| (1,277) | 1:A:36:TRP:HE3 | 1:A:37:LYS:HA | 3 | 1.81 | 0.97 | 2.43 |
| (2,27) | 1:A:6:PHE:HE1 | 1:A:7:ILE:HG21 | 3 | 1.4 | 0.26 | 1.29 |
| (2,27) | 1:A:6:PHE:HE1 | 1:A:7:ILE:HG22 | 3 | 1.4 | 0.26 | 1.29 |
| (2,27) | 1:A:6:PHE:HE1 | 1:A:7:ILE:HG23 | 3 | 1.4 | 0.26 | 1.29 |
| (2,27) | 1:A:6:PHE:HE2 | 1:A:7:ILE:HG21 | 3 | 1.4 | 0.26 | 1.29 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (2,27) | 1:A:6:PHE:HE2 | 1:A:7:ILE:HG22 | 3 | 1.4 | 0.26 | 1.29 |
| (2,27) | 1:A:6:PHE:HE2 | 1:A:7:ILE:HG23 | 3 | 1.4 | 0.26 | 1.29 |
| (1,406) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:7:ILE:HB | 3 | 0.95 | 0.27 | 0.88 |
| (1,406) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:7:ILE:HB | 3 | 0.95 | 0.27 | 0.88 |
| (2,28) | 1:A:6:PHE:HE1 | 1:A:7:ILE:HD11 | 3 | 0.91 | 0.59 | 0.74 |
| (2,28) | 1:A:6:PHE:HE1 | 1:A:7:ILE:HD12 | 3 | 0.91 | 0.59 | 0.74 |
| (2,28) | 1:A:6:PHE:HE1 | 1:A:7:ILE:HD13 | 3 | 0.91 | 0.59 | 0.74 |
| (2,28) | 1:A:6:PHE:HE2 | 1:A:7:ILE:HD11 | 3 | 0.91 | 0.59 | 0.74 |
| (2,28) | 1:A:6:PHE:HE2 | 1:A:7:ILE:HD12 | 3 | 0.91 | 0.59 | 0.74 |
| (2,28) | 1:A:6:PHE:HE2 | 1:A:7:ILE:HD13 | 3 | 0.91 | 0.59 | 0.74 |
| (1,321) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:7:ILE:HG12 | 3 | 0.85 | 0.39 | 0.58 |
| (1,321) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:7:ILE:HG12 | 3 | 0.85 | 0.39 | 0.58 |
| (1,345) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:8:SER:H | 3 | 0.67 | 0.09 | 0.63 |
| (1,345) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:8:SER:H | 3 | 0.67 | 0.09 | 0.63 |
| (1,213) | 1:A:8:SER:H | 1:A:10:TYR:H | 3 | 0.52 | 0.17 | 0.44 |
| (2,11) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HG2 | 3 | 0.41 | 0.33 | 0.24 |
| (2,11) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HG3 | 3 | 0.41 | 0.33 | 0.24 |
| (2,11) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HG2 | 3 | 0.41 | 0.33 | 0.24 |
| (2,11) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HG3 | 3 | 0.41 | 0.33 | 0.24 |
| (1,325) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:18:HIS:HD2 | 3 | 0.39 | 0.18 | 0.39 |
| (1,325) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:18:HIS:HD2 | 3 | 0.39 | 0.18 | 0.39 |
| (1,428) | 1:A:28:ALA:HB1 | 1:A:29:GLN:H | 3 | 0.37 | 0.04 | 0.37 |
| (1,428) | 1:A:28:ALA:HB2 | 1:A:29:GLN:H | 3 | 0.37 | 0.04 | 0.37 |
| (1,428) | 1:A:28:ALA:HB3 | 1:A:29:GLN:H | 3 | 0.37 | 0.04 | 0.37 |
| (1,251) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:40:ILE:HG12 | 3 | 0.37 | 0.07 | 0.33 |
| (1,251) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:40:ILE:HG13 | 3 | 0.37 | 0.07 | 0.33 |
| (1,150) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:42:GLN:HB2 | 3 | 0.34 | 0.15 | 0.44 |
| (1,234) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HG2 | 3 | 0.33 | 0.07 | 0.32 |
| (1,234) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HG3 | 3 | 0.33 | 0.07 | 0.32 |
| (1,108) | 1:A:3:GLU:HA | 1:A:6:PHE:H | 3 | 0.23 | 0.08 | 0.2 |
| (1,286) | 1:A:25:TRP:HB2 | 1:A:25:TRP:HE3 | 3 | 0.16 | 0.07 | 0.11 |
| (1,286) | 1:A:25:TRP:HB3 | 1:A:25:TRP:HE3 | 3 | 0.16 | 0.07 | 0.11 |
| (1,231) | 1:A:3:GLU:H | 1:A:3:GLU:HG2 | 3 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,231) | 1:A:3:GLU:H | 1:A:3:GLU:HG3 | 3 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,305) | 1:A:24:ASN:HB2 | 1:A:24:ASN:HD21 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,305) | 1:A:24:ASN:HB3 | 1:A:24:ASN:HD21 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,12) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HB | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,356) | 1:A:36:TRP:HZ3 | 1:A:36:TRP:HE3 | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,127) | 1:A:29:GLN:HA | 1:A:32:LYS:H | 2 | 1.37 | 0.61 | 1.37 |
| (2,36) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:12:ILE:HD11 | 2 | 0.99 | 0.71 | 0.99 |
| (2,36) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:12:ILE:HD12 | 2 | 0.99 | 0.71 | 0.99 |
| (2,36) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:12:ILE:HD13 | 2 | 0.99 | 0.71 | 0.99 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

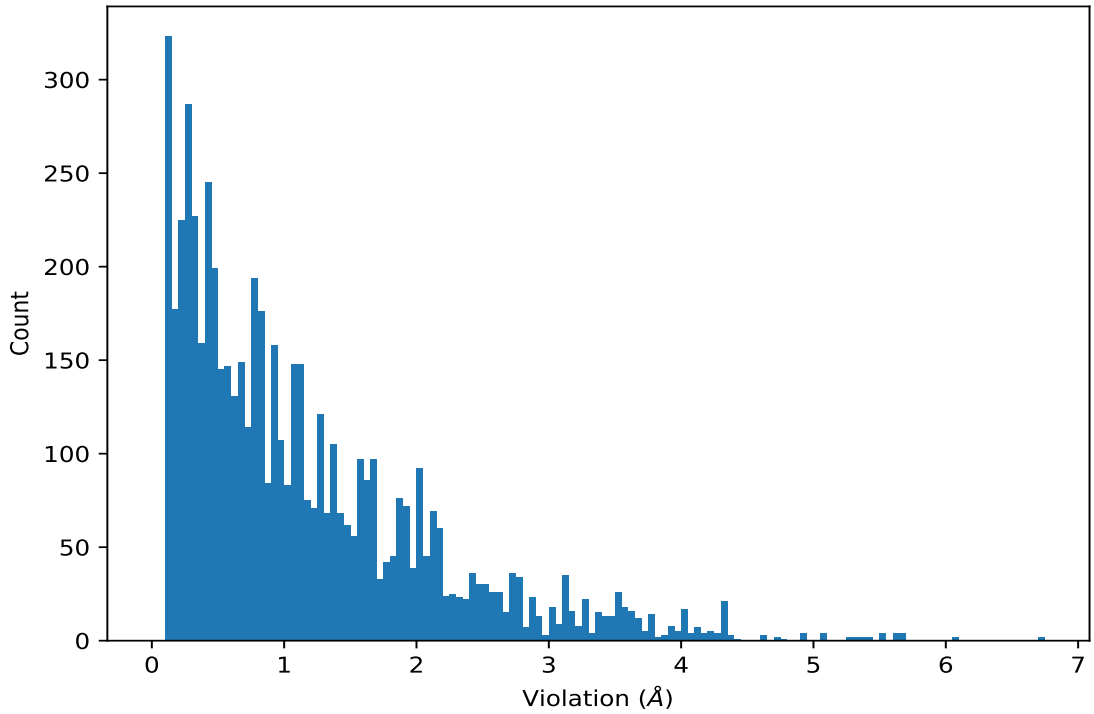
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (2,36) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 2 | 0.99 | 0.71 | 0.99 |
| (2,36) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 2 | 0.99 | 0.71 | 0.99 |
| (2,36) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 2 | 0.99 | 0.71 | 0.99 |
| (1,287) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HA | 2 | 0.83 | 0.19 | 0.83 |
| (1,486) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 2 | 0.62 | 0.15 | 0.62 |
| (1,486) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 2 | 0.62 | 0.15 | 0.62 |
| (1,486) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 2 | 0.62 | 0.15 | 0.62 |
| (1,486) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:26:LEU:HD11 | 2 | 0.62 | 0.15 | 0.62 |
| (1,486) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:26:LEU:HD12 | 2 | 0.62 | 0.15 | 0.62 |
| (1,486) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:26:LEU:HD13 | 2 | 0.62 | 0.15 | 0.62 |
| (1,124) | 1:A:28:ALA:HA | 1:A:31:GLY:H | 2 | 0.58 | 0.13 | 0.58 |
| (1,71) | 1:A:37:LYS:HB2 | 1:A:38:HIS:H | 2 | 0.47 | 0.0 | 0.47 |
| (1,71) | 1:A:37:LYS:HB3 | 1:A:38:HIS:H | 2 | 0.47 | 0.0 | 0.47 |
| (1,148) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:21:ASP:H | 2 | 0.43 | 0.02 | 0.43 |
| (1,148) | 1:A:20:GLN:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 2 | 0.43 | 0.02 | 0.43 |
| (1,216) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:39:ASN:H | 2 | 0.29 | 0.01 | 0.29 |
| (1,140) | 1:A:41:THR:H | 1:A:41:THR:HB | 2 | 0.29 | 0.12 | 0.29 |
| (1,66) | 1:A:35:ASP:HA | 1:A:36:TRP:H | 2 | 0.26 | 0.09 | 0.26 |
| (1,166) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:11:SER:H | 2 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,111) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:34:ASN:H | 2 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (1,253) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HG2 | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,253) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HG3 | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,45) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HB2 | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,45) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HB3 | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,92) | 1:A:9:ASP:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 2 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,92) | 1:A:9:ASP:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 2 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,338) | 1:A:36:TRP:HE3 | 1:A:37:LYS:H | 2 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,72) | 1:A:38:HIS:H | 1:A:38:HIS:HA | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,364) | 1:A:25:TRP:HZ3 | 1:A:25:TRP:HE3 | 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) |
|---|---|---|---|---|
| (1,369) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:25:TRP:HH2 | 13 | 6.71 |
| (1,369) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:25:TRP:HH2 | 13 | 6.71 |
| (1,369) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:25:TRP:HH2 | 8 | 6.07 |
| (1,369) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:25:TRP:HH2 | 8 | 6.07 |
| (1,369) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:25:TRP:HH2 | 14 | 5.69 |
| (1,369) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:25:TRP:HH2 | 14 | 5.69 |
| (1,369) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:25:TRP:HH2 | 3 | 5.66 |
| (1,369) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:25:TRP:HH2 | 3 | 5.66 |
| (1,369) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:25:TRP:HH2 | 4 | 5.61 |
| (1,369) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:25:TRP:HH2 | 4 | 5.61 |
| (1,369) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:25:TRP:HH2 | 15 | 5.61 |
| (1,369) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:25:TRP:HH2 | 15 | 5.61 |
| (1,369) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:25:TRP:HH2 | 2 | 5.52 |
| (1,369) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:25:TRP:HH2 | 2 | 5.52 |
| (1,369) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:25:TRP:HH2 | 5 | 5.52 |
| (1,369) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:25:TRP:HH2 | 5 | 5.52 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,369) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:25:TRP:HH2 | 12 | 5.44 |
| (1,369) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:25:TRP:HH2 | 12 | 5.44 |
| (1,369) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:25:TRP:HH2 | 11 | 5.38 |
| (1,369) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:25:TRP:HH2 | 11 | 5.38 |
| (1,369) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:25:TRP:HH2 | 10 | 5.32 |
| (1,369) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:25:TRP:HH2 | 10 | 5.32 |
| (1,369) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:25:TRP:HH2 | 6 | 5.27 |
| (1,369) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:25:TRP:HH2 | 6 | 5.27 |
| (1,369) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:25:TRP:HH2 | 7 | 5.1 |
| (1,369) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:25:TRP:HH2 | 7 | 5.1 |
| (1,369) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:25:TRP:HH2 | 1 | 5.06 |
| (1,369) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:25:TRP:HH2 | 1 | 5.06 |
| (1,367) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 13 | 4.93 |
| (1,367) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 13 | 4.93 |
| (1,369) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:25:TRP:HH2 | 9 | 4.92 |
| (1,369) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:25:TRP:HH2 | 9 | 4.92 |
| (1,327) | 1:A:34:ASN:HD22 | 1:A:38:HIS:HA | 7 | 4.75 |
| (1,368) | 1:A:22:PHE:HD1 | 1:A:25:TRP:HH2 | 13 | 4.74 |
| (1,368) | 1:A:22:PHE:HD2 | 1:A:25:TRP:HH2 | 13 | 4.74 |
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG21 | 7 | 4.63 |
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG22 | 7 | 4.63 |
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG23 | 7 | 4.63 |
| (1,327) | 1:A:34:ASN:HD22 | 1:A:38:HIS:HA | 10 | 4.4 |
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG21 | 3 | 4.37 |
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG22 | 3 | 4.37 |
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG23 | 3 | 4.37 |
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG21 | 11 | 4.34 |
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG22 | 11 | 4.34 |
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG23 | 11 | 4.34 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG21 | 7 | 4.32 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG22 | 7 | 4.32 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG23 | 7 | 4.32 |
| (1,363) | 1:A:25:TRP:HZ3 | 1:A:25:TRP:HD1 | 7 | 4.32 |
| (1,363) | 1:A:25:TRP:HZ3 | 1:A:25:TRP:HD1 | 10 | 4.32 |
| (1,363) | 1:A:25:TRP:HZ3 | 1:A:25:TRP:HD1 | 14 | 4.32 |
| (1,363) | 1:A:25:TRP:HZ3 | 1:A:25:TRP:HD1 | 1 | 4.31 |
| (1,363) | 1:A:25:TRP:HZ3 | 1:A:25:TRP:HD1 | 2 | 4.31 |
| (1,363) | 1:A:25:TRP:HZ3 | 1:A:25:TRP:HD1 | 3 | 4.31 |
| (1,363) | 1:A:25:TRP:HZ3 | 1:A:25:TRP:HD1 | 4 | 4.31 |
| (1,363) | 1:A:25:TRP:HZ3 | 1:A:25:TRP:HD1 | 5 | 4.31 |
| (1,363) | 1:A:25:TRP:HZ3 | 1:A:25:TRP:HD1 | 6 | 4.31 |
| (1,363) | 1:A:25:TRP:HZ3 | 1:A:25:TRP:HD1 | 8 | 4.31 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,363) | 1:A:25:TRP:HZ3 | 1:A:25:TRP:HD1 | 9 | 4.31 |
| (1,363) | 1:A:25:TRP:HZ3 | 1:A:25:TRP:HD1 | 11 | 4.31 |
| (1,363) | 1:A:25:TRP:HZ3 | 1:A:25:TRP:HD1 | 12 | 4.31 |
| (1,363) | 1:A:25:TRP:HZ3 | 1:A:25:TRP:HD1 | 13 | 4.31 |
| (1,363) | 1:A:25:TRP:HZ3 | 1:A:25:TRP:HD1 | 15 | 4.31 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HG2 | 10 | 4.29 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HG3 | 10 | 4.29 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HG2 | 10 | 4.29 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HG3 | 10 | 4.29 |
| (1,327) | 1:A:34:ASN:HD22 | 1:A:38:HIS:HA | 11 | 4.23 |
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG21 | 14 | 4.21 |
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG22 | 14 | 4.21 |
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG23 | 14 | 4.21 |
| (1,327) | 1:A:34:ASN:HD22 | 1:A:38:HIS:HA | 14 | 4.2 |
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG21 | 8 | 4.18 |
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG22 | 8 | 4.18 |
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG23 | 8 | 4.18 |
| (1,327) | 1:A:34:ASN:HD22 | 1:A:38:HIS:HA | 2 | 4.16 |
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG21 | 1 | 4.14 |
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG22 | 1 | 4.14 |
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG23 | 1 | 4.14 |
| (1,312) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:3:GLU:HA | 12 | 4.13 |
| (1,312) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:3:GLU:HA | 12 | 4.13 |
| (1,367) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 8 | 4.11 |
| (1,367) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 8 | 4.11 |
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG21 | 12 | 4.09 |
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG22 | 12 | 4.09 |
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG23 | 12 | 4.09 |
| (1,327) | 1:A:34:ASN:HD22 | 1:A:38:HIS:HA | 9 | 4.06 |
| (1,368) | 1:A:22:PHE:HD1 | 1:A:25:TRP:HH2 | 8 | 4.03 |
| (1,368) | 1:A:22:PHE:HD2 | 1:A:25:TRP:HH2 | 8 | 4.03 |
| (1,362) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HD1 | 1 | 4.03 |
| (1,362) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HD1 | 3 | 4.03 |
| (1,362) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HD1 | 4 | 4.03 |
| (1,362) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HD1 | 5 | 4.03 |
| (1,362) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HD1 | 6 | 4.03 |
| (1,362) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HD1 | 7 | 4.03 |
| (1,362) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HD1 | 9 | 4.03 |
| (1,362) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HD1 | 13 | 4.03 |
| (1,362) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HD1 | 14 | 4.03 |
| (1,362) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HD1 | 2 | 4.02 |
| (1,362) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HD1 | 8 | 4.02 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,362) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HD1 | 10 | 4.02 |
| (1,362) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HD1 | 11 | 4.02 |
| (1,362) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HD1 | 12 | 4.02 |
| (1,362) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HD1 | 15 | 4.02 |
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG21 | 13 | 3.98 |
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG22 | 13 | 3.98 |
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG23 | 13 | 3.98 |
| (1,312) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:3:GLU:HA | 7 | 3.98 |
| (1,312) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:3:GLU:HA | 7 | 3.98 |
| (1,312) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:3:GLU:HA | 2 | 3.94 |
| (1,312) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:3:GLU:HA | 2 | 3.94 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG21 | 3 | 3.92 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG22 | 3 | 3.92 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG23 | 3 | 3.92 |
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG21 | 15 | 3.91 |
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG22 | 15 | 3.91 |
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG23 | 15 | 3.91 |
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG21 | 9 | 3.88 |
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG22 | 9 | 3.88 |
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG23 | 9 | 3.88 |
| (1,368) | 1:A:22:PHE:HD1 | 1:A:25:TRP:HH2 | 3 | 3.81 |
| (1,368) | 1:A:22:PHE:HD2 | 1:A:25:TRP:HH2 | 3 | 3.81 |
| (1,368) | 1:A:22:PHE:HD1 | 1:A:25:TRP:HH2 | 15 | 3.79 |
| (1,368) | 1:A:22:PHE:HD2 | 1:A:25:TRP:HH2 | 15 | 3.79 |
| (1,312) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:3:GLU:HA | 8 | 3.79 |
| (1,312) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:3:GLU:HA | 8 | 3.79 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG21 | 2 | 3.78 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG22 | 2 | 3.78 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG23 | 2 | 3.78 |
| (1,368) | 1:A:22:PHE:HD1 | 1:A:25:TRP:HH2 | 4 | 3.77 |
| (1,368) | 1:A:22:PHE:HD2 | 1:A:25:TRP:HH2 | 4 | 3.77 |
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG21 | 10 | 3.75 |
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG22 | 10 | 3.75 |
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG23 | 10 | 3.75 |
| (1,368) | 1:A:22:PHE:HD1 | 1:A:25:TRP:HH2 | 14 | 3.75 |
| (1,368) | 1:A:22:PHE:HD2 | 1:A:25:TRP:HH2 | 14 | 3.75 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG21 | 11 | 3.72 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG22 | 11 | 3.72 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG23 | 11 | 3.72 |
| (1,312) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:3:GLU:HA | 11 | 3.72 |
| (1,312) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:3:GLU:HA | 11 | 3.72 |
| (1,367) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 14 | 3.69 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,367) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 14 | 3.69 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE1 | 7 | 3.68 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE2 | 7 | 3.68 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE3 | 7 | 3.68 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE1 | 7 | 3.68 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE2 | 7 | 3.68 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE3 | 7 | 3.68 |
| (1,368) | 1:A:22:PHE:HD1 | 1:A:25:TRP:HH2 | 2 | 3.66 |
| (1,368) | 1:A:22:PHE:HD2 | 1:A:25:TRP:HH2 | 2 | 3.66 |
| (1,367) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 4 | 3.66 |
| (1,367) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 4 | 3.66 |
| (1,388) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:HE21 | 14 | 3.65 |
| (1,388) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:HE22 | 14 | 3.65 |
| (1,367) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 15 | 3.65 |
| (1,367) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 15 | 3.65 |
| (1,367) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 3 | 3.64 |
| (1,367) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 3 | 3.64 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG21 | 14 | 3.62 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG22 | 14 | 3.62 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG23 | 14 | 3.62 |
| (1,368) | 1:A:22:PHE:HD1 | 1:A:25:TRP:HH2 | 5 | 3.61 |
| (1,368) | 1:A:22:PHE:HD2 | 1:A:25:TRP:HH2 | 5 | 3.61 |
| (1,367) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 12 | 3.61 |
| (1,367) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 12 | 3.61 |
| (1,327) | 1:A:34:ASN:HD22 | 1:A:38:HIS:HA | 5 | 3.61 |
| (1,368) | 1:A:22:PHE:HD1 | 1:A:25:TRP:HH2 | 12 | 3.6 |
| (1,368) | 1:A:22:PHE:HD2 | 1:A:25:TRP:HH2 | 12 | 3.6 |
| (2,8) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:4:GLY:HA2 | 8 | 3.59 |
| (2,8) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:4:GLY:HA2 | 8 | 3.59 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HG2 | 7 | 3.59 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HG3 | 7 | 3.59 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HG2 | 7 | 3.59 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HG3 | 7 | 3.59 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE1 | 9 | 3.58 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE2 | 9 | 3.58 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE3 | 9 | 3.58 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE1 | 9 | 3.58 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE2 | 9 | 3.58 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE3 | 9 | 3.58 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HB2 | 10 | 3.57 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HB3 | 10 | 3.57 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HB2 | 10 | 3.57 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HB3 | 10 | 3.57 |
| (1,368) | 1:A:22:PHE:HD1 | 1:A:25:TRP:HH2 | 11 | 3.56 |
| (1,368) | 1:A:22:PHE:HD2 | 1:A:25:TRP:HH2 | 11 | 3.56 |
| (1,312) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:3:GLU:HA | 4 | 3.54 |
| (1,312) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:3:GLU:HA | 4 | 3.54 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:5:THR:HG21 | 1 | 3.53 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:5:THR:HG22 | 1 | 3.53 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:5:THR:HG23 | 1 | 3.53 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:5:THR:HG21 | 1 | 3.53 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:5:THR:HG22 | 1 | 3.53 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:5:THR:HG23 | 1 | 3.53 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG21 | 8 | 3.53 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG22 | 8 | 3.53 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG23 | 8 | 3.53 |
| (1,367) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 2 | 3.53 |
| (1,367) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 2 | 3.53 |
| (1,367) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 5 | 3.53 |
| (1,367) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 5 | 3.53 |
| (1,368) | 1:A:22:PHE:HD1 | 1:A:25:TRP:HH2 | 6 | 3.51 |
| (1,368) | 1:A:22:PHE:HD2 | 1:A:25:TRP:HH2 | 6 | 3.51 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE1 | 12 | 3.5 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE2 | 12 | 3.5 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE3 | 12 | 3.5 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE1 | 12 | 3.5 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE2 | 12 | 3.5 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE3 | 12 | 3.5 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG21 | 12 | 3.5 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG22 | 12 | 3.5 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG23 | 12 | 3.5 |
| (1,312) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:3:GLU:HA | 3 | 3.49 |
| (1,312) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:3:GLU:HA | 3 | 3.49 |
| (1,368) | 1:A:22:PHE:HD1 | 1:A:25:TRP:HH2 | 10 | 3.48 |
| (1,368) | 1:A:22:PHE:HD2 | 1:A:25:TRP:HH2 | 10 | 3.48 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG21 | 1 | 3.47 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG22 | 1 | 3.47 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG23 | 1 | 3.47 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HG2 | 12 | 3.46 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HG3 | 12 | 3.46 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HG2 | 12 | 3.46 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HG3 | 12 | 3.46 |
| (1,322) | 1:A:6:PHE:HE1 | 1:A:7:ILE:HG12 | 1 | 3.45 |
| (1,322) | 1:A:6:PHE:HE2 | 1:A:7:ILE:HG12 | 1 | 3.45 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG21 | 4 | 3.42 |
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG22 | 4 | 3.42 |
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG23 | 4 | 3.42 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG21 | 13 | 3.42 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG22 | 13 | 3.42 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG23 | 13 | 3.42 |
| (1,327) | 1:A:34:ASN:HD22 | 1:A:38:HIS:HA | 3 | 3.42 |
| (1,388) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:HE21 | 4 | 3.41 |
| (1,388) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:HE22 | 4 | 3.41 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:6:PHE:HB2 | 7 | 3.41 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:6:PHE:HB3 | 7 | 3.41 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 7 | 3.41 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:6:PHE:HB3 | 7 | 3.41 |
| (1,407) | 1:A:25:TRP:HZ2 | 1:A:26:LEU:HG | 13 | 3.4 |
| (1,407) | 1:A:25:TRP:HZ2 | 1:A:26:LEU:HG | 15 | 3.4 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:6:PHE:HB2 | 11 | 3.4 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:6:PHE:HB3 | 11 | 3.4 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 11 | 3.4 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:6:PHE:HB3 | 11 | 3.4 |
| (1,312) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:3:GLU:HA | 9 | 3.38 |
| (1,312) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:3:GLU:HA | 9 | 3.38 |
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG21 | 6 | 3.37 |
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG22 | 6 | 3.37 |
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG23 | 6 | 3.37 |
| (1,367) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 11 | 3.36 |
| (1,367) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 11 | 3.36 |
| (1,367) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 10 | 3.35 |
| (1,367) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 10 | 3.35 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:6:PHE:HB2 | 12 | 3.31 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:6:PHE:HB3 | 12 | 3.31 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 12 | 3.31 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:6:PHE:HB3 | 12 | 3.31 |
| (1,367) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 6 | 3.3 |
| (1,367) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 6 | 3.3 |
| (1,449) | 1:A:28:ALA:HB1 | 1:A:29:GLN:HE21 | 11 | 3.29 |
| (1,449) | 1:A:28:ALA:HB2 | 1:A:29:GLN:HE21 | 11 | 3.29 |
| (1,449) | 1:A:28:ALA:HB3 | 1:A:29:GLN:HE21 | 11 | 3.29 |
| (1,368) | 1:A:22:PHE:HD1 | 1:A:25:TRP:HH2 | 7 | 3.29 |
| (1,368) | 1:A:22:PHE:HD2 | 1:A:25:TRP:HH2 | 7 | 3.29 |
| (1,312) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:3:GLU:HA | 6 | 3.29 |
| (1,312) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:3:GLU:HA | 6 | 3.29 |
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG21 | 2 | 3.28 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG22 | 2 | 3.28 |
| (1,488) | 1:A:20:GLN:HE22 | 1:A:23:VAL:HG23 | 2 | 3.28 |
| (1,368) | 1:A:22:PHE:HD1 | 1:A:25:TRP:HH2 | 1 | 3.28 |
| (1,368) | 1:A:22:PHE:HD2 | 1:A:25:TRP:HH2 | 1 | 3.28 |
| (1,272) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG12 | 5 | 3.27 |
| (1,449) | 1:A:28:ALA:HB1 | 1:A:29:GLN:HE21 | 3 | 3.26 |
| (1,449) | 1:A:28:ALA:HB2 | 1:A:29:GLN:HE21 | 3 | 3.26 |
| (1,449) | 1:A:28:ALA:HB3 | 1:A:29:GLN:HE21 | 3 | 3.26 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:HG2 | 12 | 3.26 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:HG3 | 12 | 3.26 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:HG2 | 12 | 3.26 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:HG3 | 12 | 3.26 |
| (1,312) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:3:GLU:HA | 13 | 3.24 |
| (1,312) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:3:GLU:HA | 13 | 3.24 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 13 | 3.23 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 13 | 3.23 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 13 | 3.23 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD11 | 13 | 3.23 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD12 | 13 | 3.23 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD13 | 13 | 3.23 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:HG2 | 13 | 3.19 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:HG3 | 13 | 3.19 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:HG2 | 13 | 3.19 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:HG3 | 13 | 3.19 |
| (1,368) | 1:A:22:PHE:HD1 | 1:A:25:TRP:HH2 | 9 | 3.19 |
| (1,368) | 1:A:22:PHE:HD2 | 1:A:25:TRP:HH2 | 9 | 3.19 |
| (1,272) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG12 | 15 | 3.19 |
| (1,336) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:24:ASN:HD22 | 7 | 3.18 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:6:PHE:HB2 | 9 | 3.18 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:6:PHE:HB3 | 9 | 3.18 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 9 | 3.18 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:6:PHE:HB3 | 9 | 3.18 |
| (1,336) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:24:ASN:HD22 | 1 | 3.17 |
| (1,336) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:24:ASN:HD22 | 15 | 3.17 |
| (1,336) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:24:ASN:HD22 | 2 | 3.16 |
| (1,336) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:24:ASN:HD22 | 5 | 3.16 |
| (2,8) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:4:GLY:HA2 | 6 | 3.15 |
| (2,8) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:4:GLY:HA2 | 6 | 3.15 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HB2 | 14 | 3.15 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HB3 | 14 | 3.15 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HB2 | 14 | 3.15 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HB3 | 14 | 3.15 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,336) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:24:ASN:HD22 | 3 | 3.15 |
| (1,336) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:24:ASN:HD22 | 14 | 3.15 |
| (1,336) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:24:ASN:HD22 | 9 | 3.14 |
| (1,336) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:24:ASN:HD22 | 10 | 3.13 |
| (1,336) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:24:ASN:HD22 | 11 | 3.13 |
| (1,312) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:3:GLU:HA | 10 | 3.13 |
| (1,312) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:3:GLU:HA | 10 | 3.13 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:6:PHE:HB2 | 2 | 3.13 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:6:PHE:HB3 | 2 | 3.13 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 2 | 3.13 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:6:PHE:HB3 | 2 | 3.13 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:6:PHE:HB2 | 3 | 3.13 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:6:PHE:HB3 | 3 | 3.13 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 3 | 3.13 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:6:PHE:HB3 | 3 | 3.13 |
| (1,272) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG12 | 9 | 3.13 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 4 | 3.12 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 4 | 3.12 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 4 | 3.12 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD11 | 4 | 3.12 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD12 | 4 | 3.12 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD13 | 4 | 3.12 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG21 | 15 | 3.11 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG22 | 15 | 3.11 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG23 | 15 | 3.11 |
| (1,367) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 7 | 3.1 |
| (1,367) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 7 | 3.1 |
| (1,366) | 1:A:22:PHE:HD1 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 13 | 3.1 |
| (1,366) | 1:A:22:PHE:HD2 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 13 | 3.1 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG21 | 9 | 3.09 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG22 | 9 | 3.09 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG23 | 9 | 3.09 |
| (1,328) | 1:A:34:ASN:HD22 | 1:A:38:HIS:HB2 | 8 | 3.07 |
| (1,327) | 1:A:34:ASN:HD22 | 1:A:38:HIS:HA | 6 | 3.07 |
| (2,8) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:4:GLY:HA2 | 4 | 3.06 |
| (2,8) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:4:GLY:HA2 | 4 | 3.06 |
| (1,367) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 1 | 3.06 |
| (1,367) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 1 | 3.06 |
| (2,8) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:4:GLY:HA2 | 9 | 3.04 |
| (2,8) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:4:GLY:HA2 | 9 | 3.04 |
| (1,388) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:HE21 | 13 | 3.02 |
| (1,388) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:HE22 | 13 | 3.02 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG21 | 10 | 3.01 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG22 | 10 | 3.01 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG23 | 10 | 3.01 |
| (1,312) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:3:GLU:HA | 15 | 3.01 |
| (1,312) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:3:GLU:HA | 15 | 3.01 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:6:PHE:HB2 | 13 | 3.01 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:6:PHE:HB3 | 13 | 3.01 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 13 | 3.01 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:6:PHE:HB3 | 13 | 3.01 |
| (2,8) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:4:GLY:HA2 | 10 | 3.0 |
| (2,8) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:4:GLY:HA2 | 10 | 3.0 |
| (1,449) | 1:A:28:ALA:HB1 | 1:A:29:GLN:HE21 | 15 | 3.0 |
| (1,449) | 1:A:28:ALA:HB2 | 1:A:29:GLN:HE21 | 15 | 3.0 |
| (1,449) | 1:A:28:ALA:HB3 | 1:A:29:GLN:HE21 | 15 | 3.0 |
| (1,367) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 9 | 2.96 |
| (1,367) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 9 | 2.96 |
| (1,328) | 1:A:34:ASN:HD22 | 1:A:38:HIS:HB2 | 12 | 2.95 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:13:ALA:HB1 | 10 | 2.93 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:13:ALA:HB2 | 10 | 2.93 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:13:ALA:HB3 | 10 | 2.93 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:13:ALA:HB1 | 10 | 2.93 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:13:ALA:HB2 | 10 | 2.93 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:13:ALA:HB3 | 10 | 2.93 |
| (1,327) | 1:A:34:ASN:HD22 | 1:A:38:HIS:HA | 13 | 2.93 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE1 | 8 | 2.92 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE2 | 8 | 2.92 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE3 | 8 | 2.92 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE1 | 8 | 2.92 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE2 | 8 | 2.92 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE3 | 8 | 2.92 |
| (2,8) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:4:GLY:HA2 | 15 | 2.9 |
| (2,8) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:4:GLY:HA2 | 15 | 2.9 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:13:ALA:HB1 | 7 | 2.89 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:13:ALA:HB2 | 7 | 2.89 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:13:ALA:HB3 | 7 | 2.89 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:13:ALA:HB1 | 7 | 2.89 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:13:ALA:HB2 | 7 | 2.89 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:13:ALA:HB3 | 7 | 2.89 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:13:ALA:HB1 | 12 | 2.88 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:13:ALA:HB2 | 12 | 2.88 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:13:ALA:HB3 | 12 | 2.88 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:13:ALA:HB1 | 12 | 2.88 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:13:ALA:HB2 | 12 | 2.88 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:13:ALA:HB3 | 12 | 2.88 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HG2 | 9 | 2.86 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HG3 | 9 | 2.86 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HG2 | 9 | 2.86 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HG3 | 9 | 2.86 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:6:PHE:HB2 | 7 | 2.85 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:6:PHE:HB3 | 7 | 2.85 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 7 | 2.85 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:6:PHE:HB3 | 7 | 2.85 |
| (1,327) | 1:A:34:ASN:HD22 | 1:A:38:HIS:HA | 1 | 2.85 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:6:PHE:HB2 | 11 | 2.84 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:6:PHE:HB3 | 11 | 2.84 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 11 | 2.84 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:6:PHE:HB3 | 11 | 2.84 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 8 | 2.84 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 8 | 2.84 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 8 | 2.84 |
| (1,449) | 1:A:28:ALA:HB1 | 1:A:29:GLN:HE21 | 5 | 2.79 |
| (1,449) | 1:A:28:ALA:HB2 | 1:A:29:GLN:HE21 | 5 | 2.79 |
| (1,449) | 1:A:28:ALA:HB3 | 1:A:29:GLN:HE21 | 5 | 2.79 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:HG2 | 4 | 2.79 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:HG3 | 4 | 2.79 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:HG2 | 4 | 2.79 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:HG3 | 4 | 2.79 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HB2 | 13 | 2.78 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HB3 | 13 | 2.78 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HB2 | 13 | 2.78 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HB3 | 13 | 2.78 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 11 | 2.77 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 11 | 2.77 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 11 | 2.77 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 13 | 2.77 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 13 | 2.77 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 13 | 2.77 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 1 | 2.76 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 1 | 2.76 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 1 | 2.76 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 12 | 2.76 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 12 | 2.76 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 12 | 2.76 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 14 | 2.76 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 14 | 2.76 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 14 | 2.76 |
| (1,312) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:3:GLU:HA | 1 | 2.76 |
| (1,312) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:3:GLU:HA | 1 | 2.76 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:5:THR:HG21 | 8 | 2.75 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:5:THR:HG22 | 8 | 2.75 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:5:THR:HG23 | 8 | 2.75 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:5:THR:HG21 | 8 | 2.75 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:5:THR:HG22 | 8 | 2.75 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:5:THR:HG23 | 8 | 2.75 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:6:PHE:HB2 | 12 | 2.74 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:6:PHE:HB3 | 12 | 2.74 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 12 | 2.74 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:6:PHE:HB3 | 12 | 2.74 |
| (1,322) | 1:A:6:PHE:HE1 | 1:A:7:ILE:HG12 | 8 | 2.74 |
| (1,322) | 1:A:6:PHE:HE2 | 1:A:7:ILE:HG12 | 8 | 2.74 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 7 | 2.73 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 7 | 2.73 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 7 | 2.73 |
| (1,449) | 1:A:28:ALA:HB1 | 1:A:29:GLN:HE21 | 9 | 2.73 |
| (1,449) | 1:A:28:ALA:HB2 | 1:A:29:GLN:HE21 | 9 | 2.73 |
| (1,449) | 1:A:28:ALA:HB3 | 1:A:29:GLN:HE21 | 9 | 2.73 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 3 | 2.72 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 3 | 2.72 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 3 | 2.72 |
| (1,449) | 1:A:28:ALA:HB1 | 1:A:29:GLN:HE21 | 14 | 2.72 |
| (1,449) | 1:A:28:ALA:HB2 | 1:A:29:GLN:HE21 | 14 | 2.72 |
| (1,449) | 1:A:28:ALA:HB3 | 1:A:29:GLN:HE21 | 14 | 2.72 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 4 | 2.71 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 4 | 2.71 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 4 | 2.71 |
| (1,449) | 1:A:28:ALA:HB1 | 1:A:29:GLN:HE21 | 10 | 2.71 |
| (1,449) | 1:A:28:ALA:HB2 | 1:A:29:GLN:HE21 | 10 | 2.71 |
| (1,449) | 1:A:28:ALA:HB3 | 1:A:29:GLN:HE21 | 10 | 2.71 |
| (1,322) | 1:A:6:PHE:HE1 | 1:A:7:ILE:HG12 | 9 | 2.71 |
| (1,322) | 1:A:6:PHE:HE2 | 1:A:7:ILE:HG12 | 9 | 2.71 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 9 | 2.7 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 9 | 2.7 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 9 | 2.7 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 10 | 2.7 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 10 | 2.7 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 10 | 2.7 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:HG2 | 6 | 2.7 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:HG3 | 6 | 2.7 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:HG2 | 6 | 2.7 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:HG3 | 6 | 2.7 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 5 | 2.69 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 5 | 2.69 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 5 | 2.69 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 2 | 2.67 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 2 | 2.67 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 2 | 2.67 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:5:THR:HG21 | 5 | 2.66 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:5:THR:HG22 | 5 | 2.66 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:5:THR:HG23 | 5 | 2.66 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:5:THR:HG21 | 5 | 2.66 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:5:THR:HG22 | 5 | 2.66 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:5:THR:HG23 | 5 | 2.66 |
| (1,449) | 1:A:28:ALA:HB1 | 1:A:29:GLN:HE21 | 7 | 2.66 |
| (1,449) | 1:A:28:ALA:HB2 | 1:A:29:GLN:HE21 | 7 | 2.66 |
| (1,449) | 1:A:28:ALA:HB3 | 1:A:29:GLN:HE21 | 7 | 2.66 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG21 | 4 | 2.64 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG22 | 4 | 2.64 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG23 | 4 | 2.64 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG21 | 6 | 2.63 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG22 | 6 | 2.63 |
| (1,485) | 1:A:20:GLN:HE21 | 1:A:23:VAL:HG23 | 6 | 2.63 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 15 | 2.63 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 15 | 2.63 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 15 | 2.63 |
| (1,407) | 1:A:25:TRP:HZ2 | 1:A:26:LEU:HG | 4 | 2.63 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:HG2 | 8 | 2.63 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:HG3 | 8 | 2.63 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:HG2 | 8 | 2.63 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:HG3 | 8 | 2.63 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 6 | 2.62 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 6 | 2.62 |
| (1,484) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 6 | 2.62 |
| (2,8) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:4:GLY:HA2 | 1 | 2.6 |
| (2,8) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:4:GLY:HA2 | 1 | 2.6 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:6:PHE:HB2 | 3 | 2.6 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:6:PHE:HB3 | 3 | 2.6 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 3 | 2.6 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:6:PHE:HB3 | 3 | 2.6 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,449) | 1:A:28:ALA:HB1 | 1:A:29:GLN:HE21 | 2 | 2.6 |
| (1,449) | 1:A:28:ALA:HB2 | 1:A:29:GLN:HE21 | 2 | 2.6 |
| (1,449) | 1:A:28:ALA:HB3 | 1:A:29:GLN:HE21 | 2 | 2.6 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:HG2 | 15 | 2.59 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:HG3 | 15 | 2.59 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:HG2 | 15 | 2.59 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:HG3 | 15 | 2.59 |
| (1,261) | 1:A:32:LYS:HG2 | 1:A:36:TRP:H | 15 | 2.59 |
| (1,261) | 1:A:32:LYS:HG3 | 1:A:36:TRP:H | 15 | 2.59 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:6:PHE:HB2 | 2 | 2.58 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:6:PHE:HB3 | 2 | 2.58 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 2 | 2.58 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:6:PHE:HB3 | 2 | 2.58 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 3 | 2.57 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 3 | 2.57 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 3 | 2.57 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD11 | 3 | 2.57 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD12 | 3 | 2.57 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD13 | 3 | 2.57 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:5:THR:HG21 | 6 | 2.56 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:5:THR:HG22 | 6 | 2.56 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:5:THR:HG23 | 6 | 2.56 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:5:THR:HG21 | 6 | 2.56 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:5:THR:HG22 | 6 | 2.56 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:5:THR:HG23 | 6 | 2.56 |
| (1,449) | 1:A:28:ALA:HB1 | 1:A:29:GLN:HE21 | 1 | 2.56 |
| (1,449) | 1:A:28:ALA:HB2 | 1:A:29:GLN:HE21 | 1 | 2.56 |
| (1,449) | 1:A:28:ALA:HB3 | 1:A:29:GLN:HE21 | 1 | 2.56 |
| (1,277) | 1:A:36:TRP:HE3 | 1:A:37:LYS:HA | 13 | 2.56 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:13:ALA:HB1 | 13 | 2.55 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:13:ALA:HB2 | 13 | 2.55 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:13:ALA:HB3 | 13 | 2.55 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:13:ALA:HB1 | 13 | 2.55 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:13:ALA:HB2 | 13 | 2.55 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:13:ALA:HB3 | 13 | 2.55 |
| (1,407) | 1:A:25:TRP:HZ2 | 1:A:26:LEU:HG | 11 | 2.54 |
| (1,388) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:HE21 | 1 | 2.54 |
| (1,388) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:HE22 | 1 | 2.54 |
| (1,407) | 1:A:25:TRP:HZ2 | 1:A:26:LEU:HG | 3 | 2.53 |
| (1,407) | 1:A:25:TRP:HZ2 | 1:A:26:LEU:HG | 8 | 2.53 |
| (1,312) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:3:GLU:HA | 5 | 2.53 |
| (1,312) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:3:GLU:HA | 5 | 2.53 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,210) | 1:A:4:GLY:HA2 | 1:A:6:PHE:H | 14 | 2.53 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:5:THR:HG21 | 10 | 2.52 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:5:THR:HG22 | 10 | 2.52 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:5:THR:HG23 | 10 | 2.52 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:5:THR:HG21 | 10 | 2.52 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:5:THR:HG22 | 10 | 2.52 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:5:THR:HG23 | 10 | 2.52 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:5:THR:HG21 | 15 | 2.52 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:5:THR:HG22 | 15 | 2.52 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:5:THR:HG23 | 15 | 2.52 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:5:THR:HG21 | 15 | 2.52 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:5:THR:HG22 | 15 | 2.52 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:5:THR:HG23 | 15 | 2.52 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HG2 | 8 | 2.5 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HG3 | 8 | 2.5 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HG2 | 8 | 2.5 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HG3 | 8 | 2.5 |
| (1,312) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:3:GLU:HA | 14 | 2.49 |
| (1,312) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:3:GLU:HA | 14 | 2.49 |
| (1,310) | 1:A:8:SER:HB3 | 1:A:10:TYR:HD1 | 1 | 2.49 |
| (1,310) | 1:A:8:SER:HB3 | 1:A:10:TYR:HD2 | 1 | 2.49 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:6:PHE:HB2 | 13 | 2.47 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:6:PHE:HB3 | 13 | 2.47 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 13 | 2.47 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:6:PHE:HB3 | 13 | 2.47 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE1 | 10 | 2.47 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE2 | 10 | 2.47 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE3 | 10 | 2.47 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE1 | 10 | 2.47 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE2 | 10 | 2.47 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE3 | 10 | 2.47 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HB2 | 12 | 2.47 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HB3 | 12 | 2.47 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HB2 | 12 | 2.47 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HB3 | 12 | 2.47 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG21 | 6 | 2.47 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG22 | 6 | 2.47 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG23 | 6 | 2.47 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG21 | 6 | 2.47 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG22 | 6 | 2.47 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG23 | 6 | 2.47 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG21 | 14 | 2.45 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG22 | 14 | 2.45 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG23 | 14 | 2.45 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG21 | 14 | 2.45 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG22 | 14 | 2.45 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG23 | 14 | 2.45 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG21 | 10 | 2.44 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG22 | 10 | 2.44 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG23 | 10 | 2.44 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:41:THR:HG21 | 10 | 2.44 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:41:THR:HG22 | 10 | 2.44 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:41:THR:HG23 | 10 | 2.44 |
| (1,372) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:25:TRP:HZ2 | 4 | 2.44 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG21 | 6 | 2.43 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG22 | 6 | 2.43 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG23 | 6 | 2.43 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:41:THR:HG21 | 6 | 2.43 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:41:THR:HG22 | 6 | 2.43 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:41:THR:HG23 | 6 | 2.43 |
| (1,277) | 1:A:36:TRP:HE3 | 1:A:37:LYS:HA | 4 | 2.43 |
| (1,449) | 1:A:28:ALA:HB1 | 1:A:29:GLN:HE21 | 8 | 2.42 |
| (1,449) | 1:A:28:ALA:HB2 | 1:A:29:GLN:HE21 | 8 | 2.42 |
| (1,449) | 1:A:28:ALA:HB3 | 1:A:29:GLN:HE21 | 8 | 2.42 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 11 | 2.42 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 11 | 2.42 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 11 | 2.42 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD11 | 11 | 2.42 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD12 | 11 | 2.42 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD13 | 11 | 2.42 |
| (1,372) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:25:TRP:HZ2 | 1 | 2.42 |
| (1,372) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:25:TRP:HZ2 | 3 | 2.42 |
| (1,372) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:25:TRP:HZ2 | 5 | 2.42 |
| (1,372) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:25:TRP:HZ2 | 6 | 2.42 |
| (1,372) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:25:TRP:HZ2 | 13 | 2.42 |
| (1,372) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:25:TRP:HZ2 | 14 | 2.42 |
| (1,376) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HE22 | 14 | 2.41 |
| (1,376) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HE21 | 14 | 2.41 |
| (1,372) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:25:TRP:HZ2 | 2 | 2.41 |
| (1,372) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:25:TRP:HZ2 | 7 | 2.41 |
| (1,372) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:25:TRP:HZ2 | 9 | 2.41 |
| (1,372) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:25:TRP:HZ2 | 10 | 2.41 |
| (1,372) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:25:TRP:HZ2 | 11 | 2.41 |
| (1,407) | 1:A:25:TRP:HZ2 | 1:A:26:LEU:HG | 1 | 2.4 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,372) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:25:TRP:HZ2 | 8 | 2.4 |
| (1,372) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:25:TRP:HZ2 | 12 | 2.4 |
| (1,372) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:25:TRP:HZ2 | 15 | 2.4 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:13:ALA:HB1 | 14 | 2.39 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:13:ALA:HB2 | 14 | 2.39 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:13:ALA:HB3 | 14 | 2.39 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:13:ALA:HB1 | 14 | 2.39 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:13:ALA:HB2 | 14 | 2.39 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:13:ALA:HB3 | 14 | 2.39 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HB2 | 7 | 2.39 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HB3 | 7 | 2.39 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HB2 | 7 | 2.39 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HB3 | 7 | 2.39 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG21 | 2 | 2.37 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG22 | 2 | 2.37 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG23 | 2 | 2.37 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG21 | 2 | 2.37 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG22 | 2 | 2.37 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG23 | 2 | 2.37 |
| (1,388) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:HE21 | 2 | 2.36 |
| (1,388) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:HE22 | 2 | 2.36 |
| (1,263) | 1:A:12:ILE:HG12 | 1:A:13:ALA:H | 5 | 2.33 |
| (1,263) | 1:A:12:ILE:HG12 | 1:A:13:ALA:H | 15 | 2.33 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD11 | 15 | 2.32 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD12 | 15 | 2.32 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD13 | 15 | 2.32 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD11 | 15 | 2.32 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD12 | 15 | 2.32 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD13 | 15 | 2.32 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD11 | 15 | 2.32 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD12 | 15 | 2.32 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD13 | 15 | 2.32 |
| (1,388) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:HE21 | 7 | 2.32 |
| (1,388) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:HE22 | 7 | 2.32 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:6:PHE:HB2 | 9 | 2.31 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:6:PHE:HB3 | 9 | 2.31 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 9 | 2.31 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:6:PHE:HB3 | 9 | 2.31 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:29:GLN:H | 6 | 2.31 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:29:GLN:H | 6 | 2.31 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:29:GLN:H | 6 | 2.31 |
| (1,263) | 1:A:12:ILE:HG12 | 1:A:13:ALA:H | 9 | 2.31 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,263) | 1:A:12:ILE:HG12 | 1:A:13:ALA:H | 10 | 2.31 |
| (1,233) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HG13 | 12 | 2.31 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE1 | 13 | 2.29 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE2 | 13 | 2.29 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE3 | 13 | 2.29 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE1 | 13 | 2.29 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE2 | 13 | 2.29 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE3 | 13 | 2.29 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG21 | 13 | 2.29 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG22 | 13 | 2.29 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG23 | 13 | 2.29 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:41:THR:HG21 | 13 | 2.29 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:41:THR:HG22 | 13 | 2.29 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:41:THR:HG23 | 13 | 2.29 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:29:GLN:H | 11 | 2.28 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:29:GLN:H | 11 | 2.28 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:29:GLN:H | 11 | 2.28 |
| (1,328) | 1:A:34:ASN:HD22 | 1:A:38:HIS:HB2 | 7 | 2.28 |
| (2,8) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:4:GLY:HA2 | 14 | 2.27 |
| (2,8) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:4:GLY:HA2 | 14 | 2.27 |
| (1,233) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HG13 | 7 | 2.27 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:5:THR:HG21 | 14 | 2.26 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:5:THR:HG22 | 14 | 2.26 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:5:THR:HG23 | 14 | 2.26 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:5:THR:HG21 | 14 | 2.26 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:5:THR:HG22 | 14 | 2.26 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:5:THR:HG23 | 14 | 2.26 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HE1 | 7 | 2.24 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HE2 | 7 | 2.24 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HE3 | 7 | 2.24 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HE1 | 7 | 2.24 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HE2 | 7 | 2.24 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HE3 | 7 | 2.24 |
| (1,479) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HD11 | 5 | 2.24 |
| (1,479) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HD12 | 5 | 2.24 |
| (1,479) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HD13 | 5 | 2.24 |
| (1,327) | 1:A:34:ASN:HD22 | 1:A:38:HIS:HA | 15 | 2.23 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:6:PHE:HB2 | 10 | 2.23 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:6:PHE:HB3 | 10 | 2.23 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 10 | 2.23 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:6:PHE:HB3 | 10 | 2.23 |
| (1,263) | 1:A:12:ILE:HG12 | 1:A:13:ALA:H | 14 | 2.23 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,407) | 1:A:25:TRP:HZ2 | 1:A:26:LEU:HG | 14 | 2.22 |
| (1,263) | 1:A:12:ILE:HG12 | 1:A:13:ALA:H | 2 | 2.22 |
| (1,210) | 1:A:4:GLY:HA2 | 1:A:6:PHE:H | 15 | 2.22 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:29:GLN:H | 6 | 2.21 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:29:GLN:H | 6 | 2.21 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:29:GLN:H | 6 | 2.21 |
| (2,8) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:4:GLY:HA2 | 5 | 2.2 |
| (2,8) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:4:GLY:HA2 | 5 | 2.2 |
| (1,407) | 1:A:25:TRP:HZ2 | 1:A:26:LEU:HG | 6 | 2.2 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:29:GLN:H | 14 | 2.19 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:29:GLN:H | 14 | 2.19 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:29:GLN:H | 14 | 2.19 |
| (1,384) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HE1 | 4 | 2.19 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HG2 | 14 | 2.18 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HG3 | 14 | 2.18 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HG2 | 14 | 2.18 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HG3 | 14 | 2.18 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG21 | 4 | 2.18 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG22 | 4 | 2.18 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG23 | 4 | 2.18 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:41:THR:HG21 | 4 | 2.18 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:41:THR:HG22 | 4 | 2.18 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:41:THR:HG23 | 4 | 2.18 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:29:GLN:H | 7 | 2.18 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:29:GLN:H | 7 | 2.18 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:29:GLN:H | 7 | 2.18 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:29:GLN:H | 12 | 2.18 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:29:GLN:H | 12 | 2.18 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:29:GLN:H | 12 | 2.18 |
| (1,384) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HE1 | 1 | 2.18 |
| (1,384) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HE1 | 2 | 2.18 |
| (1,384) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HE1 | 5 | 2.18 |
| (1,384) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HE1 | 6 | 2.18 |
| (1,384) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HE1 | 7 | 2.18 |
| (1,384) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HE1 | 8 | 2.18 |
| (1,384) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HE1 | 10 | 2.18 |
| (1,384) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HE1 | 13 | 2.18 |
| (1,384) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HE1 | 14 | 2.18 |
| (1,376) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HE22 | 7 | 2.18 |
| (1,376) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HE21 | 7 | 2.18 |
| (1,366) | 1:A:22:PHE:HD1 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 8 | 2.18 |
| (1,366) | 1:A:22:PHE:HD2 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 8 | 2.18 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,263) | 1:A:12:ILE:HG12 | 1:A:13:ALA:H | 1 | 2.18 |
| (1,263) | 1:A:12:ILE:HG12 | 1:A:13:ALA:H | 6 | 2.18 |
| (1,233) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HG13 | 13 | 2.18 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 15 | 2.17 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 15 | 2.17 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 15 | 2.17 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD11 | 15 | 2.17 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD12 | 15 | 2.17 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD13 | 15 | 2.17 |
| (1,384) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HE1 | 3 | 2.17 |
| (1,384) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HE1 | 9 | 2.17 |
| (1,384) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HE1 | 11 | 2.17 |
| (1,384) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HE1 | 12 | 2.17 |
| (1,384) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HE1 | 15 | 2.17 |
| (1,263) | 1:A:12:ILE:HG12 | 1:A:13:ALA:H | 11 | 2.17 |
| (1,117) | 1:A:11:SER:HB2 | 1:A:12:ILE:H | 4 | 2.17 |
| (1,117) | 1:A:11:SER:HB2 | 1:A:12:ILE:H | 6 | 2.17 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD11 | 7 | 2.15 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD12 | 7 | 2.15 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD13 | 7 | 2.15 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD11 | 7 | 2.15 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD12 | 7 | 2.15 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD13 | 7 | 2.15 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD11 | 7 | 2.15 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD12 | 7 | 2.15 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD13 | 7 | 2.15 |
| (1,407) | 1:A:25:TRP:HZ2 | 1:A:26:LEU:HG | 5 | 2.15 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD11 | 9 | 2.14 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD12 | 9 | 2.14 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD13 | 9 | 2.14 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD11 | 9 | 2.14 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD12 | 9 | 2.14 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD13 | 9 | 2.14 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD11 | 9 | 2.14 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD12 | 9 | 2.14 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD13 | 9 | 2.14 |
| (1,376) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HE22 | 11 | 2.14 |
| (1,376) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HE21 | 11 | 2.14 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG21 | 14 | 2.13 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG22 | 14 | 2.13 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG23 | 14 | 2.13 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:41:THR:HG21 | 14 | 2.13 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:41:THR:HG22 | 14 | 2.13 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:41:THR:HG23 | 14 | 2.13 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD11 | 3 | 2.13 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD12 | 3 | 2.13 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD13 | 3 | 2.13 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD11 | 3 | 2.13 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD12 | 3 | 2.13 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD13 | 3 | 2.13 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD11 | 3 | 2.13 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD12 | 3 | 2.13 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD13 | 3 | 2.13 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD11 | 6 | 2.13 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD12 | 6 | 2.13 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD13 | 6 | 2.13 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD11 | 6 | 2.13 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD12 | 6 | 2.13 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD13 | 6 | 2.13 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD11 | 6 | 2.13 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD12 | 6 | 2.13 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD13 | 6 | 2.13 |
| (1,407) | 1:A:25:TRP:HZ2 | 1:A:26:LEU:HG | 12 | 2.13 |
| (1,343) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:36:TRP:HD1 | 14 | 2.13 |
| (1,210) | 1:A:4:GLY:HA2 | 1:A:6:PHE:H | 6 | 2.13 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 6 | 2.12 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 6 | 2.12 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 6 | 2.12 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD11 | 6 | 2.12 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD12 | 6 | 2.12 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD13 | 6 | 2.12 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD11 | 5 | 2.11 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD12 | 5 | 2.11 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD13 | 5 | 2.11 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD11 | 5 | 2.11 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD12 | 5 | 2.11 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD13 | 5 | 2.11 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD11 | 5 | 2.11 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD12 | 5 | 2.11 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD13 | 5 | 2.11 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:29:GLN:H | 4 | 2.11 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:29:GLN:H | 4 | 2.11 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:29:GLN:H | 4 | 2.11 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:6:PHE:HB2 | 6 | 2.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:6:PHE:HB3 | 6 | 2.11 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 6 | 2.11 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:6:PHE:HB3 | 6 | 2.11 |
| (1,479) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HD11 | 9 | 2.1 |
| (1,479) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HD12 | 9 | 2.1 |
| (1,479) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HD13 | 9 | 2.1 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:29:GLN:H | 3 | 2.1 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:29:GLN:H | 3 | 2.1 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:29:GLN:H | 3 | 2.1 |
| (1,328) | 1:A:34:ASN:HD22 | 1:A:38:HIS:HB2 | 1 | 2.1 |
| (1,207) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:37:LYS:HB2 | 7 | 2.1 |
| (1,207) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:37:LYS:HB3 | 7 | 2.1 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG21 | 1:A:10:TYR:HD1 | 5 | 2.09 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG21 | 1:A:10:TYR:HD2 | 5 | 2.09 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG22 | 1:A:10:TYR:HD1 | 5 | 2.09 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG22 | 1:A:10:TYR:HD2 | 5 | 2.09 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG23 | 1:A:10:TYR:HD1 | 5 | 2.09 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG23 | 1:A:10:TYR:HD2 | 5 | 2.09 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG21 | 1 | 2.09 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG22 | 1 | 2.09 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG23 | 1 | 2.09 |
| (1,328) | 1:A:34:ASN:HD22 | 1:A:38:HIS:HB2 | 9 | 2.09 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HE1 | 9 | 2.08 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HE2 | 9 | 2.08 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HE3 | 9 | 2.08 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HE1 | 9 | 2.08 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HE2 | 9 | 2.08 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HE3 | 9 | 2.08 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HE1 | 12 | 2.08 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HE2 | 12 | 2.08 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HE3 | 12 | 2.08 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HE1 | 12 | 2.08 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HE2 | 12 | 2.08 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HE3 | 12 | 2.08 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD11 | 2 | 2.08 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD12 | 2 | 2.08 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD13 | 2 | 2.08 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD11 | 2 | 2.08 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD12 | 2 | 2.08 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD13 | 2 | 2.08 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD11 | 2 | 2.08 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD12 | 2 | 2.08 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD13 | 2 | 2.08 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:29:GLN:H | 1 | 2.08 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:29:GLN:H | 1 | 2.08 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:29:GLN:H | 1 | 2.08 |
| (1,407) | 1:A:25:TRP:HZ2 | 1:A:26:LEU:HG | 2 | 2.08 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:29:GLN:H | 2 | 2.07 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:29:GLN:H | 2 | 2.07 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:29:GLN:H | 2 | 2.07 |
| (1,276) | 1:A:36:TRP:HA | 1:A:36:TRP:HE3 | 14 | 2.07 |
| (1,376) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HE22 | 1 | 2.06 |
| (1,376) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HE21 | 1 | 2.06 |
| (1,376) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HE22 | 10 | 2.06 |
| (1,376) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HE21 | 10 | 2.06 |
| (1,343) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:36:TRP:HD1 | 5 | 2.06 |
| (1,210) | 1:A:4:GLY:HA2 | 1:A:6:PHE:H | 7 | 2.06 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HG2 | 2 | 2.05 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HG3 | 2 | 2.05 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HG2 | 2 | 2.05 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HG3 | 2 | 2.05 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD11 | 8 | 2.05 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD12 | 8 | 2.05 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD13 | 8 | 2.05 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD11 | 8 | 2.05 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD12 | 8 | 2.05 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD13 | 8 | 2.05 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD11 | 8 | 2.05 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD12 | 8 | 2.05 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD13 | 8 | 2.05 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:29:GLN:H | 8 | 2.05 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:29:GLN:H | 8 | 2.05 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:29:GLN:H | 8 | 2.05 |
| (1,376) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HE22 | 2 | 2.05 |
| (1,376) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HE21 | 2 | 2.05 |
| (1,376) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HE22 | 3 | 2.05 |
| (1,376) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HE21 | 3 | 2.05 |
| (1,310) | 1:A:8:SER:HB3 | 1:A:10:TYR:HD1 | 5 | 2.05 |
| (1,310) | 1:A:8:SER:HB3 | 1:A:10:TYR:HD2 | 5 | 2.05 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:29:GLN:H | 10 | 2.04 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:29:GLN:H | 10 | 2.04 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:29:GLN:H | 10 | 2.04 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:29:GLN:H | 15 | 2.04 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:29:GLN:H | 15 | 2.04 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:29:GLN:H | 15 | 2.04 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HB2 | 5 | 2.03 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HB3 | 5 | 2.03 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HB2 | 5 | 2.03 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HB3 | 5 | 2.03 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD11 | 4 | 2.03 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD12 | 4 | 2.03 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD13 | 4 | 2.03 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD11 | 4 | 2.03 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD12 | 4 | 2.03 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD13 | 4 | 2.03 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD11 | 4 | 2.03 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD12 | 4 | 2.03 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD13 | 4 | 2.03 |
| (1,376) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HE22 | 15 | 2.03 |
| (1,376) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HE21 | 15 | 2.03 |
| (1,311) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:11:SER:HB2 | 13 | 2.03 |
| (1,311) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:11:SER:HB2 | 13 | 2.03 |
| (1,479) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HD11 | 3 | 2.02 |
| (1,479) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HD12 | 3 | 2.02 |
| (1,479) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HD13 | 3 | 2.02 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD11 | 1 | 2.02 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD12 | 1 | 2.02 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD13 | 1 | 2.02 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD11 | 1 | 2.02 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD12 | 1 | 2.02 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD13 | 1 | 2.02 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD11 | 1 | 2.02 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD12 | 1 | 2.02 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD13 | 1 | 2.02 |
| (1,336) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:24:ASN:HD22 | 8 | 2.02 |
| (1,327) | 1:A:34:ASN:HD22 | 1:A:38:HIS:HA | 8 | 2.02 |
| (1,323) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HB2 | 8 | 2.02 |
| (1,323) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HB3 | 8 | 2.02 |
| (1,233) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HG13 | 4 | 2.02 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HB2 | 1 | 2.01 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HB3 | 1 | 2.01 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HB2 | 1 | 2.01 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HB3 | 1 | 2.01 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HB2 | 3 | 2.01 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HB3 | 3 | 2.01 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HB2 | 3 | 2.01 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HB3 | 3 | 2.01 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:29:GLN:H | 11 | 2.01 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:29:GLN:H | 11 | 2.01 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:29:GLN:H | 11 | 2.01 |
| (1,388) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:HE21 | 10 | 2.01 |
| (1,388) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:HE22 | 10 | 2.01 |
| (1,272) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG12 | 3 | 2.01 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD11 | 13 | 2.0 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD12 | 13 | 2.0 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD13 | 13 | 2.0 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD11 | 13 | 2.0 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD12 | 13 | 2.0 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD13 | 13 | 2.0 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD11 | 13 | 2.0 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD12 | 13 | 2.0 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD13 | 13 | 2.0 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:HG2 | 5 | 2.0 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:HG3 | 5 | 2.0 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:HG2 | 5 | 2.0 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:HG3 | 5 | 2.0 |
| (1,310) | 1:A:8:SER:HB3 | 1:A:10:TYR:HD1 | 9 | 2.0 |
| (1,310) | 1:A:8:SER:HB3 | 1:A:10:TYR:HD2 | 9 | 2.0 |
| (1,210) | 1:A:4:GLY:HA2 | 1:A:6:PHE:H | 2 | 2.0 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:29:GLN:H | 13 | 1.99 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:29:GLN:H | 13 | 1.99 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:29:GLN:H | 13 | 1.99 |
| (1,388) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:HE21 | 5 | 1.99 |
| (1,388) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:HE22 | 5 | 1.99 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:29:GLN:H | 5 | 1.98 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:29:GLN:H | 5 | 1.98 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:29:GLN:H | 5 | 1.98 |
| (1,376) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HE22 | 5 | 1.98 |
| (1,376) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HE21 | 5 | 1.98 |
| (1,127) | 1:A:29:GLN:HA | 1:A:32:LYS:H | 11 | 1.98 |
| (1,407) | 1:A:25:TRP:HZ2 | 1:A:26:LEU:HG | 7 | 1.97 |
| (1,210) | 1:A:4:GLY:HA2 | 1:A:6:PHE:H | 8 | 1.97 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD11 | 10 | 1.96 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD12 | 10 | 1.96 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD13 | 10 | 1.96 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD11 | 10 | 1.96 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD12 | 10 | 1.96 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD13 | 10 | 1.96 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD11 | 10 | 1.96 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD12 | 10 | 1.96 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD13 | 10 | 1.96 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD11 | 11 | 1.96 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD12 | 11 | 1.96 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD13 | 11 | 1.96 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD11 | 11 | 1.96 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD12 | 11 | 1.96 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD13 | 11 | 1.96 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD11 | 11 | 1.96 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD12 | 11 | 1.96 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD13 | 11 | 1.96 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:29:GLN:H | 9 | 1.96 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:29:GLN:H | 9 | 1.96 |
| (1,433) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:29:GLN:H | 9 | 1.96 |
| (1,407) | 1:A:25:TRP:HZ2 | 1:A:26:LEU:HG | 10 | 1.96 |
| (1,366) | 1:A:22:PHE:HD1 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 4 | 1.96 |
| (1,366) | 1:A:22:PHE:HD2 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 4 | 1.96 |
| (1,366) | 1:A:22:PHE:HD1 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 15 | 1.96 |
| (1,366) | 1:A:22:PHE:HD2 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 15 | 1.96 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD11 | 12 | 1.94 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD12 | 12 | 1.94 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD13 | 12 | 1.94 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD11 | 12 | 1.94 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD12 | 12 | 1.94 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD13 | 12 | 1.94 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD11 | 12 | 1.94 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD12 | 12 | 1.94 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD13 | 12 | 1.94 |
| (1,333) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HE1 | 14 | 1.94 |
| (1,333) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HE2 | 14 | 1.94 |
| (1,207) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:37:LYS:HB2 | 10 | 1.94 |
| (1,207) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:37:LYS:HB3 | 10 | 1.94 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG21 | 1:A:10:TYR:HD1 | 13 | 1.93 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG21 | 1:A:10:TYR:HD2 | 13 | 1.93 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG22 | 1:A:10:TYR:HD1 | 13 | 1.93 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG22 | 1:A:10:TYR:HD2 | 13 | 1.93 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG23 | 1:A:10:TYR:HD1 | 13 | 1.93 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG23 | 1:A:10:TYR:HD2 | 13 | 1.93 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD11 | 14 | 1.93 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD12 | 14 | 1.93 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HD13 | 14 | 1.93 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD11 | 14 | 1.93 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD12 | 14 | 1.93 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HD13 | 14 | 1.93 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD11 | 14 | 1.93 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD12 | 14 | 1.93 |
| (1,474) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HD13 | 14 | 1.93 |
| (1,366) | 1:A:22:PHE:HD1 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 3 | 1.93 |
| (1,366) | 1:A:22:PHE:HD2 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 3 | 1.93 |
| (1,361) | 1:A:25:TRP:HZ3 | 1:A:25:TRP:HZ2 | 4 | 1.93 |
| (1,359) | 1:A:36:TRP:HH2 | 1:A:36:TRP:HE3 | 4 | 1.93 |
| (1,359) | 1:A:36:TRP:HH2 | 1:A:36:TRP:HE3 | 13 | 1.93 |
| (1,333) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HE1 | 15 | 1.93 |
| (1,333) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HE2 | 15 | 1.93 |
| (1,90) | 1:A:32:LYS:HB3 | 1:A:33:LYS:H | 15 | 1.92 |
| (1,376) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HE22 | 8 | 1.92 |
| (1,376) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HE21 | 8 | 1.92 |
| (1,361) | 1:A:25:TRP:HZ3 | 1:A:25:TRP:HZ2 | 1 | 1.92 |
| (1,361) | 1:A:25:TRP:HZ3 | 1:A:25:TRP:HZ2 | 2 | 1.92 |
| (1,361) | 1:A:25:TRP:HZ3 | 1:A:25:TRP:HZ2 | 3 | 1.92 |
| (1,361) | 1:A:25:TRP:HZ3 | 1:A:25:TRP:HZ2 | 5 | 1.92 |
| (1,361) | 1:A:25:TRP:HZ3 | 1:A:25:TRP:HZ2 | 6 | 1.92 |
| (1,361) | 1:A:25:TRP:HZ3 | 1:A:25:TRP:HZ2 | 7 | 1.92 |
| (1,361) | 1:A:25:TRP:HZ3 | 1:A:25:TRP:HZ2 | 8 | 1.92 |
| (1,361) | 1:A:25:TRP:HZ3 | 1:A:25:TRP:HZ2 | 9 | 1.92 |
| (1,361) | 1:A:25:TRP:HZ3 | 1:A:25:TRP:HZ2 | 10 | 1.92 |
| (1,361) | 1:A:25:TRP:HZ3 | 1:A:25:TRP:HZ2 | 11 | 1.92 |
| (1,361) | 1:A:25:TRP:HZ3 | 1:A:25:TRP:HZ2 | 12 | 1.92 |
| (1,361) | 1:A:25:TRP:HZ3 | 1:A:25:TRP:HZ2 | 13 | 1.92 |
| (1,361) | 1:A:25:TRP:HZ3 | 1:A:25:TRP:HZ2 | 14 | 1.92 |
| (1,361) | 1:A:25:TRP:HZ3 | 1:A:25:TRP:HZ2 | 15 | 1.92 |
| (1,359) | 1:A:36:TRP:HH2 | 1:A:36:TRP:HE3 | 3 | 1.92 |
| (1,359) | 1:A:36:TRP:HH2 | 1:A:36:TRP:HE3 | 5 | 1.92 |
| (1,359) | 1:A:36:TRP:HH2 | 1:A:36:TRP:HE3 | 6 | 1.92 |
| (1,359) | 1:A:36:TRP:HH2 | 1:A:36:TRP:HE3 | 9 | 1.92 |
| (1,359) | 1:A:36:TRP:HH2 | 1:A:36:TRP:HE3 | 14 | 1.92 |
| (1,333) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HE1 | 6 | 1.92 |
| (1,333) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HE2 | 6 | 1.92 |
| (1,210) | 1:A:4:GLY:HA2 | 1:A:6:PHE:H | 11 | 1.92 |
| (1,117) | 1:A:11:SER:HB2 | 1:A:12:ILE:H | 11 | 1.92 |
| (1,359) | 1:A:36:TRP:HH2 | 1:A:36:TRP:HE3 | 1 | 1.91 |
| (1,359) | 1:A:36:TRP:HH2 | 1:A:36:TRP:HE3 | 7 | 1.91 |
| (1,359) | 1:A:36:TRP:HH2 | 1:A:36:TRP:HE3 | 8 | 1.91 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,359) | 1:A:36:TRP:HH2 | 1:A:36:TRP:HE3 | 10 | 1.91 |
| (1,359) | 1:A:36:TRP:HH2 | 1:A:36:TRP:HE3 | 11 | 1.91 |
| (1,359) | 1:A:36:TRP:HH2 | 1:A:36:TRP:HE3 | 12 | 1.91 |
| (1,359) | 1:A:36:TRP:HH2 | 1:A:36:TRP:HE3 | 15 | 1.91 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:6:PHE:HB2 | 8 | 1.91 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:6:PHE:HB3 | 8 | 1.91 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 8 | 1.91 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:6:PHE:HB3 | 8 | 1.91 |
| (1,479) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HD11 | 15 | 1.9 |
| (1,479) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HD12 | 15 | 1.9 |
| (1,479) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HD13 | 15 | 1.9 |
| (1,359) | 1:A:36:TRP:HH2 | 1:A:36:TRP:HE3 | 2 | 1.9 |
| (1,343) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:36:TRP:HD1 | 9 | 1.9 |
| (1,333) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HE1 | 7 | 1.9 |
| (1,333) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HE2 | 7 | 1.9 |
| (1,210) | 1:A:4:GLY:HA2 | 1:A:6:PHE:H | 12 | 1.9 |
| (1,366) | 1:A:22:PHE:HD1 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 14 | 1.89 |
| (1,366) | 1:A:22:PHE:HD2 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 14 | 1.89 |
| (1,365) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HE3 | 1 | 1.89 |
| (1,365) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HE3 | 2 | 1.89 |
| (1,365) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HE3 | 3 | 1.89 |
| (1,365) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HE3 | 4 | 1.89 |
| (1,365) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HE3 | 5 | 1.89 |
| (1,365) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HE3 | 6 | 1.89 |
| (1,365) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HE3 | 7 | 1.89 |
| (1,365) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HE3 | 8 | 1.89 |
| (1,365) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HE3 | 9 | 1.89 |
| (1,365) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HE3 | 10 | 1.89 |
| (1,365) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HE3 | 11 | 1.89 |
| (1,365) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HE3 | 12 | 1.89 |
| (1,365) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HE3 | 13 | 1.89 |
| (1,365) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HE3 | 14 | 1.89 |
| (1,365) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HE3 | 15 | 1.89 |
| (1,311) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:11:SER:HB2 | 10 | 1.89 |
| (1,311) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:11:SER:HB2 | 10 | 1.89 |
| (1,310) | 1:A:8:SER:HB3 | 1:A:10:TYR:HD1 | 13 | 1.89 |
| (1,310) | 1:A:8:SER:HB3 | 1:A:10:TYR:HD2 | 13 | 1.89 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:6:PHE:HB2 | 1 | 1.89 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:6:PHE:HB3 | 1 | 1.89 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 1 | 1.89 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:6:PHE:HB3 | 1 | 1.89 |
| (1,276) | 1:A:36:TRP:HA | 1:A:36:TRP:HE3 | 5 | 1.89 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,261) | 1:A:32:LYS:HG2 | 1:A:36:TRP:H | 3 | 1.89 |
| (1,261) | 1:A:32:LYS:HG3 | 1:A:36:TRP:H | 3 | 1.89 |
| (1,333) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HE1 | 13 | 1.88 |
| (1,333) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HE2 | 13 | 1.88 |
| (1,261) | 1:A:32:LYS:HG2 | 1:A:36:TRP:H | 4 | 1.88 |
| (1,261) | 1:A:32:LYS:HG3 | 1:A:36:TRP:H | 4 | 1.88 |
| (1,210) | 1:A:4:GLY:HA2 | 1:A:6:PHE:H | 13 | 1.88 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG21 | 1:A:10:TYR:HD1 | 1 | 1.87 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG21 | 1:A:10:TYR:HD2 | 1 | 1.87 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG22 | 1:A:10:TYR:HD1 | 1 | 1.87 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG22 | 1:A:10:TYR:HD2 | 1 | 1.87 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG23 | 1:A:10:TYR:HD1 | 1 | 1.87 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG23 | 1:A:10:TYR:HD2 | 1 | 1.87 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:H | 8 | 1.87 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:H | 8 | 1.87 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:H | 8 | 1.87 |
| (1,327) | 1:A:34:ASN:HD22 | 1:A:38:HIS:HA | 12 | 1.87 |
| (1,323) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HB2 | 15 | 1.87 |
| (1,323) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HB3 | 15 | 1.87 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:H | 12 | 1.86 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:H | 12 | 1.86 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:H | 12 | 1.86 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:HG2 | 9 | 1.86 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:HG3 | 9 | 1.86 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:HG2 | 9 | 1.86 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:HG3 | 9 | 1.86 |
| (1,117) | 1:A:11:SER:HB2 | 1:A:12:ILE:H | 1 | 1.86 |
| (1,117) | 1:A:11:SER:HB2 | 1:A:12:ILE:H | 8 | 1.86 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 2 | 1.85 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 2 | 1.85 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 2 | 1.85 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD11 | 2 | 1.85 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD12 | 2 | 1.85 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD13 | 2 | 1.85 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:H | 4 | 1.85 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:H | 4 | 1.85 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:H | 4 | 1.85 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:H | 13 | 1.85 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:H | 13 | 1.85 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:H | 13 | 1.85 |
| (1,366) | 1:A:22:PHE:HD1 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 12 | 1.85 |
| (1,366) | 1:A:22:PHE:HD2 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 12 | 1.85 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 1 | 1.84 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 1 | 1.84 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 1 | 1.84 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD11 | 1 | 1.84 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD12 | 1 | 1.84 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD13 | 1 | 1.84 |
| (1,323) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HB2 | 12 | 1.84 |
| (1,323) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HB3 | 12 | 1.84 |
| (1,117) | 1:A:11:SER:HB2 | 1:A:12:ILE:H | 2 | 1.84 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG21 | 1:A:7:ILE:H | 13 | 1.83 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG22 | 1:A:7:ILE:H | 13 | 1.83 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG23 | 1:A:7:ILE:H | 13 | 1.83 |
| (1,207) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:37:LYS:HB2 | 6 | 1.83 |
| (1,207) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:37:LYS:HB3 | 6 | 1.83 |
| (1,336) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:24:ASN:HD22 | 4 | 1.82 |
| (1,272) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG12 | 14 | 1.82 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:5:THR:HG21 | 4 | 1.81 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:5:THR:HG22 | 4 | 1.81 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:5:THR:HG23 | 4 | 1.81 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:5:THR:HG21 | 4 | 1.81 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:5:THR:HG22 | 4 | 1.81 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:5:THR:HG23 | 4 | 1.81 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HG2 | 1 | 1.81 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HG3 | 1 | 1.81 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HG2 | 1 | 1.81 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HG3 | 1 | 1.81 |
| (1,376) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HE22 | 9 | 1.81 |
| (1,376) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HE21 | 9 | 1.81 |
| (1,366) | 1:A:22:PHE:HD1 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 2 | 1.81 |
| (1,366) | 1:A:22:PHE:HD2 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 2 | 1.81 |
| (1,233) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HG13 | 8 | 1.81 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 9 | 1.8 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 9 | 1.8 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 9 | 1.8 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD11 | 9 | 1.8 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD12 | 9 | 1.8 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD13 | 9 | 1.8 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:29:GLN:H | 12 | 1.8 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:29:GLN:H | 12 | 1.8 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:29:GLN:H | 12 | 1.8 |
| (1,333) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HE1 | 10 | 1.8 |
| (1,333) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HE2 | 10 | 1.8 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,210) | 1:A:4:GLY:HA2 | 1:A:6:PHE:H | 3 | 1.8 |
| (1,207) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:37:LYS:HB2 | 15 | 1.8 |
| (1,207) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:37:LYS:HB3 | 15 | 1.8 |
| (1,407) | 1:A:25:TRP:HZ2 | 1:A:26:LEU:HG | 9 | 1.79 |
| (1,333) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HE1 | 11 | 1.79 |
| (1,333) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HE2 | 11 | 1.79 |
| (1,258) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:H | 3 | 1.79 |
| (1,258) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:H | 3 | 1.79 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG21 | 1:A:7:ILE:H | 3 | 1.78 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG22 | 1:A:7:ILE:H | 3 | 1.78 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG23 | 1:A:7:ILE:H | 3 | 1.78 |
| (2,39) | 1:A:28:ALA:HB1 | 1:A:29:GLN:HE22 | 3 | 1.77 |
| (2,39) | 1:A:28:ALA:HB2 | 1:A:29:GLN:HE22 | 3 | 1.77 |
| (2,39) | 1:A:28:ALA:HB3 | 1:A:29:GLN:HE22 | 3 | 1.77 |
| (1,90) | 1:A:32:LYS:HB3 | 1:A:33:LYS:H | 2 | 1.77 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:H | 5 | 1.77 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:H | 5 | 1.77 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:H | 5 | 1.77 |
| (1,336) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:24:ASN:HD22 | 6 | 1.77 |
| (1,333) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HE1 | 2 | 1.77 |
| (1,333) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HE2 | 2 | 1.77 |
| (1,207) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:37:LYS:HB2 | 11 | 1.77 |
| (1,207) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:37:LYS:HB3 | 11 | 1.77 |
| (2,39) | 1:A:28:ALA:HB1 | 1:A:29:GLN:HE22 | 11 | 1.76 |
| (2,39) | 1:A:28:ALA:HB2 | 1:A:29:GLN:HE22 | 11 | 1.76 |
| (2,39) | 1:A:28:ALA:HB3 | 1:A:29:GLN:HE22 | 11 | 1.76 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:13:ALA:HB1 | 4 | 1.76 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:13:ALA:HB2 | 4 | 1.76 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:13:ALA:HB3 | 4 | 1.76 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:13:ALA:HB1 | 4 | 1.76 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:13:ALA:HB2 | 4 | 1.76 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:13:ALA:HB3 | 4 | 1.76 |
| (2,27) | 1:A:6:PHE:HE1 | 1:A:7:ILE:HG21 | 1 | 1.76 |
| (2,27) | 1:A:6:PHE:HE1 | 1:A:7:ILE:HG22 | 1 | 1.76 |
| (2,27) | 1:A:6:PHE:HE1 | 1:A:7:ILE:HG23 | 1 | 1.76 |
| (2,27) | 1:A:6:PHE:HE2 | 1:A:7:ILE:HG21 | 1 | 1.76 |
| (2,27) | 1:A:6:PHE:HE2 | 1:A:7:ILE:HG22 | 1 | 1.76 |
| (2,27) | 1:A:6:PHE:HE2 | 1:A:7:ILE:HG23 | 1 | 1.76 |
| (1,333) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HE1 | 3 | 1.76 |
| (1,333) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HE2 | 3 | 1.76 |
| (1,328) | 1:A:34:ASN:HD22 | 1:A:38:HIS:HB2 | 10 | 1.76 |
| (1,333) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HE1 | 12 | 1.75 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,333) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HE2 | 12 | 1.75 |
| (1,207) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:37:LYS:HB2 | 1 | 1.75 |
| (1,207) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:37:LYS:HB3 | 1 | 1.75 |
| (1,366) | 1:A:22:PHE:HD1 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 5 | 1.74 |
| (1,366) | 1:A:22:PHE:HD2 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 5 | 1.74 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 5 | 1.73 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 5 | 1.73 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 5 | 1.73 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD11 | 5 | 1.73 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD12 | 5 | 1.73 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD13 | 5 | 1.73 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG21 | 1:A:7:ILE:H | 2 | 1.73 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG22 | 1:A:7:ILE:H | 2 | 1.73 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG23 | 1:A:7:ILE:H | 2 | 1.73 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG21 | 1:A:7:ILE:H | 8 | 1.73 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG22 | 1:A:7:ILE:H | 8 | 1.73 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG23 | 1:A:7:ILE:H | 8 | 1.73 |
| (1,210) | 1:A:4:GLY:HA2 | 1:A:6:PHE:H | 10 | 1.73 |
| (1,90) | 1:A:32:LYS:HB3 | 1:A:33:LYS:H | 1 | 1.72 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:29:GLN:H | 3 | 1.72 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:29:GLN:H | 3 | 1.72 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:29:GLN:H | 3 | 1.72 |
| (1,318) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HG | 13 | 1.72 |
| (2,6) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:2:ALA:HA | 3 | 1.71 |
| (2,6) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:2:ALA:HA | 3 | 1.71 |
| (2,6) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:2:ALA:HA | 11 | 1.71 |
| (2,6) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:2:ALA:HA | 11 | 1.71 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE1 | 3 | 1.71 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE2 | 3 | 1.71 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE3 | 3 | 1.71 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE1 | 3 | 1.71 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE2 | 3 | 1.71 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE3 | 3 | 1.71 |
| (1,328) | 1:A:34:ASN:HD22 | 1:A:38:HIS:HB2 | 2 | 1.71 |
| (1,207) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:37:LYS:HB2 | 12 | 1.71 |
| (1,207) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:37:LYS:HB3 | 12 | 1.71 |
| (2,36) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:12:ILE:HD11 | 3 | 1.7 |
| (2,36) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:12:ILE:HD12 | 3 | 1.7 |
| (2,36) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:12:ILE:HD13 | 3 | 1.7 |
| (2,36) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 3 | 1.7 |
| (2,36) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 3 | 1.7 |
| (2,36) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 3 | 1.7 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (2,28) | 1:A:6:PHE:HE1 | 1:A:7:ILE:HD11 | 1 | 1.7 |
| (2,28) | 1:A:6:PHE:HE1 | 1:A:7:ILE:HD12 | 1 | 1.7 |
| (2,28) | 1:A:6:PHE:HE1 | 1:A:7:ILE:HD13 | 1 | 1.7 |
| (2,28) | 1:A:6:PHE:HE2 | 1:A:7:ILE:HD11 | 1 | 1.7 |
| (2,28) | 1:A:6:PHE:HE2 | 1:A:7:ILE:HD12 | 1 | 1.7 |
| (2,28) | 1:A:6:PHE:HE2 | 1:A:7:ILE:HD13 | 1 | 1.7 |
| (1,90) | 1:A:32:LYS:HB3 | 1:A:33:LYS:H | 9 | 1.7 |
| (1,89) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HB3 | 15 | 1.7 |
| (1,333) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HE1 | 4 | 1.7 |
| (1,333) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HE2 | 4 | 1.7 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:H | 14 | 1.69 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:H | 14 | 1.69 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:H | 14 | 1.69 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD11 | 1:A:21:ASP:H | 2 | 1.69 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD12 | 1:A:21:ASP:H | 2 | 1.69 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD13 | 1:A:21:ASP:H | 2 | 1.69 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:6:PHE:HB2 | 5 | 1.69 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:6:PHE:HB3 | 5 | 1.69 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 5 | 1.69 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:6:PHE:HB3 | 5 | 1.69 |
| (1,276) | 1:A:36:TRP:HA | 1:A:36:TRP:HE3 | 9 | 1.69 |
| (1,258) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:H | 12 | 1.69 |
| (1,258) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:H | 12 | 1.69 |
| (2,6) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:2:ALA:HA | 13 | 1.68 |
| (2,6) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:2:ALA:HA | 13 | 1.68 |
| (1,90) | 1:A:32:LYS:HB3 | 1:A:33:LYS:H | 3 | 1.68 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG21 | 1 | 1.68 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG22 | 1 | 1.68 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG23 | 1 | 1.68 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG21 | 1 | 1.68 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG22 | 1 | 1.68 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG23 | 1 | 1.68 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG21 | 1:A:7:ILE:H | 5 | 1.68 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG22 | 1:A:7:ILE:H | 5 | 1.68 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG23 | 1:A:7:ILE:H | 5 | 1.68 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HG2 | 13 | 1.67 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HG3 | 13 | 1.67 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HG2 | 13 | 1.67 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HG3 | 13 | 1.67 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 8 | 1.67 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 8 | 1.67 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 8 | 1.67 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 8 | 1.67 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 8 | 1.67 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 8 | 1.67 |
| (1,373) | 1:A:36:TRP:HD1 | 1:A:36:TRP:HZ2 | 5 | 1.67 |
| (1,373) | 1:A:36:TRP:HD1 | 1:A:36:TRP:HZ2 | 9 | 1.67 |
| (1,373) | 1:A:36:TRP:HD1 | 1:A:36:TRP:HZ2 | 14 | 1.67 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:6:PHE:HB2 | 4 | 1.67 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:6:PHE:HB3 | 4 | 1.67 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 4 | 1.67 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:6:PHE:HB3 | 4 | 1.67 |
| (2,6) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:2:ALA:HA | 2 | 1.66 |
| (2,6) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:2:ALA:HA | 2 | 1.66 |
| (2,6) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:2:ALA:HA | 7 | 1.66 |
| (2,6) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:2:ALA:HA | 7 | 1.66 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:5:THR:HG21 | 9 | 1.66 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:5:THR:HG22 | 9 | 1.66 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:5:THR:HG23 | 9 | 1.66 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:5:THR:HG21 | 9 | 1.66 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:5:THR:HG22 | 9 | 1.66 |
| (2,38) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:5:THR:HG23 | 9 | 1.66 |
| (1,90) | 1:A:32:LYS:HB3 | 1:A:33:LYS:H | 10 | 1.66 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:H | 6 | 1.66 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:H | 6 | 1.66 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:H | 6 | 1.66 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:29:GLN:H | 13 | 1.66 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:29:GLN:H | 13 | 1.66 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:29:GLN:H | 13 | 1.66 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG21 | 1:A:7:ILE:H | 11 | 1.66 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG22 | 1:A:7:ILE:H | 11 | 1.66 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG23 | 1:A:7:ILE:H | 11 | 1.66 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:HG2 | 7 | 1.66 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:HG3 | 7 | 1.66 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:HG2 | 7 | 1.66 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:HG3 | 7 | 1.66 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:HG2 | 11 | 1.66 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:HG3 | 11 | 1.66 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:HG2 | 11 | 1.66 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:HG3 | 11 | 1.66 |
| (1,373) | 1:A:36:TRP:HD1 | 1:A:36:TRP:HZ2 | 3 | 1.66 |
| (1,373) | 1:A:36:TRP:HD1 | 1:A:36:TRP:HZ2 | 6 | 1.66 |
| (1,373) | 1:A:36:TRP:HD1 | 1:A:36:TRP:HZ2 | 7 | 1.66 |
| (1,373) | 1:A:36:TRP:HD1 | 1:A:36:TRP:HZ2 | 8 | 1.66 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,373) | 1:A:36:TRP:HD1 | 1:A:36:TRP:HZ2 | 11 | 1.66 |
| (1,373) | 1:A:36:TRP:HD1 | 1:A:36:TRP:HZ2 | 12 | 1.66 |
| (1,373) | 1:A:36:TRP:HD1 | 1:A:36:TRP:HZ2 | 13 | 1.66 |
| (1,373) | 1:A:36:TRP:HD1 | 1:A:36:TRP:HZ2 | 15 | 1.66 |
| (1,263) | 1:A:12:ILE:HG12 | 1:A:13:ALA:H | 4 | 1.66 |
| (1,207) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:37:LYS:HB2 | 8 | 1.66 |
| (1,207) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:37:LYS:HB3 | 8 | 1.66 |
| (2,6) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:2:ALA:HA | 12 | 1.65 |
| (2,6) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:2:ALA:HA | 12 | 1.65 |
| (1,90) | 1:A:32:LYS:HB3 | 1:A:33:LYS:H | 14 | 1.65 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 14 | 1.65 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 14 | 1.65 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 14 | 1.65 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD11 | 14 | 1.65 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD12 | 14 | 1.65 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD13 | 14 | 1.65 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG21 | 1:A:7:ILE:H | 4 | 1.65 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG22 | 1:A:7:ILE:H | 4 | 1.65 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG23 | 1:A:7:ILE:H | 4 | 1.65 |
| (1,373) | 1:A:36:TRP:HD1 | 1:A:36:TRP:HZ2 | 1 | 1.65 |
| (1,373) | 1:A:36:TRP:HD1 | 1:A:36:TRP:HZ2 | 10 | 1.65 |
| (1,366) | 1:A:22:PHE:HD1 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 6 | 1.65 |
| (1,366) | 1:A:22:PHE:HD2 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 6 | 1.65 |
| (1,366) | 1:A:22:PHE:HD1 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 11 | 1.65 |
| (1,366) | 1:A:22:PHE:HD2 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 11 | 1.65 |
| (1,328) | 1:A:34:ASN:HD22 | 1:A:38:HIS:HB2 | 3 | 1.65 |
| (1,328) | 1:A:34:ASN:HD22 | 1:A:38:HIS:HB2 | 11 | 1.65 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HB2 | 15 | 1.64 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HB3 | 15 | 1.64 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HB2 | 15 | 1.64 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HB3 | 15 | 1.64 |
| (1,90) | 1:A:32:LYS:HB3 | 1:A:33:LYS:H | 5 | 1.64 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG21 | 1:A:7:ILE:H | 12 | 1.64 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG22 | 1:A:7:ILE:H | 12 | 1.64 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG23 | 1:A:7:ILE:H | 12 | 1.64 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:HG2 | 2 | 1.64 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:HG3 | 2 | 1.64 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:HG2 | 2 | 1.64 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:HG3 | 2 | 1.64 |
| (1,373) | 1:A:36:TRP:HD1 | 1:A:36:TRP:HZ2 | 2 | 1.64 |
| (1,373) | 1:A:36:TRP:HD1 | 1:A:36:TRP:HZ2 | 4 | 1.64 |
| (1,366) | 1:A:22:PHE:HD1 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 10 | 1.64 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,366) | 1:A:22:PHE:HD2 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 10 | 1.64 |
| (1,336) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:24:ASN:HD22 | 13 | 1.64 |
| (1,318) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HG | 4 | 1.64 |
| (1,421) | 1:A:14:MET:HE1 | 1:A:15:ASP:H | 5 | 1.63 |
| (1,421) | 1:A:14:MET:HE2 | 1:A:15:ASP:H | 5 | 1.63 |
| (1,421) | 1:A:14:MET:HE3 | 1:A:15:ASP:H | 5 | 1.63 |
| (1,420) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HE1 | 6 | 1.63 |
| (1,420) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HE2 | 6 | 1.63 |
| (1,420) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HE3 | 6 | 1.63 |
| (1,388) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:HE21 | 8 | 1.63 |
| (1,388) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:HE22 | 8 | 1.63 |
| (1,261) | 1:A:32:LYS:HG2 | 1:A:36:TRP:H | 1 | 1.63 |
| (1,261) | 1:A:32:LYS:HG3 | 1:A:36:TRP:H | 1 | 1.63 |
| (1,137) | 1:A:38:HIS:HA | 1:A:40:ILE:H | 4 | 1.63 |
| (2,6) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:2:ALA:HA | 5 | 1.62 |
| (2,6) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:2:ALA:HA | 5 | 1.62 |
| (2,6) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:2:ALA:HA | 15 | 1.62 |
| (2,6) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:2:ALA:HA | 15 | 1.62 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE1 | 15 | 1.62 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE2 | 15 | 1.62 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE3 | 15 | 1.62 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE1 | 15 | 1.62 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE2 | 15 | 1.62 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE3 | 15 | 1.62 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 10 | 1.62 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 10 | 1.62 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 10 | 1.62 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD11 | 10 | 1.62 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD12 | 10 | 1.62 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD13 | 10 | 1.62 |
| (2,6) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:2:ALA:HA | 6 | 1.61 |
| (2,6) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:2:ALA:HA | 6 | 1.61 |
| (2,19) | 1:A:6:PHE:HE1 | 1:A:10:TYR:HD1 | 8 | 1.61 |
| (2,19) | 1:A:6:PHE:HE1 | 1:A:10:TYR:HD2 | 8 | 1.61 |
| (2,19) | 1:A:6:PHE:HE2 | 1:A:10:TYR:HD1 | 8 | 1.61 |
| (2,19) | 1:A:6:PHE:HE2 | 1:A:10:TYR:HD2 | 8 | 1.61 |
| (1,207) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:37:LYS:HB2 | 2 | 1.61 |
| (1,207) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:37:LYS:HB3 | 2 | 1.61 |
| (2,6) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:2:ALA:HA | 9 | 1.6 |
| (2,6) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:2:ALA:HA | 9 | 1.6 |
| (2,6) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:2:ALA:HA | 10 | 1.6 |
| (2,6) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:2:ALA:HA | 10 | 1.6 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (2,6) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:2:ALA:HA | 14 | 1.6 |
| (2,6) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:2:ALA:HA | 14 | 1.6 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 7 | 1.6 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 7 | 1.6 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 7 | 1.6 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD11 | 7 | 1.6 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD12 | 7 | 1.6 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD13 | 7 | 1.6 |
| (1,187) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:38:HIS:H | 6 | 1.6 |
| (1,90) | 1:A:32:LYS:HB3 | 1:A:33:LYS:H | 7 | 1.59 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:H | 15 | 1.59 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:H | 15 | 1.59 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:H | 15 | 1.59 |
| (1,357) | 1:A:36:TRP:HZ3 | 1:A:36:TRP:HZ2 | 3 | 1.59 |
| (1,357) | 1:A:36:TRP:HZ3 | 1:A:36:TRP:HZ2 | 5 | 1.59 |
| (1,357) | 1:A:36:TRP:HZ3 | 1:A:36:TRP:HZ2 | 9 | 1.59 |
| (1,261) | 1:A:32:LYS:HG2 | 1:A:36:TRP:H | 5 | 1.59 |
| (1,261) | 1:A:32:LYS:HG3 | 1:A:36:TRP:H | 5 | 1.59 |
| (1,246) | 1:A:33:LYS:HD2 | 1:A:34:ASN:H | 12 | 1.59 |
| (1,246) | 1:A:33:LYS:HD3 | 1:A:34:ASN:H | 12 | 1.59 |
| (1,199) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:ALA:H | 14 | 1.59 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG21 | 11 | 1.58 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG22 | 11 | 1.58 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG23 | 11 | 1.58 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:41:THR:HG21 | 11 | 1.58 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:41:THR:HG22 | 11 | 1.58 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:41:THR:HG23 | 11 | 1.58 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:29:GLN:H | 4 | 1.58 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:29:GLN:H | 4 | 1.58 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:29:GLN:H | 4 | 1.58 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:29:GLN:H | 15 | 1.58 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:29:GLN:H | 15 | 1.58 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:29:GLN:H | 15 | 1.58 |
| (1,357) | 1:A:36:TRP:HZ3 | 1:A:36:TRP:HZ2 | 1 | 1.58 |
| (1,357) | 1:A:36:TRP:HZ3 | 1:A:36:TRP:HZ2 | 2 | 1.58 |
| (1,357) | 1:A:36:TRP:HZ3 | 1:A:36:TRP:HZ2 | 4 | 1.58 |
| (1,357) | 1:A:36:TRP:HZ3 | 1:A:36:TRP:HZ2 | 6 | 1.58 |
| (1,357) | 1:A:36:TRP:HZ3 | 1:A:36:TRP:HZ2 | 7 | 1.58 |
| (1,357) | 1:A:36:TRP:HZ3 | 1:A:36:TRP:HZ2 | 8 | 1.58 |
| (1,357) | 1:A:36:TRP:HZ3 | 1:A:36:TRP:HZ2 | 10 | 1.58 |
| (1,357) | 1:A:36:TRP:HZ3 | 1:A:36:TRP:HZ2 | 11 | 1.58 |
| (1,357) | 1:A:36:TRP:HZ3 | 1:A:36:TRP:HZ2 | 12 | 1.58 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,357) | 1:A:36:TRP:HZ3 | 1:A:36:TRP:HZ2 | 13 | 1.58 |
| (1,357) | 1:A:36:TRP:HZ3 | 1:A:36:TRP:HZ2 | 14 | 1.58 |
| (1,357) | 1:A:36:TRP:HZ3 | 1:A:36:TRP:HZ2 | 15 | 1.58 |
| (1,310) | 1:A:8:SER:HB3 | 1:A:10:TYR:HD1 | 2 | 1.58 |
| (1,310) | 1:A:8:SER:HB3 | 1:A:10:TYR:HD2 | 2 | 1.58 |
| (1,210) | 1:A:4:GLY:HA2 | 1:A:6:PHE:H | 9 | 1.58 |
| (1,168) | 1:A:4:GLY:H | 1:A:5:THR:H | 13 | 1.58 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG21 | 14 | 1.57 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG22 | 14 | 1.57 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG23 | 14 | 1.57 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 12 | 1.57 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 12 | 1.57 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 12 | 1.57 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD11 | 12 | 1.57 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD12 | 12 | 1.57 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD13 | 12 | 1.57 |
| (1,420) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HE1 | 9 | 1.57 |
| (1,420) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HE2 | 9 | 1.57 |
| (1,420) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HE3 | 9 | 1.57 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG21 | 1:A:7:ILE:H | 15 | 1.57 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG22 | 1:A:7:ILE:H | 15 | 1.57 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG23 | 1:A:7:ILE:H | 15 | 1.57 |
| (1,207) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:37:LYS:HB2 | 14 | 1.57 |
| (1,207) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:37:LYS:HB3 | 14 | 1.57 |
| (2,6) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:2:ALA:HA | 8 | 1.56 |
| (2,6) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:2:ALA:HA | 8 | 1.56 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:13:ALA:HB1 | 11 | 1.56 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:13:ALA:HB2 | 11 | 1.56 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:13:ALA:HB3 | 11 | 1.56 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:13:ALA:HB1 | 11 | 1.56 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:13:ALA:HB2 | 11 | 1.56 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:13:ALA:HB3 | 11 | 1.56 |
| (1,73) | 1:A:38:HIS:HB2 | 1:A:39:ASN:H | 8 | 1.56 |
| (1,73) | 1:A:38:HIS:HB3 | 1:A:39:ASN:H | 8 | 1.56 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG21 | 15 | 1.56 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG22 | 15 | 1.56 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG23 | 15 | 1.56 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD11 | 1:A:21:ASP:H | 12 | 1.56 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD12 | 1:A:21:ASP:H | 12 | 1.56 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD13 | 1:A:21:ASP:H | 12 | 1.56 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG21 | 1:A:7:ILE:H | 6 | 1.56 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG22 | 1:A:7:ILE:H | 6 | 1.56 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG23 | 1:A:7:ILE:H | 6 | 1.56 |
| (1,328) | 1:A:34:ASN:HD22 | 1:A:38:HIS:HB2 | 5 | 1.56 |
| (1,208) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:HB2 | 13 | 1.56 |
| (1,208) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:HB3 | 13 | 1.56 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG21 | 1:A:7:ILE:H | 7 | 1.55 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG22 | 1:A:7:ILE:H | 7 | 1.55 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG23 | 1:A:7:ILE:H | 7 | 1.55 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG21 | 1:A:7:ILE:H | 10 | 1.55 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG22 | 1:A:7:ILE:H | 10 | 1.55 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG23 | 1:A:7:ILE:H | 10 | 1.55 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:HG2 | 14 | 1.55 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:HG3 | 14 | 1.55 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:HG2 | 14 | 1.55 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:HG3 | 14 | 1.55 |
| (1,333) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HE1 | 8 | 1.55 |
| (1,333) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HE2 | 8 | 1.55 |
| (1,263) | 1:A:12:ILE:HG12 | 1:A:13:ALA:H | 8 | 1.55 |
| (1,261) | 1:A:32:LYS:HG2 | 1:A:36:TRP:H | 14 | 1.55 |
| (1,261) | 1:A:32:LYS:HG3 | 1:A:36:TRP:H | 14 | 1.55 |
| (1,210) | 1:A:4:GLY:HA2 | 1:A:6:PHE:H | 5 | 1.55 |
| (1,207) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:37:LYS:HB2 | 3 | 1.55 |
| (1,207) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:37:LYS:HB3 | 3 | 1.55 |
| (2,39) | 1:A:28:ALA:HB1 | 1:A:29:GLN:HE22 | 15 | 1.54 |
| (2,39) | 1:A:28:ALA:HB2 | 1:A:29:GLN:HE22 | 15 | 1.54 |
| (2,39) | 1:A:28:ALA:HB3 | 1:A:29:GLN:HE22 | 15 | 1.54 |
| (1,73) | 1:A:38:HIS:HB2 | 1:A:39:ASN:H | 12 | 1.54 |
| (1,73) | 1:A:38:HIS:HB3 | 1:A:39:ASN:H | 12 | 1.54 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD11 | 1:A:21:ASP:H | 10 | 1.54 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD12 | 1:A:21:ASP:H | 10 | 1.54 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD13 | 1:A:21:ASP:H | 10 | 1.54 |
| (1,420) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HE1 | 15 | 1.54 |
| (1,420) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HE2 | 15 | 1.54 |
| (1,420) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HE3 | 15 | 1.54 |
| (1,310) | 1:A:8:SER:HB3 | 1:A:10:TYR:HD1 | 14 | 1.54 |
| (1,310) | 1:A:8:SER:HB3 | 1:A:10:TYR:HD2 | 14 | 1.54 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG21 | 9 | 1.53 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG22 | 9 | 1.53 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG23 | 9 | 1.53 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:41:THR:HG21 | 9 | 1.53 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:41:THR:HG22 | 9 | 1.53 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:41:THR:HG23 | 9 | 1.53 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD11 | 1:A:21:ASP:H | 7 | 1.53 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD12 | 1:A:21:ASP:H | 7 | 1.53 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD13 | 1:A:21:ASP:H | 7 | 1.53 |
| (1,323) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HB2 | 5 | 1.53 |
| (1,323) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HB3 | 5 | 1.53 |
| (1,291) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:25:TRP:HE3 | 13 | 1.53 |
| (1,265) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:H | 11 | 1.53 |
| (1,259) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:31:GLY:H | 3 | 1.53 |
| (1,259) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:31:GLY:H | 3 | 1.53 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD11 | 1:A:21:ASP:H | 3 | 1.52 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD12 | 1:A:21:ASP:H | 3 | 1.52 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD13 | 1:A:21:ASP:H | 3 | 1.52 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG21 | 1:A:7:ILE:H | 14 | 1.52 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG22 | 1:A:7:ILE:H | 14 | 1.52 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG23 | 1:A:7:ILE:H | 14 | 1.52 |
| (1,215) | 1:A:36:TRP:H | 1:A:38:HIS:H | 6 | 1.52 |
| (1,206) | 1:A:7:ILE:HB | 1:A:9:ASP:H | 3 | 1.52 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:H | 2 | 1.51 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:H | 2 | 1.51 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:H | 2 | 1.51 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD11 | 1:A:21:ASP:H | 8 | 1.51 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD12 | 1:A:21:ASP:H | 8 | 1.51 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD13 | 1:A:21:ASP:H | 8 | 1.51 |
| (1,420) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HE1 | 2 | 1.51 |
| (1,420) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HE2 | 2 | 1.51 |
| (1,420) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HE3 | 2 | 1.51 |
| (1,272) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG12 | 6 | 1.51 |
| (2,6) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:2:ALA:HA | 1 | 1.5 |
| (2,6) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:2:ALA:HA | 1 | 1.5 |
| (1,8) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:10:TYR:HB2 | 15 | 1.5 |
| (1,73) | 1:A:38:HIS:HB2 | 1:A:39:ASN:H | 1 | 1.5 |
| (1,73) | 1:A:38:HIS:HB3 | 1:A:39:ASN:H | 1 | 1.5 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG21 | 1:A:9:ASP:H | 3 | 1.5 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG22 | 1:A:9:ASP:H | 3 | 1.5 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG23 | 1:A:9:ASP:H | 3 | 1.5 |
| (1,272) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG12 | 2 | 1.5 |
| (1,263) | 1:A:12:ILE:HG12 | 1:A:13:ALA:H | 3 | 1.5 |
| (1,73) | 1:A:38:HIS:HB2 | 1:A:39:ASN:H | 3 | 1.49 |
| (1,73) | 1:A:38:HIS:HB3 | 1:A:39:ASN:H | 3 | 1.49 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:H | 3 | 1.49 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:H | 3 | 1.49 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:H | 3 | 1.49 |
| (1,261) | 1:A:32:LYS:HG2 | 1:A:36:TRP:H | 2 | 1.49 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,261) | 1:A:32:LYS:HG3 | 1:A:36:TRP:H | 2 | 1.49 |
| (1,248) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:37:LYS:HD2 | 9 | 1.49 |
| (1,248) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:37:LYS:HD3 | 9 | 1.49 |
| (1,222) | 1:A:20:GLN:HA | 1:A:24:ASN:H | 15 | 1.49 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD11 | 1:A:21:ASP:H | 5 | 1.48 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD12 | 1:A:21:ASP:H | 5 | 1.48 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD13 | 1:A:21:ASP:H | 5 | 1.48 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD11 | 1:A:21:ASP:H | 13 | 1.48 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD12 | 1:A:21:ASP:H | 13 | 1.48 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD13 | 1:A:21:ASP:H | 13 | 1.48 |
| (1,323) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HB2 | 10 | 1.48 |
| (1,323) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HB3 | 10 | 1.48 |
| (1,323) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HB2 | 14 | 1.48 |
| (1,323) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HB3 | 14 | 1.48 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HB2 | 6 | 1.47 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HB3 | 6 | 1.47 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HB2 | 6 | 1.47 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HB3 | 6 | 1.47 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG21 | 7 | 1.47 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG22 | 7 | 1.47 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG23 | 7 | 1.47 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:41:THR:HG21 | 7 | 1.47 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:41:THR:HG22 | 7 | 1.47 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:41:THR:HG23 | 7 | 1.47 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 14 | 1.47 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 14 | 1.47 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 14 | 1.47 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 14 | 1.47 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 14 | 1.47 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 14 | 1.47 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:H | 10 | 1.47 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:H | 10 | 1.47 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:H | 10 | 1.47 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:HG2 | 3 | 1.47 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:HG3 | 3 | 1.47 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:HG2 | 3 | 1.47 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:HG3 | 3 | 1.47 |
| (1,261) | 1:A:32:LYS:HG2 | 1:A:36:TRP:H | 6 | 1.47 |
| (1,261) | 1:A:32:LYS:HG3 | 1:A:36:TRP:H | 6 | 1.47 |
| (1,261) | 1:A:32:LYS:HG2 | 1:A:36:TRP:H | 9 | 1.47 |
| (1,261) | 1:A:32:LYS:HG3 | 1:A:36:TRP:H | 9 | 1.47 |
| (1,222) | 1:A:20:GLN:HA | 1:A:24:ASN:H | 12 | 1.47 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:H | 9 | 1.46 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:H | 9 | 1.46 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:H | 9 | 1.46 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD11 | 1:A:21:ASP:H | 4 | 1.46 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD12 | 1:A:21:ASP:H | 4 | 1.46 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD13 | 1:A:21:ASP:H | 4 | 1.46 |
| (1,333) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HE1 | 1 | 1.46 |
| (1,333) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HE2 | 1 | 1.46 |
| (1,323) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HB2 | 1 | 1.46 |
| (1,323) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HB3 | 1 | 1.46 |
| (1,323) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HB2 | 7 | 1.46 |
| (1,323) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HB3 | 7 | 1.46 |
| (1,261) | 1:A:32:LYS:HG2 | 1:A:36:TRP:H | 10 | 1.46 |
| (1,261) | 1:A:32:LYS:HG3 | 1:A:36:TRP:H | 10 | 1.46 |
| (2,6) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:2:ALA:HA | 4 | 1.45 |
| (2,6) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:2:ALA:HA | 4 | 1.45 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE1 | 6 | 1.45 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE2 | 6 | 1.45 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE3 | 6 | 1.45 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE1 | 6 | 1.45 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE2 | 6 | 1.45 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE3 | 6 | 1.45 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HG2 | 11 | 1.45 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HG3 | 11 | 1.45 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HG2 | 11 | 1.45 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HG3 | 11 | 1.45 |
| (1,8) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:10:TYR:HB2 | 4 | 1.45 |
| (1,8) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:10:TYR:HB2 | 10 | 1.45 |
| (1,8) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:10:TYR:HB2 | 11 | 1.45 |
| (1,8) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:10:TYR:HB2 | 12 | 1.45 |
| (1,310) | 1:A:8:SER:HB3 | 1:A:10:TYR:HD1 | 3 | 1.45 |
| (1,310) | 1:A:8:SER:HB3 | 1:A:10:TYR:HD2 | 3 | 1.45 |
| (1,249) | 1:A:37:LYS:HD2 | 1:A:38:HIS:H | 4 | 1.45 |
| (1,249) | 1:A:37:LYS:HD3 | 1:A:38:HIS:H | 4 | 1.45 |
| (1,232) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG12 | 1 | 1.45 |
| (1,137) | 1:A:38:HIS:HA | 1:A:40:ILE:H | 7 | 1.45 |
| (1,137) | 1:A:38:HIS:HA | 1:A:40:ILE:H | 14 | 1.45 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:13:ALA:HB1 | 1 | 1.44 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:13:ALA:HB2 | 1 | 1.44 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:13:ALA:HB3 | 1 | 1.44 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:13:ALA:HB1 | 1 | 1.44 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:13:ALA:HB2 | 1 | 1.44 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:13:ALA:HB3 | 1 | 1.44 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:5:THR:HG21 | 1 | 1.44 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:5:THR:HG22 | 1 | 1.44 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:5:THR:HG23 | 1 | 1.44 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:5:THR:HG21 | 1 | 1.44 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:5:THR:HG22 | 1 | 1.44 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:5:THR:HG23 | 1 | 1.44 |
| (2,3) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:11:SER:HA | 5 | 1.44 |
| (2,3) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:11:SER:HA | 5 | 1.44 |
| (1,388) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:HE21 | 15 | 1.44 |
| (1,388) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:HE22 | 15 | 1.44 |
| (1,272) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG12 | 11 | 1.44 |
| (1,165) | 1:A:9:ASP:HB2 | 1:A:11:SER:H | 3 | 1.44 |
| (1,165) | 1:A:9:ASP:HB3 | 1:A:11:SER:H | 3 | 1.44 |
| (1,366) | 1:A:22:PHE:HD1 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 7 | 1.43 |
| (1,366) | 1:A:22:PHE:HD2 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 7 | 1.43 |
| (1,333) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HE1 | 5 | 1.43 |
| (1,333) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HE2 | 5 | 1.43 |
| (1,212) | 1:A:6:PHE:HA | 1:A:10:TYR:H | 1 | 1.43 |
| (2,9) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HB2 | 10 | 1.42 |
| (2,9) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HB3 | 10 | 1.42 |
| (2,9) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HB2 | 10 | 1.42 |
| (2,9) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HB3 | 10 | 1.42 |
| (1,8) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:10:TYR:HB2 | 6 | 1.42 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG21 | 1:A:7:ILE:H | 1 | 1.42 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG22 | 1:A:7:ILE:H | 1 | 1.42 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG23 | 1:A:7:ILE:H | 1 | 1.42 |
| (1,366) | 1:A:22:PHE:HD1 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 1 | 1.42 |
| (1,366) | 1:A:22:PHE:HD2 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 1 | 1.42 |
| (1,323) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HB2 | 2 | 1.42 |
| (1,323) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HB3 | 2 | 1.42 |
| (1,252) | 1:A:32:LYS:HD2 | 1:A:33:LYS:H | 4 | 1.42 |
| (1,252) | 1:A:32:LYS:HD3 | 1:A:33:LYS:H | 4 | 1.42 |
| (1,25) | 1:A:18:HIS:HB3 | 1:A:19:GLN:H | 14 | 1.42 |
| (1,210) | 1:A:4:GLY:HA2 | 1:A:6:PHE:H | 4 | 1.42 |
| (1,207) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:37:LYS:HB2 | 9 | 1.42 |
| (1,207) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:37:LYS:HB3 | 9 | 1.42 |
| (1,199) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:ALA:H | 13 | 1.42 |
| (1,168) | 1:A:4:GLY:H | 1:A:5:THR:H | 3 | 1.42 |
| (1,341) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:H | 8 | 1.41 |
| (2,3) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:11:SER:HA | 4 | 1.4 |
| (2,3) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:11:SER:HA | 4 | 1.4 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,8) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:10:TYR:HB2 | 7 | 1.4 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG21 | 8 | 1.4 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG22 | 8 | 1.4 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG23 | 8 | 1.4 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:41:THR:HG21 | 8 | 1.4 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:41:THR:HG22 | 8 | 1.4 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:41:THR:HG23 | 8 | 1.4 |
| (1,321) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:7:ILE:HG12 | 1 | 1.4 |
| (1,321) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:7:ILE:HG12 | 1 | 1.4 |
| (1,260) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:34:ASN:H | 15 | 1.4 |
| (1,260) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:34:ASN:H | 15 | 1.4 |
| (1,233) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HG13 | 3 | 1.4 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD21 | 7 | 1.39 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD22 | 7 | 1.39 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD23 | 7 | 1.39 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG21 | 1 | 1.39 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG22 | 1 | 1.39 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG23 | 1 | 1.39 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG21 | 1 | 1.39 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG22 | 1 | 1.39 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG23 | 1 | 1.39 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG21 | 3 | 1.39 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG22 | 3 | 1.39 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG23 | 3 | 1.39 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG21 | 3 | 1.39 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG22 | 3 | 1.39 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG23 | 3 | 1.39 |
| (1,388) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:HE21 | 12 | 1.39 |
| (1,388) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:HE22 | 12 | 1.39 |
| (1,323) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HB2 | 6 | 1.39 |
| (1,323) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HB3 | 6 | 1.39 |
| (1,25) | 1:A:18:HIS:HB3 | 1:A:19:GLN:H | 4 | 1.39 |
| (2,3) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:11:SER:HA | 9 | 1.38 |
| (2,3) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:11:SER:HA | 9 | 1.38 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG21 | 11 | 1.38 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG22 | 11 | 1.38 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG23 | 11 | 1.38 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:H | 1 | 1.38 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:H | 1 | 1.38 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:H | 1 | 1.38 |
| (1,385) | 1:A:25:TRP:HE1 | 1:A:29:GLN:HE22 | 3 | 1.38 |
| (1,385) | 1:A:25:TRP:HE1 | 1:A:29:GLN:HE21 | 3 | 1.38 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,327) | 1:A:34:ASN:HD22 | 1:A:38:HIS:HA | 4 | 1.38 |
| (1,323) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HB2 | 9 | 1.38 |
| (1,323) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HB3 | 9 | 1.38 |
| (1,318) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HG | 15 | 1.38 |
| (1,244) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HD2 | 8 | 1.38 |
| (1,244) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HD3 | 8 | 1.38 |
| (1,2) | 1:A:1:TYR:HB2 | 1:A:2:ALA:H | 1 | 1.38 |
| (1,2) | 1:A:1:TYR:HB2 | 1:A:2:ALA:H | 2 | 1.38 |
| (2,3) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:11:SER:HA | 14 | 1.37 |
| (2,3) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:11:SER:HA | 14 | 1.37 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG21 | 9 | 1.37 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG22 | 9 | 1.37 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG23 | 9 | 1.37 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD11 | 15 | 1.37 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD12 | 15 | 1.37 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD13 | 15 | 1.37 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD11 | 1:A:21:ASP:H | 6 | 1.37 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD12 | 1:A:21:ASP:H | 6 | 1.37 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD13 | 1:A:21:ASP:H | 6 | 1.37 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD11 | 1:A:21:ASP:H | 15 | 1.37 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD12 | 1:A:21:ASP:H | 15 | 1.37 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD13 | 1:A:21:ASP:H | 15 | 1.37 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:29:GLN:H | 14 | 1.37 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:29:GLN:H | 14 | 1.37 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:29:GLN:H | 14 | 1.37 |
| (2,3) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:11:SER:HA | 12 | 1.36 |
| (2,3) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:11:SER:HA | 12 | 1.36 |
| (2,3) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:11:SER:HA | 13 | 1.36 |
| (2,3) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:11:SER:HA | 13 | 1.36 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:ALA:H | 3 | 1.36 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:ALA:H | 3 | 1.36 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:ALA:H | 3 | 1.36 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:ALA:H | 4 | 1.36 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:ALA:H | 4 | 1.36 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:ALA:H | 4 | 1.36 |
| (1,388) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:HE21 | 9 | 1.36 |
| (1,388) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:HE22 | 9 | 1.36 |
| (1,263) | 1:A:12:ILE:HG12 | 1:A:13:ALA:H | 12 | 1.36 |
| (1,259) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:31:GLY:H | 8 | 1.36 |
| (1,259) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:31:GLY:H | 8 | 1.36 |
| (1,232) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG12 | 9 | 1.36 |
| (1,187) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:38:HIS:H | 3 | 1.36 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,168) | 1:A:4:GLY:H | 1:A:5:THR:H | 2 | 1.36 |
| (1,8) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:10:TYR:HB2 | 8 | 1.35 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG21 | 3 | 1.35 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG22 | 3 | 1.35 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG23 | 3 | 1.35 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 5 | 1.35 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 5 | 1.35 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 5 | 1.35 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 5 | 1.35 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 5 | 1.35 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 5 | 1.35 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:H | 7 | 1.35 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:H | 7 | 1.35 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:H | 7 | 1.35 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD11 | 1:A:21:ASP:H | 9 | 1.35 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD12 | 1:A:21:ASP:H | 9 | 1.35 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD13 | 1:A:21:ASP:H | 9 | 1.35 |
| (1,366) | 1:A:22:PHE:HD1 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 9 | 1.35 |
| (1,366) | 1:A:22:PHE:HD2 | 1:A:25:TRP:HZ3 | 9 | 1.35 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG21 | 1:A:10:TYR:HD1 | 3 | 1.34 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG21 | 1:A:10:TYR:HD2 | 3 | 1.34 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG22 | 1:A:10:TYR:HD1 | 3 | 1.34 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG22 | 1:A:10:TYR:HD2 | 3 | 1.34 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG23 | 1:A:10:TYR:HD1 | 3 | 1.34 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG23 | 1:A:10:TYR:HD2 | 3 | 1.34 |
| (2,3) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:11:SER:HA | 3 | 1.34 |
| (2,3) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:11:SER:HA | 3 | 1.34 |
| (2,3) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:11:SER:HA | 11 | 1.34 |
| (2,3) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:11:SER:HA | 11 | 1.34 |
| (2,3) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:11:SER:HA | 15 | 1.34 |
| (2,3) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:11:SER:HA | 15 | 1.34 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG21 | 13 | 1.34 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG22 | 13 | 1.34 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG23 | 13 | 1.34 |
| (1,272) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG12 | 10 | 1.34 |
| (2,3) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:11:SER:HA | 6 | 1.33 |
| (2,3) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:11:SER:HA | 6 | 1.33 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HB2 | 4 | 1.33 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HB3 | 4 | 1.33 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HB2 | 4 | 1.33 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HB3 | 4 | 1.33 |
| (1,263) | 1:A:12:ILE:HG12 | 1:A:13:ALA:H | 7 | 1.33 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,263) | 1:A:12:ILE:HG12 | 1:A:13:ALA:H | 13 | 1.33 |
| (1,258) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:H | 6 | 1.33 |
| (1,258) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:H | 6 | 1.33 |
| (1,25) | 1:A:18:HIS:HB3 | 1:A:19:GLN:H | 10 | 1.33 |
| (1,223) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:36:TRP:H | 15 | 1.33 |
| (1,208) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:HB2 | 3 | 1.33 |
| (1,208) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:HB3 | 3 | 1.33 |
| (1,172) | 1:A:4:GLY:H | 1:A:6:PHE:H | 13 | 1.33 |
| (2,3) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:11:SER:HA | 2 | 1.32 |
| (2,3) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:11:SER:HA | 2 | 1.32 |
| (2,3) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:11:SER:HA | 8 | 1.32 |
| (2,3) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:11:SER:HA | 8 | 1.32 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG21 | 10 | 1.32 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG22 | 10 | 1.32 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG23 | 10 | 1.32 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:29:GLN:H | 1 | 1.32 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:29:GLN:H | 1 | 1.32 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:29:GLN:H | 1 | 1.32 |
| (1,420) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HE1 | 12 | 1.32 |
| (1,420) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HE2 | 12 | 1.32 |
| (1,420) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HE3 | 12 | 1.32 |
| (1,406) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:7:ILE:HB | 1 | 1.32 |
| (1,406) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:7:ILE:HB | 1 | 1.32 |
| (1,25) | 1:A:18:HIS:HB3 | 1:A:19:GLN:H | 13 | 1.32 |
| (1,2) | 1:A:1:TYR:HB2 | 1:A:2:ALA:H | 4 | 1.32 |
| (1,199) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:ALA:H | 7 | 1.32 |
| (1,199) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:ALA:H | 12 | 1.32 |
| (1,117) | 1:A:11:SER:HB2 | 1:A:12:ILE:H | 5 | 1.32 |
| (2,3) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:11:SER:HA | 1 | 1.31 |
| (2,3) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:11:SER:HA | 1 | 1.31 |
| (2,3) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:11:SER:HA | 7 | 1.31 |
| (2,3) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:11:SER:HA | 7 | 1.31 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD21 | 6 | 1.31 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD22 | 6 | 1.31 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD23 | 6 | 1.31 |
| (1,25) | 1:A:18:HIS:HB3 | 1:A:19:GLN:H | 5 | 1.31 |
| (1,222) | 1:A:20:GLN:HA | 1:A:24:ASN:H | 6 | 1.31 |
| (1,207) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:37:LYS:HB2 | 5 | 1.31 |
| (1,207) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:37:LYS:HB3 | 5 | 1.31 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:ALA:H | 8 | 1.3 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:ALA:H | 8 | 1.3 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:ALA:H | 8 | 1.3 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,25) | 1:A:18:HIS:HB3 | 1:A:19:GLN:H | 3 | 1.3 |
| (1,2) | 1:A:1:TYR:HB2 | 1:A:2:ALA:H | 15 | 1.3 |
| (1,172) | 1:A:4:GLY:H | 1:A:6:PHE:H | 2 | 1.3 |
| (2,27) | 1:A:6:PHE:HE1 | 1:A:7:ILE:HG21 | 8 | 1.29 |
| (2,27) | 1:A:6:PHE:HE1 | 1:A:7:ILE:HG22 | 8 | 1.29 |
| (2,27) | 1:A:6:PHE:HE1 | 1:A:7:ILE:HG23 | 8 | 1.29 |
| (2,27) | 1:A:6:PHE:HE2 | 1:A:7:ILE:HG21 | 8 | 1.29 |
| (2,27) | 1:A:6:PHE:HE2 | 1:A:7:ILE:HG22 | 8 | 1.29 |
| (2,27) | 1:A:6:PHE:HE2 | 1:A:7:ILE:HG23 | 8 | 1.29 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:H | 11 | 1.29 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:H | 11 | 1.29 |
| (1,439) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:H | 11 | 1.29 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:20:GLN:HB2 | 3 | 1.29 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:20:GLN:HB3 | 3 | 1.29 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HB2 | 3 | 1.29 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HB3 | 3 | 1.29 |
| (1,27) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB3 | 2 | 1.29 |
| (1,27) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB3 | 4 | 1.29 |
| (1,27) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB3 | 5 | 1.29 |
| (1,27) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB3 | 8 | 1.29 |
| (1,265) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:H | 6 | 1.29 |
| (1,259) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:31:GLY:H | 6 | 1.29 |
| (1,259) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:31:GLY:H | 6 | 1.29 |
| (1,223) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:36:TRP:H | 4 | 1.29 |
| (1,217) | 1:A:1:TYR:HA | 1:A:3:GLU:H | 4 | 1.29 |
| (1,208) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:HB2 | 15 | 1.29 |
| (1,208) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:HB3 | 15 | 1.29 |
| (1,2) | 1:A:1:TYR:HB2 | 1:A:2:ALA:H | 6 | 1.29 |
| (1,152) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:24:ASN:HB2 | 8 | 1.29 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG21 | 5 | 1.28 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG22 | 5 | 1.28 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG23 | 5 | 1.28 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HB2 | 4 | 1.28 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HB3 | 4 | 1.28 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HB2 | 4 | 1.28 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HB3 | 4 | 1.28 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HB2 | 4 | 1.28 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HB3 | 4 | 1.28 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD11 | 1:A:21:ASP:H | 14 | 1.28 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD12 | 1:A:21:ASP:H | 14 | 1.28 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD13 | 1:A:21:ASP:H | 14 | 1.28 |
| (1,421) | 1:A:14:MET:HE1 | 1:A:15:ASP:H | 9 | 1.28 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,421) | 1:A:14:MET:HE2 | 1:A:15:ASP:H | 9 | 1.28 |
| (1,421) | 1:A:14:MET:HE3 | 1:A:15:ASP:H | 9 | 1.28 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:ALA:H | 12 | 1.28 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:ALA:H | 12 | 1.28 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:ALA:H | 12 | 1.28 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:HG2 | 10 | 1.28 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:HG3 | 10 | 1.28 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:HG2 | 10 | 1.28 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:HG3 | 10 | 1.28 |
| (1,27) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB3 | 11 | 1.28 |
| (1,261) | 1:A:32:LYS:HG2 | 1:A:36:TRP:H | 7 | 1.28 |
| (1,261) | 1:A:32:LYS:HG3 | 1:A:36:TRP:H | 7 | 1.28 |
| (1,246) | 1:A:33:LYS:HD2 | 1:A:34:ASN:H | 10 | 1.28 |
| (1,246) | 1:A:33:LYS:HD3 | 1:A:34:ASN:H | 10 | 1.28 |
| (1,232) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG12 | 8 | 1.28 |
| (1,222) | 1:A:20:GLN:HA | 1:A:24:ASN:H | 13 | 1.28 |
| (1,168) | 1:A:4:GLY:H | 1:A:5:THR:H | 12 | 1.28 |
| (2,3) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:11:SER:HA | 10 | 1.27 |
| (2,3) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:11:SER:HA | 10 | 1.27 |
| (1,328) | 1:A:34:ASN:HD22 | 1:A:38:HIS:HB2 | 6 | 1.27 |
| (1,27) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB3 | 6 | 1.27 |
| (1,27) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB3 | 7 | 1.27 |
| (1,27) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB3 | 10 | 1.27 |
| (1,27) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB3 | 14 | 1.27 |
| (1,25) | 1:A:18:HIS:HB3 | 1:A:19:GLN:H | 1 | 1.27 |
| (1,25) | 1:A:18:HIS:HB3 | 1:A:19:GLN:H | 2 | 1.27 |
| (1,25) | 1:A:18:HIS:HB3 | 1:A:19:GLN:H | 8 | 1.27 |
| (1,2) | 1:A:1:TYR:HB2 | 1:A:2:ALA:H | 5 | 1.27 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:6:PHE:HB2 | 6 | 1.26 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:6:PHE:HB3 | 6 | 1.26 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 6 | 1.26 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:6:PHE:HB3 | 6 | 1.26 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HG2 | 4 | 1.26 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HG3 | 4 | 1.26 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HG2 | 4 | 1.26 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HG3 | 4 | 1.26 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HB2 | 9 | 1.26 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HB3 | 9 | 1.26 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HB2 | 9 | 1.26 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HB3 | 9 | 1.26 |
| (1,53) | 1:A:32:LYS:HB2 | 1:A:33:LYS:H | 15 | 1.26 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:ALA:H | 13 | 1.26 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:ALA:H | 13 | 1.26 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:ALA:H | 13 | 1.26 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:20:GLN:HB2 | 15 | 1.26 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:20:GLN:HB3 | 15 | 1.26 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HB2 | 15 | 1.26 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HB3 | 15 | 1.26 |
| (1,27) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB3 | 1 | 1.26 |
| (1,27) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB3 | 9 | 1.26 |
| (1,27) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB3 | 12 | 1.26 |
| (1,27) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB3 | 13 | 1.26 |
| (1,27) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB3 | 15 | 1.26 |
| (1,258) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:H | 13 | 1.26 |
| (1,258) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:H | 13 | 1.26 |
| (1,249) | 1:A:37:LYS:HD2 | 1:A:38:HIS:H | 14 | 1.26 |
| (1,249) | 1:A:37:LYS:HD3 | 1:A:38:HIS:H | 14 | 1.26 |
| (1,2) | 1:A:1:TYR:HB2 | 1:A:2:ALA:H | 13 | 1.26 |
| (2,39) | 1:A:28:ALA:HB1 | 1:A:29:GLN:HE22 | 9 | 1.25 |
| (2,39) | 1:A:28:ALA:HB2 | 1:A:29:GLN:HE22 | 9 | 1.25 |
| (2,39) | 1:A:28:ALA:HB3 | 1:A:29:GLN:HE22 | 9 | 1.25 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD11 | 6 | 1.25 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD12 | 6 | 1.25 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD13 | 6 | 1.25 |
| (1,416) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HD11 | 10 | 1.25 |
| (1,416) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HD12 | 10 | 1.25 |
| (1,416) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HD13 | 10 | 1.25 |
| (1,388) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:HE21 | 6 | 1.25 |
| (1,388) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:HE22 | 6 | 1.25 |
| (1,332) | 1:A:38:HIS:HA | 1:A:38:HIS:HD2 | 3 | 1.25 |
| (1,27) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB3 | 3 | 1.25 |
| (1,252) | 1:A:32:LYS:HD2 | 1:A:33:LYS:H | 11 | 1.25 |
| (1,252) | 1:A:32:LYS:HD3 | 1:A:33:LYS:H | 11 | 1.25 |
| (1,25) | 1:A:18:HIS:HB3 | 1:A:19:GLN:H | 7 | 1.25 |
| (1,244) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HD2 | 6 | 1.25 |
| (1,244) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HD3 | 6 | 1.25 |
| (1,208) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:HB2 | 4 | 1.25 |
| (1,208) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:HB3 | 4 | 1.25 |
| (1,208) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:HB2 | 5 | 1.25 |
| (1,208) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:HB3 | 5 | 1.25 |
| (1,2) | 1:A:1:TYR:HB2 | 1:A:2:ALA:H | 10 | 1.25 |
| (1,2) | 1:A:1:TYR:HB2 | 1:A:2:ALA:H | 12 | 1.25 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:6:PHE:HB2 | 10 | 1.24 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:6:PHE:HB3 | 10 | 1.24 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 10 | 1.24 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:6:PHE:HB3 | 10 | 1.24 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG21 | 15 | 1.24 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG22 | 15 | 1.24 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG23 | 15 | 1.24 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:41:THR:HG21 | 15 | 1.24 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:41:THR:HG22 | 15 | 1.24 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:41:THR:HG23 | 15 | 1.24 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD11 | 1:A:21:ASP:H | 11 | 1.24 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD12 | 1:A:21:ASP:H | 11 | 1.24 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD13 | 1:A:21:ASP:H | 11 | 1.24 |
| (1,420) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HE1 | 7 | 1.24 |
| (1,420) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HE2 | 7 | 1.24 |
| (1,420) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HE3 | 7 | 1.24 |
| (1,343) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:36:TRP:HD1 | 3 | 1.24 |
| (1,246) | 1:A:33:LYS:HD2 | 1:A:34:ASN:H | 4 | 1.24 |
| (1,246) | 1:A:33:LYS:HD3 | 1:A:34:ASN:H | 4 | 1.24 |
| (1,207) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:37:LYS:HB2 | 4 | 1.24 |
| (1,207) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:37:LYS:HB3 | 4 | 1.24 |
| (1,172) | 1:A:4:GLY:H | 1:A:6:PHE:H | 14 | 1.24 |
| (1,168) | 1:A:4:GLY:H | 1:A:5:THR:H | 11 | 1.24 |
| (2,39) | 1:A:28:ALA:HB1 | 1:A:29:GLN:HE22 | 5 | 1.23 |
| (2,39) | 1:A:28:ALA:HB2 | 1:A:29:GLN:HE22 | 5 | 1.23 |
| (2,39) | 1:A:28:ALA:HB3 | 1:A:29:GLN:HE22 | 5 | 1.23 |
| (1,332) | 1:A:38:HIS:HA | 1:A:38:HIS:HD2 | 4 | 1.23 |
| (1,311) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:11:SER:HB2 | 14 | 1.23 |
| (1,311) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:11:SER:HB2 | 14 | 1.23 |
| (1,235) | 1:A:14:MET:HG2 | 1:A:15:ASP:H | 1 | 1.23 |
| (1,235) | 1:A:14:MET:HG3 | 1:A:15:ASP:H | 1 | 1.23 |
| (1,2) | 1:A:1:TYR:HB2 | 1:A:2:ALA:H | 9 | 1.23 |
| (1,199) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:ALA:H | 10 | 1.23 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG21 | 12 | 1.22 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG22 | 12 | 1.22 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG23 | 12 | 1.22 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD21 | 2 | 1.22 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD22 | 2 | 1.22 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD23 | 2 | 1.22 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD11 | 1:A:21:ASP:H | 1 | 1.22 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD12 | 1:A:21:ASP:H | 1 | 1.22 |
| (1,438) | 1:A:17:ILE:HD13 | 1:A:21:ASP:H | 1 | 1.22 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:29:GLN:H | 9 | 1.22 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:29:GLN:H | 9 | 1.22 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:29:GLN:H | 9 | 1.22 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:ALA:H | 7 | 1.22 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:ALA:H | 7 | 1.22 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:ALA:H | 7 | 1.22 |
| (1,343) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:36:TRP:HD1 | 11 | 1.22 |
| (1,208) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:HB2 | 2 | 1.22 |
| (1,208) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:HB3 | 2 | 1.22 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HE1 | 8 | 1.21 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HE2 | 8 | 1.21 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HE3 | 8 | 1.21 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HE1 | 8 | 1.21 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HE2 | 8 | 1.21 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HE3 | 8 | 1.21 |
| (1,85) | 1:A:18:HIS:HA | 1:A:22:PHE:H | 4 | 1.21 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 7 | 1.21 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 7 | 1.21 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 7 | 1.21 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 7 | 1.21 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 7 | 1.21 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 7 | 1.21 |
| (1,318) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HG | 11 | 1.21 |
| (1,25) | 1:A:18:HIS:HB3 | 1:A:19:GLN:H | 9 | 1.21 |
| (1,222) | 1:A:20:GLN:HA | 1:A:24:ASN:H | 1 | 1.21 |
| (1,208) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:HB2 | 10 | 1.21 |
| (1,208) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:HB3 | 10 | 1.21 |
| (1,2) | 1:A:1:TYR:HB2 | 1:A:2:ALA:H | 3 | 1.21 |
| (1,2) | 1:A:1:TYR:HB2 | 1:A:2:ALA:H | 14 | 1.21 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HB2 | 8 | 1.2 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HB3 | 8 | 1.2 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HB2 | 8 | 1.2 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HB3 | 8 | 1.2 |
| (1,8) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:10:TYR:HB2 | 14 | 1.2 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD21 | 11 | 1.2 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD22 | 11 | 1.2 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD23 | 11 | 1.2 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG21 | 2 | 1.2 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG22 | 2 | 1.2 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG23 | 2 | 1.2 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG21 | 2 | 1.2 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG22 | 2 | 1.2 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG23 | 2 | 1.2 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:29:GLN:H | 5 | 1.2 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:29:GLN:H | 5 | 1.2 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:29:GLN:H | 5 | 1.2 |
| (1,323) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HB2 | 11 | 1.2 |
| (1,323) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HB3 | 11 | 1.2 |
| (1,25) | 1:A:18:HIS:HB3 | 1:A:19:GLN:H | 6 | 1.2 |
| (1,244) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HD2 | 4 | 1.2 |
| (1,244) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HD3 | 4 | 1.2 |
| (1,232) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG12 | 2 | 1.2 |
| (1,208) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:HB2 | 11 | 1.2 |
| (1,208) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:HB3 | 11 | 1.2 |
| (1,208) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:HB2 | 12 | 1.2 |
| (1,208) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:HB3 | 12 | 1.2 |
| (1,86) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:25:TRP:H | 5 | 1.19 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG21 | 1 | 1.19 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG22 | 1 | 1.19 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG23 | 1 | 1.19 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:29:GLN:H | 2 | 1.19 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:29:GLN:H | 2 | 1.19 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:29:GLN:H | 2 | 1.19 |
| (1,318) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HG | 3 | 1.19 |
| (1,26) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:H | 15 | 1.19 |
| (1,232) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG12 | 12 | 1.19 |
| (1,208) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:HB2 | 9 | 1.19 |
| (1,208) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:HB3 | 9 | 1.19 |
| (1,175) | 1:A:6:PHE:H | 1:A:7:ILE:H | 1 | 1.19 |
| (1,86) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:25:TRP:H | 14 | 1.18 |
| (1,25) | 1:A:18:HIS:HB3 | 1:A:19:GLN:H | 15 | 1.18 |
| (1,210) | 1:A:4:GLY:HA2 | 1:A:6:PHE:H | 1 | 1.18 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD11 | 9 | 1.17 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD12 | 9 | 1.17 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD13 | 9 | 1.17 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD21 | 9 | 1.17 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD22 | 9 | 1.17 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD23 | 9 | 1.17 |
| (1,272) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG12 | 1 | 1.17 |
| (1,25) | 1:A:18:HIS:HB3 | 1:A:19:GLN:H | 12 | 1.17 |
| (2,27) | 1:A:6:PHE:HE1 | 1:A:7:ILE:HG21 | 9 | 1.16 |
| (2,27) | 1:A:6:PHE:HE1 | 1:A:7:ILE:HG22 | 9 | 1.16 |
| (2,27) | 1:A:6:PHE:HE1 | 1:A:7:ILE:HG23 | 9 | 1.16 |
| (2,27) | 1:A:6:PHE:HE2 | 1:A:7:ILE:HG21 | 9 | 1.16 |
| (2,27) | 1:A:6:PHE:HE2 | 1:A:7:ILE:HG22 | 9 | 1.16 |
| (2,27) | 1:A:6:PHE:HE2 | 1:A:7:ILE:HG23 | 9 | 1.16 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:HG2 | 1 | 1.16 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:HG3 | 1 | 1.16 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:HG2 | 1 | 1.16 |
| (1,400) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:HG3 | 1 | 1.16 |
| (1,328) | 1:A:34:ASN:HD22 | 1:A:38:HIS:HB2 | 14 | 1.16 |
| (1,259) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:31:GLY:H | 13 | 1.16 |
| (1,259) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:31:GLY:H | 13 | 1.16 |
| (1,252) | 1:A:32:LYS:HD2 | 1:A:33:LYS:H | 15 | 1.16 |
| (1,252) | 1:A:32:LYS:HD3 | 1:A:33:LYS:H | 15 | 1.16 |
| (1,248) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:37:LYS:HD2 | 13 | 1.16 |
| (1,248) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:37:LYS:HD3 | 13 | 1.16 |
| (1,232) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG12 | 3 | 1.16 |
| (1,232) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG12 | 4 | 1.16 |
| (1,232) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG12 | 5 | 1.16 |
| (1,232) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG12 | 11 | 1.16 |
| (1,232) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG12 | 13 | 1.16 |
| (1,206) | 1:A:7:ILE:HB | 1:A:9:ASP:H | 2 | 1.16 |
| (1,164) | 1:A:10:TYR:HB3 | 1:A:11:SER:H | 11 | 1.16 |
| (2,9) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HB2 | 14 | 1.15 |
| (2,9) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HB3 | 14 | 1.15 |
| (2,9) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HB2 | 14 | 1.15 |
| (2,9) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HB3 | 14 | 1.15 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG21 | 1:A:9:ASP:H | 2 | 1.15 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG22 | 1:A:9:ASP:H | 2 | 1.15 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG23 | 1:A:9:ASP:H | 2 | 1.15 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG21 | 1:A:9:ASP:H | 14 | 1.15 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG22 | 1:A:9:ASP:H | 14 | 1.15 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG23 | 1:A:9:ASP:H | 14 | 1.15 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG21 | 2 | 1.15 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG22 | 2 | 1.15 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG23 | 2 | 1.15 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG21 | 7 | 1.15 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG22 | 7 | 1.15 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG23 | 7 | 1.15 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG21 | 2 | 1.15 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG22 | 2 | 1.15 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG23 | 2 | 1.15 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:41:THR:HG21 | 2 | 1.15 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:41:THR:HG22 | 2 | 1.15 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:41:THR:HG23 | 2 | 1.15 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG21 | 5 | 1.15 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG22 | 5 | 1.15 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG23 | 5 | 1.15 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:41:THR:HG21 | 5 | 1.15 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:41:THR:HG22 | 5 | 1.15 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:41:THR:HG23 | 5 | 1.15 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 10 | 1.15 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 10 | 1.15 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 10 | 1.15 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 10 | 1.15 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 10 | 1.15 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 10 | 1.15 |
| (1,323) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HB2 | 3 | 1.15 |
| (1,323) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HB3 | 3 | 1.15 |
| (1,265) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:H | 15 | 1.15 |
| (1,26) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:H | 3 | 1.15 |
| (1,258) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:H | 8 | 1.15 |
| (1,258) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:H | 8 | 1.15 |
| (1,249) | 1:A:37:LYS:HD2 | 1:A:38:HIS:H | 2 | 1.15 |
| (1,249) | 1:A:37:LYS:HD3 | 1:A:38:HIS:H | 2 | 1.15 |
| (1,235) | 1:A:14:MET:HG2 | 1:A:15:ASP:H | 5 | 1.15 |
| (1,235) | 1:A:14:MET:HG3 | 1:A:15:ASP:H | 5 | 1.15 |
| (1,2) | 1:A:1:TYR:HB2 | 1:A:2:ALA:H | 11 | 1.15 |
| (1,193) | 1:A:13:ALA:H | 1:A:14:MET:H | 2 | 1.15 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG21 | 6 | 1.14 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG22 | 6 | 1.14 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG23 | 6 | 1.14 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HB2 | 14 | 1.14 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HB3 | 14 | 1.14 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HB2 | 14 | 1.14 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HB3 | 14 | 1.14 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HB2 | 14 | 1.14 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HB3 | 14 | 1.14 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:6:PHE:HB2 | 15 | 1.14 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:6:PHE:HB3 | 15 | 1.14 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 15 | 1.14 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:6:PHE:HB3 | 15 | 1.14 |
| (1,276) | 1:A:36:TRP:HA | 1:A:36:TRP:HE3 | 3 | 1.14 |
| (1,232) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG12 | 6 | 1.14 |
| (1,232) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG12 | 7 | 1.14 |
| (1,232) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG12 | 10 | 1.14 |
| (1,232) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG12 | 15 | 1.14 |
| (1,222) | 1:A:20:GLN:HA | 1:A:24:ASN:H | 9 | 1.14 |
| (1,172) | 1:A:4:GLY:H | 1:A:6:PHE:H | 3 | 1.14 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,8) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:10:TYR:HB2 | 9 | 1.13 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD11 | 12 | 1.13 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD12 | 12 | 1.13 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD13 | 12 | 1.13 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HB2 | 5 | 1.13 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HB3 | 5 | 1.13 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HB2 | 5 | 1.13 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HB3 | 5 | 1.13 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HB2 | 5 | 1.13 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HB3 | 5 | 1.13 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 2 | 1.13 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 2 | 1.13 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 2 | 1.13 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 2 | 1.13 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 2 | 1.13 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 2 | 1.13 |
| (1,388) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:HE21 | 3 | 1.13 |
| (1,388) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:HE22 | 3 | 1.13 |
| (1,385) | 1:A:25:TRP:HE1 | 1:A:29:GLN:HE22 | 11 | 1.13 |
| (1,385) | 1:A:25:TRP:HE1 | 1:A:29:GLN:HE21 | 11 | 1.13 |
| (1,223) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:36:TRP:H | 6 | 1.13 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG21 | 1:A:10:TYR:HD1 | 2 | 1.12 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG21 | 1:A:10:TYR:HD2 | 2 | 1.12 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG22 | 1:A:10:TYR:HD1 | 2 | 1.12 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG22 | 1:A:10:TYR:HD2 | 2 | 1.12 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG23 | 1:A:10:TYR:HD1 | 2 | 1.12 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG23 | 1:A:10:TYR:HD2 | 2 | 1.12 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG21 | 4 | 1.12 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG22 | 4 | 1.12 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG23 | 4 | 1.12 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD21 | 3 | 1.12 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD22 | 3 | 1.12 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD23 | 3 | 1.12 |
| (1,343) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:36:TRP:HD1 | 1 | 1.12 |
| (1,26) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:H | 6 | 1.12 |
| (1,259) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:31:GLY:H | 12 | 1.12 |
| (1,259) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:31:GLY:H | 12 | 1.12 |
| (1,244) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HD2 | 13 | 1.12 |
| (1,244) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HD3 | 13 | 1.12 |
| (1,208) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:HB2 | 14 | 1.12 |
| (1,208) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:HB3 | 14 | 1.12 |
| (1,139) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:42:GLN:HB3 | 5 | 1.12 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:6:PHE:HB2 | 8 | 1.11 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:6:PHE:HB3 | 8 | 1.11 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 8 | 1.11 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:6:PHE:HB3 | 8 | 1.11 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD11 | 8 | 1.11 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD12 | 8 | 1.11 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD13 | 8 | 1.11 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD21 | 4 | 1.11 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD22 | 4 | 1.11 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD23 | 4 | 1.11 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:29:GLN:H | 7 | 1.11 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:29:GLN:H | 7 | 1.11 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:29:GLN:H | 7 | 1.11 |
| (1,420) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HE1 | 8 | 1.11 |
| (1,420) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HE2 | 8 | 1.11 |
| (1,420) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HE3 | 8 | 1.11 |
| (1,303) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:11:SER:HA | 5 | 1.11 |
| (1,303) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:11:SER:HA | 5 | 1.11 |
| (1,265) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:H | 3 | 1.11 |
| (1,260) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:34:ASN:H | 9 | 1.11 |
| (1,260) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:34:ASN:H | 9 | 1.11 |
| (1,26) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:H | 4 | 1.11 |
| (1,222) | 1:A:20:GLN:HA | 1:A:24:ASN:H | 11 | 1.11 |
| (1,172) | 1:A:4:GLY:H | 1:A:6:PHE:H | 12 | 1.11 |
| (1,82) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:35:ASP:H | 1 | 1.1 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:29:GLN:H | 10 | 1.1 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:29:GLN:H | 10 | 1.1 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:29:GLN:H | 10 | 1.1 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:ALA:H | 5 | 1.1 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:ALA:H | 5 | 1.1 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:ALA:H | 5 | 1.1 |
| (1,291) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:25:TRP:HE3 | 15 | 1.1 |
| (1,248) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:37:LYS:HD2 | 3 | 1.1 |
| (1,248) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:37:LYS:HD3 | 3 | 1.1 |
| (1,248) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:37:LYS:HD2 | 14 | 1.1 |
| (1,248) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:37:LYS:HD3 | 14 | 1.1 |
| (1,247) | 1:A:30:LYS:HG2 | 1:A:31:GLY:H | 11 | 1.1 |
| (1,247) | 1:A:30:LYS:HG3 | 1:A:31:GLY:H | 11 | 1.1 |
| (1,208) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:HB2 | 6 | 1.1 |
| (1,208) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:HB3 | 6 | 1.1 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD11 | 2 | 1.09 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD12 | 2 | 1.09 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD13 | 2 | 1.09 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD21 | 10 | 1.09 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD22 | 10 | 1.09 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD23 | 10 | 1.09 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HB2 | 15 | 1.09 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HB3 | 15 | 1.09 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HB2 | 15 | 1.09 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HB3 | 15 | 1.09 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HB2 | 15 | 1.09 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HB3 | 15 | 1.09 |
| (1,343) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:36:TRP:HD1 | 8 | 1.09 |
| (1,298) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HD1 | 8 | 1.09 |
| (1,298) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HD2 | 8 | 1.09 |
| (1,26) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:H | 9 | 1.09 |
| (1,26) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:H | 11 | 1.09 |
| (1,252) | 1:A:32:LYS:HD2 | 1:A:33:LYS:H | 6 | 1.09 |
| (1,252) | 1:A:32:LYS:HD3 | 1:A:33:LYS:H | 6 | 1.09 |
| (1,244) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HD2 | 12 | 1.09 |
| (1,244) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HD3 | 12 | 1.09 |
| (1,232) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG12 | 14 | 1.09 |
| (1,2) | 1:A:1:TYR:HB2 | 1:A:2:ALA:H | 8 | 1.09 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE1 | 2 | 1.08 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE2 | 2 | 1.08 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE3 | 2 | 1.08 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE1 | 2 | 1.08 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE2 | 2 | 1.08 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE3 | 2 | 1.08 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HB2 | 2 | 1.08 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HB3 | 2 | 1.08 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HB2 | 2 | 1.08 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HB3 | 2 | 1.08 |
| (1,85) | 1:A:18:HIS:HA | 1:A:22:PHE:H | 7 | 1.08 |
| (1,8) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:10:TYR:HB2 | 3 | 1.08 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG21 | 8 | 1.08 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG22 | 8 | 1.08 |
| (1,478) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG23 | 8 | 1.08 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD21 | 1 | 1.08 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD22 | 1 | 1.08 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD23 | 1 | 1.08 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HD21 | 8 | 1.08 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HD22 | 8 | 1.08 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HD23 | 8 | 1.08 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HD21 | 8 | 1.08 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HD22 | 8 | 1.08 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HD23 | 8 | 1.08 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HD21 | 8 | 1.08 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HD22 | 8 | 1.08 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HD23 | 8 | 1.08 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HD11 | 8 | 1.08 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HD12 | 8 | 1.08 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HD13 | 8 | 1.08 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HD11 | 8 | 1.08 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HD12 | 8 | 1.08 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HD13 | 8 | 1.08 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HD11 | 8 | 1.08 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HD12 | 8 | 1.08 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HD13 | 8 | 1.08 |
| (1,310) | 1:A:8:SER:HB3 | 1:A:10:TYR:HD1 | 6 | 1.08 |
| (1,310) | 1:A:8:SER:HB3 | 1:A:10:TYR:HD2 | 6 | 1.08 |
| (1,303) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:11:SER:HA | 9 | 1.08 |
| (1,303) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:11:SER:HA | 9 | 1.08 |
| (1,252) | 1:A:32:LYS:HD2 | 1:A:33:LYS:H | 8 | 1.08 |
| (1,252) | 1:A:32:LYS:HD3 | 1:A:33:LYS:H | 8 | 1.08 |
| (1,248) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:37:LYS:HD2 | 5 | 1.08 |
| (1,248) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:37:LYS:HD3 | 5 | 1.08 |
| (1,208) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:HB2 | 7 | 1.08 |
| (1,208) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:HB3 | 7 | 1.08 |
| (1,172) | 1:A:4:GLY:H | 1:A:6:PHE:H | 11 | 1.08 |
| (1,139) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:42:GLN:HB3 | 11 | 1.08 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE1 | 11 | 1.07 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE2 | 11 | 1.07 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE3 | 11 | 1.07 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE1 | 11 | 1.07 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE2 | 11 | 1.07 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE3 | 11 | 1.07 |
| (1,420) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HE1 | 10 | 1.07 |
| (1,420) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HE2 | 10 | 1.07 |
| (1,420) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HE3 | 10 | 1.07 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:20:GLN:HB2 | 1 | 1.07 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:20:GLN:HB3 | 1 | 1.07 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HB2 | 1 | 1.07 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HB3 | 1 | 1.07 |
| (1,303) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:11:SER:HA | 4 | 1.07 |
| (1,303) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:11:SER:HA | 4 | 1.07 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,303) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:11:SER:HA | 13 | 1.07 |
| (1,303) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:11:SER:HA | 13 | 1.07 |
| (1,303) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:11:SER:HA | 14 | 1.07 |
| (1,303) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:11:SER:HA | 14 | 1.07 |
| (1,298) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HD1 | 7 | 1.07 |
| (1,298) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HD2 | 7 | 1.07 |
| (1,26) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:H | 5 | 1.07 |
| (1,258) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:H | 14 | 1.07 |
| (1,258) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:H | 14 | 1.07 |
| (1,246) | 1:A:33:LYS:HD2 | 1:A:34:ASN:H | 1 | 1.07 |
| (1,246) | 1:A:33:LYS:HD3 | 1:A:34:ASN:H | 1 | 1.07 |
| (1,222) | 1:A:20:GLN:HA | 1:A:24:ASN:H | 10 | 1.07 |
| (1,188) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:31:GLY:H | 15 | 1.07 |
| (1,172) | 1:A:4:GLY:H | 1:A:6:PHE:H | 6 | 1.07 |
| (1,172) | 1:A:4:GLY:H | 1:A:6:PHE:H | 7 | 1.07 |
| (1,164) | 1:A:10:TYR:HB3 | 1:A:11:SER:H | 15 | 1.07 |
| (1,135) | 1:A:5:THR:HB | 1:A:8:SER:H | 9 | 1.07 |
| (2,39) | 1:A:28:ALA:HB1 | 1:A:29:GLN:HE22 | 10 | 1.06 |
| (2,39) | 1:A:28:ALA:HB2 | 1:A:29:GLN:HE22 | 10 | 1.06 |
| (2,39) | 1:A:28:ALA:HB3 | 1:A:29:GLN:HE22 | 10 | 1.06 |
| (1,82) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:35:ASP:H | 5 | 1.06 |
| (1,82) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:35:ASP:H | 14 | 1.06 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD11 | 3 | 1.06 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD12 | 3 | 1.06 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD13 | 3 | 1.06 |
| (1,479) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HD11 | 10 | 1.06 |
| (1,479) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HD12 | 10 | 1.06 |
| (1,479) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HD13 | 10 | 1.06 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD21 | 13 | 1.06 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD22 | 13 | 1.06 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD23 | 13 | 1.06 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HB2 | 7 | 1.06 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HB3 | 7 | 1.06 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HB2 | 7 | 1.06 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HB3 | 7 | 1.06 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HB2 | 7 | 1.06 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HB3 | 7 | 1.06 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:ALA:H | 10 | 1.06 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:ALA:H | 10 | 1.06 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:ALA:H | 10 | 1.06 |
| (1,388) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:HE21 | 11 | 1.06 |
| (1,388) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:HE22 | 11 | 1.06 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,343) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:36:TRP:HD1 | 12 | 1.06 |
| (1,310) | 1:A:8:SER:HB3 | 1:A:10:TYR:HD1 | 10 | 1.06 |
| (1,310) | 1:A:8:SER:HB3 | 1:A:10:TYR:HD2 | 10 | 1.06 |
| (1,303) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:11:SER:HA | 12 | 1.06 |
| (1,303) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:11:SER:HA | 12 | 1.06 |
| (1,222) | 1:A:20:GLN:HA | 1:A:24:ASN:H | 2 | 1.06 |
| (1,222) | 1:A:20:GLN:HA | 1:A:24:ASN:H | 3 | 1.06 |
| (1,436) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:40:ILE:HD11 | 1 | 1.05 |
| (1,436) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:40:ILE:HD12 | 1 | 1.05 |
| (1,436) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:40:ILE:HD13 | 1 | 1.05 |
| (1,436) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:40:ILE:HD11 | 3 | 1.05 |
| (1,436) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:40:ILE:HD12 | 3 | 1.05 |
| (1,436) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:40:ILE:HD13 | 3 | 1.05 |
| (1,303) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:11:SER:HA | 6 | 1.05 |
| (1,303) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:11:SER:HA | 6 | 1.05 |
| (1,276) | 1:A:36:TRP:HA | 1:A:36:TRP:HE3 | 15 | 1.05 |
| (1,26) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:H | 10 | 1.05 |
| (1,25) | 1:A:18:HIS:HB3 | 1:A:19:GLN:H | 11 | 1.05 |
| (1,172) | 1:A:4:GLY:H | 1:A:6:PHE:H | 15 | 1.05 |
| (1,137) | 1:A:38:HIS:HA | 1:A:40:ILE:H | 15 | 1.05 |
| (2,40) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:12:ILE:HD11 | 3 | 1.04 |
| (2,40) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:12:ILE:HD12 | 3 | 1.04 |
| (2,40) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:12:ILE:HD13 | 3 | 1.04 |
| (2,40) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 3 | 1.04 |
| (2,40) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 3 | 1.04 |
| (2,40) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 3 | 1.04 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HG2 | 15 | 1.04 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HG3 | 15 | 1.04 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HG2 | 15 | 1.04 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HG3 | 15 | 1.04 |
| (1,85) | 1:A:18:HIS:HA | 1:A:22:PHE:H | 3 | 1.04 |
| (1,85) | 1:A:18:HIS:HA | 1:A:22:PHE:H | 14 | 1.04 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD11 | 5 | 1.04 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD12 | 5 | 1.04 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD13 | 5 | 1.04 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:ALA:H | 9 | 1.04 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:ALA:H | 9 | 1.04 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:ALA:H | 9 | 1.04 |
| (1,385) | 1:A:25:TRP:HE1 | 1:A:29:GLN:HE22 | 15 | 1.04 |
| (1,385) | 1:A:25:TRP:HE1 | 1:A:29:GLN:HE21 | 15 | 1.04 |
| (1,303) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:11:SER:HA | 7 | 1.04 |
| (1,303) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:11:SER:HA | 7 | 1.04 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,303) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:11:SER:HA | 8 | 1.04 |
| (1,303) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:11:SER:HA | 8 | 1.04 |
| (1,261) | 1:A:32:LYS:HG2 | 1:A:36:TRP:H | 11 | 1.04 |
| (1,261) | 1:A:32:LYS:HG3 | 1:A:36:TRP:H | 11 | 1.04 |
| (1,2) | 1:A:1:TYR:HB2 | 1:A:2:ALA:H | 7 | 1.04 |
| (1,85) | 1:A:18:HIS:HA | 1:A:22:PHE:H | 5 | 1.03 |
| (1,8) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:10:TYR:HB2 | 2 | 1.03 |
| (1,420) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HE1 | 14 | 1.03 |
| (1,420) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HE2 | 14 | 1.03 |
| (1,420) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HE3 | 14 | 1.03 |
| (1,397) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG12 | 6 | 1.03 |
| (1,397) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG13 | 6 | 1.03 |
| (1,397) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG12 | 6 | 1.03 |
| (1,397) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG13 | 6 | 1.03 |
| (1,303) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:11:SER:HA | 10 | 1.03 |
| (1,303) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:11:SER:HA | 10 | 1.03 |
| (1,243) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HG2 | 12 | 1.03 |
| (1,243) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HG3 | 12 | 1.03 |
| (1,222) | 1:A:20:GLN:HA | 1:A:24:ASN:H | 8 | 1.03 |
| (1,215) | 1:A:36:TRP:H | 1:A:38:HIS:H | 3 | 1.03 |
| (1,168) | 1:A:4:GLY:H | 1:A:5:THR:H | 7 | 1.03 |
| (1,137) | 1:A:38:HIS:HA | 1:A:40:ILE:H | 10 | 1.03 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD11 | 15 | 1.02 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD12 | 15 | 1.02 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD13 | 15 | 1.02 |
| (1,310) | 1:A:8:SER:HB3 | 1:A:10:TYR:HD1 | 4 | 1.02 |
| (1,310) | 1:A:8:SER:HB3 | 1:A:10:TYR:HD2 | 4 | 1.02 |
| (1,310) | 1:A:8:SER:HB3 | 1:A:10:TYR:HD1 | 15 | 1.02 |
| (1,310) | 1:A:8:SER:HB3 | 1:A:10:TYR:HD2 | 15 | 1.02 |
| (1,303) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:11:SER:HA | 3 | 1.02 |
| (1,303) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:11:SER:HA | 3 | 1.02 |
| (1,287) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HA | 13 | 1.02 |
| (1,26) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:H | 13 | 1.02 |
| (1,212) | 1:A:6:PHE:HA | 1:A:10:TYR:H | 8 | 1.02 |
| (1,206) | 1:A:7:ILE:HB | 1:A:9:ASP:H | 14 | 1.02 |
| (1,164) | 1:A:10:TYR:HB3 | 1:A:11:SER:H | 14 | 1.02 |
| (1,332) | 1:A:38:HIS:HA | 1:A:38:HIS:HD2 | 12 | 1.01 |
| (1,303) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:11:SER:HA | 2 | 1.01 |
| (1,303) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:11:SER:HA | 2 | 1.01 |
| (1,303) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:11:SER:HA | 11 | 1.01 |
| (1,303) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:11:SER:HA | 11 | 1.01 |
| (1,303) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:11:SER:HA | 15 | 1.01 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,303) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:11:SER:HA | 15 | 1.01 |
| (1,276) | 1:A:36:TRP:HA | 1:A:36:TRP:HE3 | 10 | 1.01 |
| (1,26) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:H | 2 | 1.01 |
| (1,86) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:25:TRP:H | 8 | 1.0 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:ALA:H | 15 | 1.0 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:ALA:H | 15 | 1.0 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:ALA:H | 15 | 1.0 |
| (1,276) | 1:A:36:TRP:HA | 1:A:36:TRP:HE3 | 12 | 1.0 |
| (1,265) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:H | 12 | 1.0 |
| (1,26) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:H | 12 | 1.0 |
| (1,26) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:H | 14 | 1.0 |
| (1,252) | 1:A:32:LYS:HD2 | 1:A:33:LYS:H | 13 | 1.0 |
| (1,252) | 1:A:32:LYS:HD3 | 1:A:33:LYS:H | 13 | 1.0 |
| (1,245) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD2 | 7 | 1.0 |
| (1,245) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD3 | 7 | 1.0 |
| (1,245) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD2 | 15 | 1.0 |
| (1,245) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD3 | 15 | 1.0 |
| (1,198) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:H | 14 | 1.0 |
| (1,164) | 1:A:10:TYR:HB3 | 1:A:11:SER:H | 10 | 1.0 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE1 | 4 | 0.99 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE2 | 4 | 0.99 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE3 | 4 | 0.99 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE1 | 4 | 0.99 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE2 | 4 | 0.99 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE3 | 4 | 0.99 |
| (1,85) | 1:A:18:HIS:HA | 1:A:22:PHE:H | 2 | 0.99 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 8 | 0.99 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 8 | 0.99 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 8 | 0.99 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD11 | 8 | 0.99 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD12 | 8 | 0.99 |
| (1,442) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HD13 | 8 | 0.99 |
| (1,421) | 1:A:14:MET:HE1 | 1:A:15:ASP:H | 15 | 0.99 |
| (1,421) | 1:A:14:MET:HE2 | 1:A:15:ASP:H | 15 | 0.99 |
| (1,421) | 1:A:14:MET:HE3 | 1:A:15:ASP:H | 15 | 0.99 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:ALA:H | 1 | 0.99 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:ALA:H | 1 | 0.99 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:ALA:H | 1 | 0.99 |
| (1,416) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HD11 | 14 | 0.99 |
| (1,416) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HD12 | 14 | 0.99 |
| (1,416) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HD13 | 14 | 0.99 |
| (1,276) | 1:A:36:TRP:HA | 1:A:36:TRP:HE3 | 7 | 0.99 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,276) | 1:A:36:TRP:HA | 1:A:36:TRP:HE3 | 11 | 0.99 |
| (1,274) | 1:A:24:ASN:HB3 | 1:A:24:ASN:HD22 | 7 | 0.99 |
| (1,274) | 1:A:24:ASN:HB2 | 1:A:24:ASN:HD22 | 7 | 0.99 |
| (1,26) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:H | 1 | 0.99 |
| (1,26) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:H | 7 | 0.99 |
| (1,245) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD2 | 14 | 0.99 |
| (1,245) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD3 | 14 | 0.99 |
| (1,207) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:37:LYS:HB2 | 13 | 0.99 |
| (1,207) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:37:LYS:HB3 | 13 | 0.99 |
| (1,137) | 1:A:38:HIS:HA | 1:A:40:ILE:H | 6 | 0.99 |
| (2,39) | 1:A:28:ALA:HB1 | 1:A:29:GLN:HE22 | 2 | 0.98 |
| (2,39) | 1:A:28:ALA:HB2 | 1:A:29:GLN:HE22 | 2 | 0.98 |
| (2,39) | 1:A:28:ALA:HB3 | 1:A:29:GLN:HE22 | 2 | 0.98 |
| (1,85) | 1:A:18:HIS:HA | 1:A:22:PHE:H | 9 | 0.98 |
| (1,420) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HE1 | 11 | 0.98 |
| (1,420) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HE2 | 11 | 0.98 |
| (1,420) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HE3 | 11 | 0.98 |
| (1,397) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG12 | 14 | 0.98 |
| (1,397) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG13 | 14 | 0.98 |
| (1,397) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG12 | 14 | 0.98 |
| (1,397) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG13 | 14 | 0.98 |
| (1,333) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HE1 | 9 | 0.98 |
| (1,333) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HE2 | 9 | 0.98 |
| (1,298) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HD1 | 15 | 0.98 |
| (1,298) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HD2 | 15 | 0.98 |
| (1,274) | 1:A:24:ASN:HB3 | 1:A:24:ASN:HD22 | 1 | 0.98 |
| (1,274) | 1:A:24:ASN:HB2 | 1:A:24:ASN:HD22 | 1 | 0.98 |
| (1,274) | 1:A:24:ASN:HB3 | 1:A:24:ASN:HD22 | 2 | 0.98 |
| (1,274) | 1:A:24:ASN:HB2 | 1:A:24:ASN:HD22 | 2 | 0.98 |
| (1,274) | 1:A:24:ASN:HB3 | 1:A:24:ASN:HD22 | 3 | 0.98 |
| (1,274) | 1:A:24:ASN:HB2 | 1:A:24:ASN:HD22 | 3 | 0.98 |
| (1,274) | 1:A:24:ASN:HB3 | 1:A:24:ASN:HD22 | 5 | 0.98 |
| (1,274) | 1:A:24:ASN:HB2 | 1:A:24:ASN:HD22 | 5 | 0.98 |
| (1,274) | 1:A:24:ASN:HB3 | 1:A:24:ASN:HD22 | 15 | 0.98 |
| (1,274) | 1:A:24:ASN:HB2 | 1:A:24:ASN:HD22 | 15 | 0.98 |
| (1,252) | 1:A:32:LYS:HD2 | 1:A:33:LYS:H | 12 | 0.98 |
| (1,252) | 1:A:32:LYS:HD3 | 1:A:33:LYS:H | 12 | 0.98 |
| (1,248) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:37:LYS:HD2 | 4 | 0.98 |
| (1,248) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:37:LYS:HD3 | 4 | 0.98 |
| (1,245) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD2 | 5 | 0.98 |
| (1,245) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD3 | 5 | 0.98 |
| (1,208) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:HB2 | 8 | 0.98 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,208) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:HB3 | 8 | 0.98 |
| (1,137) | 1:A:38:HIS:HA | 1:A:40:ILE:H | 3 | 0.98 |
| (1,86) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:25:TRP:H | 2 | 0.97 |
| (1,85) | 1:A:18:HIS:HA | 1:A:22:PHE:H | 8 | 0.97 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG21 | 8 | 0.97 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG22 | 8 | 0.97 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG23 | 8 | 0.97 |
| (1,416) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HD11 | 6 | 0.97 |
| (1,416) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HD12 | 6 | 0.97 |
| (1,416) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HD13 | 6 | 0.97 |
| (1,332) | 1:A:38:HIS:HA | 1:A:38:HIS:HD2 | 11 | 0.97 |
| (1,310) | 1:A:8:SER:HB3 | 1:A:10:TYR:HD1 | 7 | 0.97 |
| (1,310) | 1:A:8:SER:HB3 | 1:A:10:TYR:HD2 | 7 | 0.97 |
| (1,276) | 1:A:36:TRP:HA | 1:A:36:TRP:HE3 | 1 | 0.97 |
| (1,274) | 1:A:24:ASN:HB3 | 1:A:24:ASN:HD22 | 9 | 0.97 |
| (1,274) | 1:A:24:ASN:HB2 | 1:A:24:ASN:HD22 | 9 | 0.97 |
| (1,274) | 1:A:24:ASN:HB3 | 1:A:24:ASN:HD22 | 10 | 0.97 |
| (1,274) | 1:A:24:ASN:HB2 | 1:A:24:ASN:HD22 | 10 | 0.97 |
| (1,274) | 1:A:24:ASN:HB3 | 1:A:24:ASN:HD22 | 11 | 0.97 |
| (1,274) | 1:A:24:ASN:HB2 | 1:A:24:ASN:HD22 | 11 | 0.97 |
| (1,208) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:HB2 | 1 | 0.97 |
| (1,208) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:HB3 | 1 | 0.97 |
| (1,176) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:36:TRP:H | 1 | 0.97 |
| (1,164) | 1:A:10:TYR:HB3 | 1:A:11:SER:H | 4 | 0.97 |
| (1,164) | 1:A:10:TYR:HB3 | 1:A:11:SER:H | 6 | 0.97 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG21 | 5 | 0.96 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG22 | 5 | 0.96 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG23 | 5 | 0.96 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD11 | 4 | 0.96 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD12 | 4 | 0.96 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD13 | 4 | 0.96 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG21 | 1:A:9:ASP:H | 13 | 0.96 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG22 | 1:A:9:ASP:H | 13 | 0.96 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG23 | 1:A:9:ASP:H | 13 | 0.96 |
| (1,326) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:HD1 | 11 | 0.96 |
| (1,326) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:HD2 | 11 | 0.96 |
| (1,303) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:11:SER:HA | 1 | 0.96 |
| (1,303) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:11:SER:HA | 1 | 0.96 |
| (1,274) | 1:A:24:ASN:HB3 | 1:A:24:ASN:HD22 | 14 | 0.96 |
| (1,274) | 1:A:24:ASN:HB2 | 1:A:24:ASN:HD22 | 14 | 0.96 |
| (1,189) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:33:LYS:H | 11 | 0.96 |
| (1,137) | 1:A:38:HIS:HA | 1:A:40:ILE:H | 13 | 0.96 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (2,8) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:4:GLY:HA2 | 7 | 0.95 |
| (2,8) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:4:GLY:HA2 | 7 | 0.95 |
| (2,39) | 1:A:28:ALA:HB1 | 1:A:29:GLN:HE22 | 14 | 0.95 |
| (2,39) | 1:A:28:ALA:HB2 | 1:A:29:GLN:HE22 | 14 | 0.95 |
| (2,39) | 1:A:28:ALA:HB3 | 1:A:29:GLN:HE22 | 14 | 0.95 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:13:ALA:HB1 | 6 | 0.95 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:13:ALA:HB2 | 6 | 0.95 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:13:ALA:HB3 | 6 | 0.95 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:13:ALA:HB1 | 6 | 0.95 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:13:ALA:HB2 | 6 | 0.95 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:13:ALA:HB3 | 6 | 0.95 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HB2 | 13 | 0.95 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HB3 | 13 | 0.95 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HB2 | 13 | 0.95 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HB3 | 13 | 0.95 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HB2 | 13 | 0.95 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HB3 | 13 | 0.95 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG21 | 9 | 0.95 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG22 | 9 | 0.95 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG23 | 9 | 0.95 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG21 | 9 | 0.95 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG22 | 9 | 0.95 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG23 | 9 | 0.95 |
| (1,336) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:24:ASN:HD22 | 12 | 0.95 |
| (1,298) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HD1 | 6 | 0.95 |
| (1,298) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HD2 | 6 | 0.95 |
| (1,276) | 1:A:36:TRP:HA | 1:A:36:TRP:HE3 | 8 | 0.95 |
| (1,249) | 1:A:37:LYS:HD2 | 1:A:38:HIS:H | 15 | 0.95 |
| (1,249) | 1:A:37:LYS:HD3 | 1:A:38:HIS:H | 15 | 0.95 |
| (1,245) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD2 | 3 | 0.95 |
| (1,245) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD3 | 3 | 0.95 |
| (1,165) | 1:A:9:ASP:HB2 | 1:A:11:SER:H | 2 | 0.95 |
| (1,165) | 1:A:9:ASP:HB3 | 1:A:11:SER:H | 2 | 0.95 |
| (2,39) | 1:A:28:ALA:HB1 | 1:A:29:GLN:HE22 | 1 | 0.94 |
| (2,39) | 1:A:28:ALA:HB2 | 1:A:29:GLN:HE22 | 1 | 0.94 |
| (2,39) | 1:A:28:ALA:HB3 | 1:A:29:GLN:HE22 | 1 | 0.94 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HB2 | 11 | 0.94 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HB3 | 11 | 0.94 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HB2 | 11 | 0.94 |
| (2,10) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HB3 | 11 | 0.94 |
| (1,86) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:25:TRP:H | 10 | 0.94 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG21 | 5 | 0.94 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG22 | 5 | 0.94 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG23 | 5 | 0.94 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG21 | 5 | 0.94 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG22 | 5 | 0.94 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG23 | 5 | 0.94 |
| (1,416) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HD11 | 11 | 0.94 |
| (1,416) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HD12 | 11 | 0.94 |
| (1,416) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HD13 | 11 | 0.94 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:20:GLN:HB2 | 10 | 0.94 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:20:GLN:HB3 | 10 | 0.94 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HB2 | 10 | 0.94 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HB3 | 10 | 0.94 |
| (1,343) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:36:TRP:HD1 | 6 | 0.94 |
| (1,290) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:25:TRP:HD1 | 8 | 0.94 |
| (2,39) | 1:A:28:ALA:HB1 | 1:A:29:GLN:HE22 | 7 | 0.93 |
| (2,39) | 1:A:28:ALA:HB2 | 1:A:29:GLN:HE22 | 7 | 0.93 |
| (2,39) | 1:A:28:ALA:HB3 | 1:A:29:GLN:HE22 | 7 | 0.93 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG21 | 1:A:10:TYR:HD1 | 14 | 0.93 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG21 | 1:A:10:TYR:HD2 | 14 | 0.93 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG22 | 1:A:10:TYR:HD1 | 14 | 0.93 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG22 | 1:A:10:TYR:HD2 | 14 | 0.93 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG23 | 1:A:10:TYR:HD1 | 14 | 0.93 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG23 | 1:A:10:TYR:HD2 | 14 | 0.93 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD11 | 10 | 0.93 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD12 | 10 | 0.93 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD13 | 10 | 0.93 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HB2 | 11 | 0.93 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HB3 | 11 | 0.93 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HB2 | 11 | 0.93 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HB3 | 11 | 0.93 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HB2 | 11 | 0.93 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HB3 | 11 | 0.93 |
| (1,449) | 1:A:28:ALA:HB1 | 1:A:29:GLN:HE21 | 12 | 0.93 |
| (1,449) | 1:A:28:ALA:HB2 | 1:A:29:GLN:HE21 | 12 | 0.93 |
| (1,449) | 1:A:28:ALA:HB3 | 1:A:29:GLN:HE21 | 12 | 0.93 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD11 | 12 | 0.93 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD12 | 12 | 0.93 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD13 | 12 | 0.93 |
| (1,326) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:HD1 | 15 | 0.93 |
| (1,326) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:HD2 | 15 | 0.93 |
| (1,310) | 1:A:8:SER:HB3 | 1:A:10:TYR:HD1 | 12 | 0.93 |
| (1,310) | 1:A:8:SER:HB3 | 1:A:10:TYR:HD2 | 12 | 0.93 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,258) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:H | 1 | 0.93 |
| (1,258) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:H | 1 | 0.93 |
| (1,248) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:37:LYS:HD2 | 6 | 0.93 |
| (1,248) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:37:LYS:HD3 | 6 | 0.93 |
| (1,235) | 1:A:14:MET:HG2 | 1:A:15:ASP:H | 3 | 0.93 |
| (1,235) | 1:A:14:MET:HG3 | 1:A:15:ASP:H | 3 | 0.93 |
| (1,86) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:25:TRP:H | 9 | 0.92 |
| (1,85) | 1:A:18:HIS:HA | 1:A:22:PHE:H | 11 | 0.92 |
| (1,420) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HE1 | 4 | 0.92 |
| (1,420) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HE2 | 4 | 0.92 |
| (1,420) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HE3 | 4 | 0.92 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG21 | 1:A:6:PHE:H | 1 | 0.92 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG22 | 1:A:6:PHE:H | 1 | 0.92 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG23 | 1:A:6:PHE:H | 1 | 0.92 |
| (1,334) | 1:A:14:MET:HA | 1:A:18:HIS:HD2 | 8 | 0.92 |
| (1,290) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:25:TRP:HD1 | 6 | 0.92 |
| (1,274) | 1:A:24:ASN:HB3 | 1:A:24:ASN:HD22 | 12 | 0.92 |
| (1,274) | 1:A:24:ASN:HB2 | 1:A:24:ASN:HD22 | 12 | 0.92 |
| (1,252) | 1:A:32:LYS:HD2 | 1:A:33:LYS:H | 9 | 0.92 |
| (1,252) | 1:A:32:LYS:HD3 | 1:A:33:LYS:H | 9 | 0.92 |
| (1,193) | 1:A:13:ALA:H | 1:A:14:MET:H | 11 | 0.92 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HE1 | 10 | 0.91 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HE2 | 10 | 0.91 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HE3 | 10 | 0.91 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HE1 | 10 | 0.91 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HE2 | 10 | 0.91 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HE3 | 10 | 0.91 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD11 | 1 | 0.91 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD12 | 1 | 0.91 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD13 | 1 | 0.91 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG21 | 1:A:9:ASP:H | 7 | 0.91 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG22 | 1:A:9:ASP:H | 7 | 0.91 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG23 | 1:A:9:ASP:H | 7 | 0.91 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG21 | 1:A:9:ASP:H | 10 | 0.91 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG22 | 1:A:9:ASP:H | 10 | 0.91 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG23 | 1:A:9:ASP:H | 10 | 0.91 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD21 | 15 | 0.91 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD22 | 15 | 0.91 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD23 | 15 | 0.91 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG21 | 4 | 0.91 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG22 | 4 | 0.91 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG23 | 4 | 0.91 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG21 | 4 | 0.91 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG22 | 4 | 0.91 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG23 | 4 | 0.91 |
| (1,421) | 1:A:14:MET:HE1 | 1:A:15:ASP:H | 3 | 0.91 |
| (1,421) | 1:A:14:MET:HE2 | 1:A:15:ASP:H | 3 | 0.91 |
| (1,421) | 1:A:14:MET:HE3 | 1:A:15:ASP:H | 3 | 0.91 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:ALA:H | 2 | 0.91 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:ALA:H | 2 | 0.91 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:ALA:H | 2 | 0.91 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:ALA:H | 6 | 0.91 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:ALA:H | 6 | 0.91 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:ALA:H | 6 | 0.91 |
| (1,343) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:36:TRP:HD1 | 10 | 0.91 |
| (1,341) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:H | 10 | 0.91 |
| (1,332) | 1:A:38:HIS:HA | 1:A:38:HIS:HD2 | 7 | 0.91 |
| (1,318) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HG | 6 | 0.91 |
| (1,298) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HD1 | 10 | 0.91 |
| (1,298) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HD2 | 10 | 0.91 |
| (1,276) | 1:A:36:TRP:HA | 1:A:36:TRP:HE3 | 6 | 0.91 |
| (1,222) | 1:A:20:GLN:HA | 1:A:24:ASN:H | 14 | 0.91 |
| (1,164) | 1:A:10:TYR:HB3 | 1:A:11:SER:H | 12 | 0.91 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD11 | 13 | 0.9 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD12 | 13 | 0.9 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD13 | 13 | 0.9 |
| (1,341) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:H | 12 | 0.9 |
| (1,310) | 1:A:8:SER:HB3 | 1:A:10:TYR:HD1 | 11 | 0.9 |
| (1,310) | 1:A:8:SER:HB3 | 1:A:10:TYR:HD2 | 11 | 0.9 |
| (1,246) | 1:A:33:LYS:HD2 | 1:A:34:ASN:H | 15 | 0.9 |
| (1,246) | 1:A:33:LYS:HD3 | 1:A:34:ASN:H | 15 | 0.9 |
| (1,193) | 1:A:13:ALA:H | 1:A:14:MET:H | 7 | 0.9 |
| (1,165) | 1:A:9:ASP:HB2 | 1:A:11:SER:H | 9 | 0.9 |
| (1,165) | 1:A:9:ASP:HB3 | 1:A:11:SER:H | 9 | 0.9 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG21 | 4 | 0.89 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG22 | 4 | 0.89 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG23 | 4 | 0.89 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG21 | 4 | 0.89 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG22 | 4 | 0.89 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG23 | 4 | 0.89 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 4 | 0.89 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 4 | 0.89 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 4 | 0.89 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 4 | 0.89 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 4 | 0.89 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 4 | 0.89 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:ALA:H | 14 | 0.89 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:ALA:H | 14 | 0.89 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:ALA:H | 14 | 0.89 |
| (1,341) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:H | 15 | 0.89 |
| (1,335) | 1:A:17:ILE:HA | 1:A:18:HIS:HD2 | 8 | 0.89 |
| (1,326) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:HD1 | 6 | 0.89 |
| (1,326) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:HD2 | 6 | 0.89 |
| (1,244) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HD2 | 11 | 0.89 |
| (1,244) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HD3 | 11 | 0.89 |
| (1,164) | 1:A:10:TYR:HB3 | 1:A:11:SER:H | 7 | 0.89 |
| (1,137) | 1:A:38:HIS:HA | 1:A:40:ILE:H | 5 | 0.89 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD11 | 7 | 0.88 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD12 | 7 | 0.88 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD13 | 7 | 0.88 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD11 | 11 | 0.88 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD12 | 11 | 0.88 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD13 | 11 | 0.88 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HB2 | 1 | 0.88 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HB3 | 1 | 0.88 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HB2 | 1 | 0.88 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HB3 | 1 | 0.88 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HB2 | 1 | 0.88 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HB3 | 1 | 0.88 |
| (1,449) | 1:A:28:ALA:HB1 | 1:A:29:GLN:HE21 | 6 | 0.88 |
| (1,449) | 1:A:28:ALA:HB2 | 1:A:29:GLN:HE21 | 6 | 0.88 |
| (1,449) | 1:A:28:ALA:HB3 | 1:A:29:GLN:HE21 | 6 | 0.88 |
| (1,420) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HE1 | 13 | 0.88 |
| (1,420) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HE2 | 13 | 0.88 |
| (1,420) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HE3 | 13 | 0.88 |
| (1,406) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:7:ILE:HB | 8 | 0.88 |
| (1,406) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:7:ILE:HB | 8 | 0.88 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:20:GLN:HB2 | 8 | 0.88 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:20:GLN:HB3 | 8 | 0.88 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HB2 | 8 | 0.88 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HB3 | 8 | 0.88 |
| (1,258) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:H | 10 | 0.88 |
| (1,258) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:H | 10 | 0.88 |
| (1,258) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:H | 11 | 0.88 |
| (1,258) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:H | 11 | 0.88 |
| (1,245) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD2 | 6 | 0.88 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,245) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD3 | 6 | 0.88 |
| (1,197) | 1:A:8:SER:H | 1:A:9:ASP:H | 3 | 0.88 |
| (2,11) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HG2 | 10 | 0.87 |
| (2,11) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HG3 | 10 | 0.87 |
| (2,11) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HG2 | 10 | 0.87 |
| (2,11) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HG3 | 10 | 0.87 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD21 | 14 | 0.87 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD22 | 14 | 0.87 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD23 | 14 | 0.87 |
| (1,341) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:H | 7 | 0.87 |
| (1,298) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HD1 | 14 | 0.87 |
| (1,298) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HD2 | 14 | 0.87 |
| (1,82) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:35:ASP:H | 11 | 0.86 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 9 | 0.86 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 9 | 0.86 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 9 | 0.86 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 9 | 0.86 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 9 | 0.86 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 9 | 0.86 |
| (1,436) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:40:ILE:HD11 | 10 | 0.86 |
| (1,436) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:40:ILE:HD12 | 10 | 0.86 |
| (1,436) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:40:ILE:HD13 | 10 | 0.86 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:ALA:H | 11 | 0.86 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:ALA:H | 11 | 0.86 |
| (1,418) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:ALA:H | 11 | 0.86 |
| (1,332) | 1:A:38:HIS:HA | 1:A:38:HIS:HD2 | 5 | 0.86 |
| (1,290) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:25:TRP:HD1 | 14 | 0.86 |
| (1,265) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:H | 13 | 0.86 |
| (1,249) | 1:A:37:LYS:HD2 | 1:A:38:HIS:H | 11 | 0.86 |
| (1,249) | 1:A:37:LYS:HD3 | 1:A:38:HIS:H | 11 | 0.86 |
| (1,196) | 1:A:28:ALA:H | 1:A:29:GLN:H | 11 | 0.86 |
| (1,189) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:33:LYS:H | 15 | 0.86 |
| (1,82) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:35:ASP:H | 3 | 0.85 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG21 | 1:A:9:ASP:H | 12 | 0.85 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG22 | 1:A:9:ASP:H | 12 | 0.85 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG23 | 1:A:9:ASP:H | 12 | 0.85 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG21 | 10 | 0.85 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG22 | 10 | 0.85 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG23 | 10 | 0.85 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG21 | 10 | 0.85 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG22 | 10 | 0.85 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG23 | 10 | 0.85 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG21 | 13 | 0.85 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG22 | 13 | 0.85 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG23 | 13 | 0.85 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG21 | 13 | 0.85 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG22 | 13 | 0.85 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG23 | 13 | 0.85 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HB2 | 3 | 0.85 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HB3 | 3 | 0.85 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HB2 | 3 | 0.85 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HB3 | 3 | 0.85 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HB2 | 3 | 0.85 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HB3 | 3 | 0.85 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG21 | 11 | 0.85 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG22 | 11 | 0.85 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG23 | 11 | 0.85 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG21 | 11 | 0.85 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG22 | 11 | 0.85 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG23 | 11 | 0.85 |
| (1,311) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:11:SER:HB2 | 8 | 0.85 |
| (1,311) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:11:SER:HB2 | 8 | 0.85 |
| (1,298) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HD1 | 5 | 0.85 |
| (1,298) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HD2 | 5 | 0.85 |
| (1,298) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HD1 | 12 | 0.85 |
| (1,298) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HD2 | 12 | 0.85 |
| (1,298) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HD1 | 13 | 0.85 |
| (1,298) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HD2 | 13 | 0.85 |
| (1,247) | 1:A:30:LYS:HG2 | 1:A:31:GLY:H | 14 | 0.85 |
| (1,247) | 1:A:30:LYS:HG3 | 1:A:31:GLY:H | 14 | 0.85 |
| (1,243) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HG2 | 2 | 0.85 |
| (1,243) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HG3 | 2 | 0.85 |
| (1,235) | 1:A:14:MET:HG2 | 1:A:15:ASP:H | 10 | 0.85 |
| (1,235) | 1:A:14:MET:HG3 | 1:A:15:ASP:H | 10 | 0.85 |
| (1,215) | 1:A:36:TRP:H | 1:A:38:HIS:H | 11 | 0.85 |
| (1,186) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:37:LYS:H | 14 | 0.85 |
| (1,176) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:36:TRP:H | 14 | 0.85 |
| (1,137) | 1:A:38:HIS:HA | 1:A:40:ILE:H | 9 | 0.85 |
| (1,137) | 1:A:38:HIS:HA | 1:A:40:ILE:H | 11 | 0.85 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG21 | 1:A:9:ASP:H | 6 | 0.84 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG22 | 1:A:9:ASP:H | 6 | 0.84 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG23 | 1:A:9:ASP:H | 6 | 0.84 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD11 | 13 | 0.84 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD12 | 13 | 0.84 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD13 | 13 | 0.84 |
| (1,341) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:H | 2 | 0.84 |
| (1,298) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HD1 | 3 | 0.84 |
| (1,298) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HD2 | 3 | 0.84 |
| (2,34) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:28:ALA:HB1 | 8 | 0.83 |
| (2,34) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:28:ALA:HB2 | 8 | 0.83 |
| (2,34) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:28:ALA:HB3 | 8 | 0.83 |
| (1,86) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:25:TRP:H | 3 | 0.83 |
| (1,86) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:25:TRP:H | 12 | 0.83 |
| (1,85) | 1:A:18:HIS:HA | 1:A:22:PHE:H | 15 | 0.83 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG21 | 1:A:9:ASP:H | 15 | 0.83 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG22 | 1:A:9:ASP:H | 15 | 0.83 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG23 | 1:A:9:ASP:H | 15 | 0.83 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 12 | 0.83 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 12 | 0.83 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 12 | 0.83 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 12 | 0.83 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 12 | 0.83 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 12 | 0.83 |
| (1,397) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG12 | 2 | 0.83 |
| (1,397) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG13 | 2 | 0.83 |
| (1,397) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG12 | 2 | 0.83 |
| (1,397) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG13 | 2 | 0.83 |
| (1,341) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:H | 14 | 0.83 |
| (1,332) | 1:A:38:HIS:HA | 1:A:38:HIS:HD2 | 9 | 0.83 |
| (1,252) | 1:A:32:LYS:HD2 | 1:A:33:LYS:H | 14 | 0.83 |
| (1,252) | 1:A:32:LYS:HD3 | 1:A:33:LYS:H | 14 | 0.83 |
| (1,243) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HG2 | 7 | 0.83 |
| (1,243) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HG3 | 7 | 0.83 |
| (1,212) | 1:A:6:PHE:HA | 1:A:10:TYR:H | 13 | 0.83 |
| (1,193) | 1:A:13:ALA:H | 1:A:14:MET:H | 4 | 0.83 |
| (1,193) | 1:A:13:ALA:H | 1:A:14:MET:H | 12 | 0.83 |
| (2,34) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:28:ALA:HB1 | 11 | 0.82 |
| (2,34) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:28:ALA:HB2 | 11 | 0.82 |
| (2,34) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:28:ALA:HB3 | 11 | 0.82 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE1 | 5 | 0.82 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE2 | 5 | 0.82 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE3 | 5 | 0.82 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE1 | 5 | 0.82 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE2 | 5 | 0.82 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE3 | 5 | 0.82 |
| (1,86) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:25:TRP:H | 1 | 0.82 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,86) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:25:TRP:H | 4 | 0.82 |
| (1,86) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:25:TRP:H | 6 | 0.82 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:25:TRP:H | 14 | 0.82 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:25:TRP:H | 14 | 0.82 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:25:TRP:H | 14 | 0.82 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HB2 | 9 | 0.82 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HB3 | 9 | 0.82 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HB2 | 9 | 0.82 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HB3 | 9 | 0.82 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HB2 | 9 | 0.82 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HB3 | 9 | 0.82 |
| (1,341) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:H | 5 | 0.82 |
| (1,298) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HD1 | 2 | 0.82 |
| (1,298) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HD2 | 2 | 0.82 |
| (1,290) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:25:TRP:HD1 | 3 | 0.82 |
| (1,261) | 1:A:32:LYS:HG2 | 1:A:36:TRP:H | 12 | 0.82 |
| (1,261) | 1:A:32:LYS:HG3 | 1:A:36:TRP:H | 12 | 0.82 |
| (1,258) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:H | 7 | 0.82 |
| (1,258) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:H | 7 | 0.82 |
| (1,252) | 1:A:32:LYS:HD2 | 1:A:33:LYS:H | 3 | 0.82 |
| (1,252) | 1:A:32:LYS:HD3 | 1:A:33:LYS:H | 3 | 0.82 |
| (1,243) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HG2 | 6 | 0.82 |
| (1,243) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HG3 | 6 | 0.82 |
| (1,243) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HG2 | 8 | 0.82 |
| (1,243) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HG3 | 8 | 0.82 |
| (1,222) | 1:A:20:GLN:HA | 1:A:24:ASN:H | 7 | 0.82 |
| (1,192) | 1:A:5:THR:H | 1:A:7:ILE:H | 1 | 0.82 |
| (1,176) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:36:TRP:H | 5 | 0.82 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG21 | 7 | 0.81 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG22 | 7 | 0.81 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG23 | 7 | 0.81 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG21 | 7 | 0.81 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG22 | 7 | 0.81 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG23 | 7 | 0.81 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD11 | 8 | 0.81 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD12 | 8 | 0.81 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD13 | 8 | 0.81 |
| (1,298) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HD1 | 11 | 0.81 |
| (1,298) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HD2 | 11 | 0.81 |
| (1,290) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:25:TRP:HD1 | 5 | 0.81 |
| (1,274) | 1:A:24:ASN:HB3 | 1:A:24:ASN:HD22 | 6 | 0.81 |
| (1,274) | 1:A:24:ASN:HB2 | 1:A:24:ASN:HD22 | 6 | 0.81 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,274) | 1:A:24:ASN:HB3 | 1:A:24:ASN:HD22 | 13 | 0.81 |
| (1,274) | 1:A:24:ASN:HB2 | 1:A:24:ASN:HD22 | 13 | 0.81 |
| (1,26) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:H | 8 | 0.81 |
| (1,257) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HD2 | 11 | 0.81 |
| (1,257) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HD3 | 11 | 0.81 |
| (1,249) | 1:A:37:LYS:HD2 | 1:A:38:HIS:H | 1 | 0.81 |
| (1,249) | 1:A:37:LYS:HD3 | 1:A:38:HIS:H | 1 | 0.81 |
| (1,249) | 1:A:37:LYS:HD2 | 1:A:38:HIS:H | 10 | 0.81 |
| (1,249) | 1:A:37:LYS:HD3 | 1:A:38:HIS:H | 10 | 0.81 |
| (1,243) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HG2 | 1 | 0.81 |
| (1,243) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HG3 | 1 | 0.81 |
| (1,243) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HG2 | 3 | 0.81 |
| (1,243) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HG3 | 3 | 0.81 |
| (1,243) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HG2 | 13 | 0.81 |
| (1,243) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HG3 | 13 | 0.81 |
| (1,110) | 1:A:5:THR:HB | 1:A:6:PHE:H | 1 | 0.81 |
| (2,34) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:28:ALA:HB1 | 12 | 0.8 |
| (2,34) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:28:ALA:HB2 | 12 | 0.8 |
| (2,34) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:28:ALA:HB3 | 12 | 0.8 |
| (1,51) | 1:A:30:LYS:HB2 | 1:A:31:GLY:H | 11 | 0.8 |
| (1,51) | 1:A:30:LYS:HB3 | 1:A:31:GLY:H | 11 | 0.8 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD11 | 14 | 0.8 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD12 | 14 | 0.8 |
| (1,481) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:27:LEU:HD13 | 14 | 0.8 |
| (1,345) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:8:SER:H | 8 | 0.8 |
| (1,345) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:8:SER:H | 8 | 0.8 |
| (1,343) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:36:TRP:HD1 | 2 | 0.8 |
| (1,326) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:HD1 | 13 | 0.8 |
| (1,326) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:HD2 | 13 | 0.8 |
| (1,274) | 1:A:24:ASN:HB3 | 1:A:24:ASN:HD22 | 4 | 0.8 |
| (1,274) | 1:A:24:ASN:HB2 | 1:A:24:ASN:HD22 | 4 | 0.8 |
| (1,274) | 1:A:24:ASN:HB3 | 1:A:24:ASN:HD22 | 8 | 0.8 |
| (1,274) | 1:A:24:ASN:HB2 | 1:A:24:ASN:HD22 | 8 | 0.8 |
| (1,259) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:31:GLY:H | 11 | 0.8 |
| (1,259) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:31:GLY:H | 11 | 0.8 |
| (1,249) | 1:A:37:LYS:HD2 | 1:A:38:HIS:H | 9 | 0.8 |
| (1,249) | 1:A:37:LYS:HD3 | 1:A:38:HIS:H | 9 | 0.8 |
| (1,245) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD2 | 11 | 0.8 |
| (1,245) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD3 | 11 | 0.8 |
| (1,169) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:H | 13 | 0.8 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:6:PHE:HB2 | 1 | 0.79 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:6:PHE:HB3 | 1 | 0.79 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 1 | 0.79 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:6:PHE:HB3 | 1 | 0.79 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:25:TRP:H | 2 | 0.79 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:25:TRP:H | 2 | 0.79 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:25:TRP:H | 2 | 0.79 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:25:TRP:H | 9 | 0.79 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:25:TRP:H | 9 | 0.79 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:25:TRP:H | 9 | 0.79 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG21 | 15 | 0.79 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG22 | 15 | 0.79 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG23 | 15 | 0.79 |
| (1,479) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HD11 | 11 | 0.79 |
| (1,479) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HD12 | 11 | 0.79 |
| (1,479) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HD13 | 11 | 0.79 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 13 | 0.79 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 13 | 0.79 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 13 | 0.79 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 13 | 0.79 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 13 | 0.79 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 13 | 0.79 |
| (1,420) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HE1 | 3 | 0.79 |
| (1,420) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HE2 | 3 | 0.79 |
| (1,420) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HE3 | 3 | 0.79 |
| (1,341) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:H | 1 | 0.79 |
| (1,334) | 1:A:14:MET:HA | 1:A:18:HIS:HD2 | 14 | 0.79 |
| (1,318) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HG | 1 | 0.79 |
| (1,290) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:25:TRP:HD1 | 2 | 0.79 |
| (1,290) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:25:TRP:HD1 | 12 | 0.79 |
| (1,266) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HG2 | 11 | 0.79 |
| (1,266) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HG3 | 11 | 0.79 |
| (1,258) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:H | 4 | 0.79 |
| (1,258) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:H | 4 | 0.79 |
| (1,246) | 1:A:33:LYS:HD2 | 1:A:34:ASN:H | 14 | 0.79 |
| (1,246) | 1:A:33:LYS:HD3 | 1:A:34:ASN:H | 14 | 0.79 |
| (1,233) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HG13 | 10 | 0.79 |
| (1,200) | 1:A:14:MET:H | 1:A:15:ASP:H | 14 | 0.79 |
| (1,168) | 1:A:4:GLY:H | 1:A:5:THR:H | 4 | 0.79 |
| (1,164) | 1:A:10:TYR:HB3 | 1:A:11:SER:H | 13 | 0.79 |
| (2,39) | 1:A:28:ALA:HB1 | 1:A:29:GLN:HE22 | 8 | 0.78 |
| (2,39) | 1:A:28:ALA:HB2 | 1:A:29:GLN:HE22 | 8 | 0.78 |
| (2,39) | 1:A:28:ALA:HB3 | 1:A:29:GLN:HE22 | 8 | 0.78 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:25:TRP:H | 7 | 0.78 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:25:TRP:H | 7 | 0.78 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:25:TRP:H | 7 | 0.78 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG21 | 10 | 0.78 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG22 | 10 | 0.78 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG23 | 10 | 0.78 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG21 | 1:A:9:ASP:H | 5 | 0.78 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG22 | 1:A:9:ASP:H | 5 | 0.78 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG23 | 1:A:9:ASP:H | 5 | 0.78 |
| (1,416) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HD11 | 1 | 0.78 |
| (1,416) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HD12 | 1 | 0.78 |
| (1,416) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HD13 | 1 | 0.78 |
| (1,326) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:HD1 | 12 | 0.78 |
| (1,326) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:HD2 | 12 | 0.78 |
| (1,298) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HD1 | 9 | 0.78 |
| (1,298) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HD2 | 9 | 0.78 |
| (1,266) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HG2 | 3 | 0.78 |
| (1,266) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HG3 | 3 | 0.78 |
| (1,260) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:34:ASN:H | 8 | 0.78 |
| (1,260) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:34:ASN:H | 8 | 0.78 |
| (1,249) | 1:A:37:LYS:HD2 | 1:A:38:HIS:H | 7 | 0.78 |
| (1,249) | 1:A:37:LYS:HD3 | 1:A:38:HIS:H | 7 | 0.78 |
| (1,243) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HG2 | 10 | 0.78 |
| (1,243) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HG3 | 10 | 0.78 |
| (1,223) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:36:TRP:H | 1 | 0.78 |
| (1,222) | 1:A:20:GLN:HA | 1:A:24:ASN:H | 4 | 0.78 |
| (1,168) | 1:A:4:GLY:H | 1:A:5:THR:H | 15 | 0.78 |
| (1,137) | 1:A:38:HIS:HA | 1:A:40:ILE:H | 2 | 0.78 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:13:ALA:HB1 | 8 | 0.77 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:13:ALA:HB2 | 8 | 0.77 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:13:ALA:HB3 | 8 | 0.77 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:13:ALA:HB1 | 8 | 0.77 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:13:ALA:HB2 | 8 | 0.77 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:13:ALA:HB3 | 8 | 0.77 |
| (1,486) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 13 | 0.77 |
| (1,486) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 13 | 0.77 |
| (1,486) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 13 | 0.77 |
| (1,486) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:26:LEU:HD11 | 13 | 0.77 |
| (1,486) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:26:LEU:HD12 | 13 | 0.77 |
| (1,486) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:26:LEU:HD13 | 13 | 0.77 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG21 | 13 | 0.77 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG22 | 13 | 0.77 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG23 | 13 | 0.77 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG21 | 14 | 0.77 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG22 | 14 | 0.77 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG23 | 14 | 0.77 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG21 | 1:A:9:ASP:H | 11 | 0.77 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG22 | 1:A:9:ASP:H | 11 | 0.77 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG23 | 1:A:9:ASP:H | 11 | 0.77 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG21 | 7 | 0.77 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG22 | 7 | 0.77 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG23 | 7 | 0.77 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG21 | 7 | 0.77 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG22 | 7 | 0.77 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG23 | 7 | 0.77 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG21 | 8 | 0.77 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG22 | 8 | 0.77 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG23 | 8 | 0.77 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG21 | 8 | 0.77 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG22 | 8 | 0.77 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG23 | 8 | 0.77 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG21 | 15 | 0.77 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG22 | 15 | 0.77 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG23 | 15 | 0.77 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG21 | 15 | 0.77 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG22 | 15 | 0.77 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG23 | 15 | 0.77 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG21 | 1:A:6:PHE:H | 4 | 0.77 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG22 | 1:A:6:PHE:H | 4 | 0.77 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG23 | 1:A:6:PHE:H | 4 | 0.77 |
| (1,290) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:25:TRP:HD1 | 11 | 0.77 |
| (1,266) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HG2 | 1 | 0.77 |
| (1,266) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HG3 | 1 | 0.77 |
| (1,266) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HG2 | 8 | 0.77 |
| (1,266) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HG3 | 8 | 0.77 |
| (1,266) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HG2 | 15 | 0.77 |
| (1,266) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HG3 | 15 | 0.77 |
| (1,257) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HD2 | 12 | 0.77 |
| (1,257) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HD3 | 12 | 0.77 |
| (1,249) | 1:A:37:LYS:HD2 | 1:A:38:HIS:H | 8 | 0.77 |
| (1,249) | 1:A:37:LYS:HD3 | 1:A:38:HIS:H | 8 | 0.77 |
| (1,245) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD2 | 10 | 0.77 |
| (1,245) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD3 | 10 | 0.77 |
| (1,243) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HG2 | 4 | 0.77 |
| (1,243) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HG3 | 4 | 0.77 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,135) | 1:A:5:THR:HB | 1:A:8:SER:H | 1 | 0.77 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:25:TRP:H | 3 | 0.76 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:25:TRP:H | 3 | 0.76 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:25:TRP:H | 3 | 0.76 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD21 | 5 | 0.76 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD22 | 5 | 0.76 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD23 | 5 | 0.76 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HB2 | 2 | 0.76 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HB3 | 2 | 0.76 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HB2 | 2 | 0.76 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HB3 | 2 | 0.76 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HB2 | 2 | 0.76 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HB3 | 2 | 0.76 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HB2 | 10 | 0.76 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HB3 | 10 | 0.76 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HB2 | 10 | 0.76 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HB3 | 10 | 0.76 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HB2 | 10 | 0.76 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HB3 | 10 | 0.76 |
| (1,421) | 1:A:14:MET:HE1 | 1:A:15:ASP:H | 14 | 0.76 |
| (1,421) | 1:A:14:MET:HE2 | 1:A:15:ASP:H | 14 | 0.76 |
| (1,421) | 1:A:14:MET:HE3 | 1:A:15:ASP:H | 14 | 0.76 |
| (1,416) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HD11 | 2 | 0.76 |
| (1,416) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HD12 | 2 | 0.76 |
| (1,416) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HD13 | 2 | 0.76 |
| (1,343) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:36:TRP:HD1 | 7 | 0.76 |
| (1,326) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:HD1 | 9 | 0.76 |
| (1,326) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:HD2 | 9 | 0.76 |
| (1,266) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HG2 | 2 | 0.76 |
| (1,266) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HG3 | 2 | 0.76 |
| (1,266) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HG2 | 7 | 0.76 |
| (1,266) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HG3 | 7 | 0.76 |
| (1,266) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HG2 | 10 | 0.76 |
| (1,266) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HG3 | 10 | 0.76 |
| (1,233) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HG13 | 6 | 0.76 |
| (1,217) | 1:A:1:TYR:HA | 1:A:3:GLU:H | 8 | 0.76 |
| (1,213) | 1:A:8:SER:H | 1:A:10:TYR:H | 13 | 0.76 |
| (1,172) | 1:A:4:GLY:H | 1:A:6:PHE:H | 10 | 0.76 |
| (1,168) | 1:A:4:GLY:H | 1:A:5:THR:H | 10 | 0.76 |
| (1,127) | 1:A:29:GLN:HA | 1:A:32:LYS:H | 12 | 0.76 |
| (1,117) | 1:A:11:SER:HB2 | 1:A:12:ILE:H | 13 | 0.76 |
| (1,53) | 1:A:32:LYS:HB2 | 1:A:33:LYS:H | 9 | 0.75 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:25:TRP:H | 1 | 0.75 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:25:TRP:H | 1 | 0.75 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:25:TRP:H | 1 | 0.75 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:25:TRP:H | 5 | 0.75 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:25:TRP:H | 5 | 0.75 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:25:TRP:H | 5 | 0.75 |
| (1,326) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:HD1 | 1 | 0.75 |
| (1,326) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:HD2 | 1 | 0.75 |
| (1,323) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HB2 | 4 | 0.75 |
| (1,323) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HB3 | 4 | 0.75 |
| (1,298) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HD1 | 4 | 0.75 |
| (1,298) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:6:PHE:HD2 | 4 | 0.75 |
| (1,290) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:25:TRP:HD1 | 15 | 0.75 |
| (1,266) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HG2 | 5 | 0.75 |
| (1,266) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HG3 | 5 | 0.75 |
| (1,266) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HG2 | 9 | 0.75 |
| (1,266) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HG3 | 9 | 0.75 |
| (1,266) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HG2 | 14 | 0.75 |
| (1,266) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HG3 | 14 | 0.75 |
| (1,247) | 1:A:30:LYS:HG2 | 1:A:31:GLY:H | 7 | 0.75 |
| (1,247) | 1:A:30:LYS:HG3 | 1:A:31:GLY:H | 7 | 0.75 |
| (1,206) | 1:A:7:ILE:HB | 1:A:9:ASP:H | 13 | 0.75 |
| (1,172) | 1:A:4:GLY:H | 1:A:6:PHE:H | 4 | 0.75 |
| (1,164) | 1:A:10:TYR:HB3 | 1:A:11:SER:H | 1 | 0.75 |
| (2,28) | 1:A:6:PHE:HE1 | 1:A:7:ILE:HD11 | 8 | 0.74 |
| (2,28) | 1:A:6:PHE:HE1 | 1:A:7:ILE:HD12 | 8 | 0.74 |
| (2,28) | 1:A:6:PHE:HE1 | 1:A:7:ILE:HD13 | 8 | 0.74 |
| (2,28) | 1:A:6:PHE:HE2 | 1:A:7:ILE:HD11 | 8 | 0.74 |
| (2,28) | 1:A:6:PHE:HE2 | 1:A:7:ILE:HD12 | 8 | 0.74 |
| (2,28) | 1:A:6:PHE:HE2 | 1:A:7:ILE:HD13 | 8 | 0.74 |
| (1,85) | 1:A:18:HIS:HA | 1:A:22:PHE:H | 1 | 0.74 |
| (1,53) | 1:A:32:LYS:HB2 | 1:A:33:LYS:H | 2 | 0.74 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG21 | 12 | 0.74 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG22 | 12 | 0.74 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG12 | 1:A:41:THR:HG23 | 12 | 0.74 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:41:THR:HG21 | 12 | 0.74 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:41:THR:HG22 | 12 | 0.74 |
| (1,475) | 1:A:40:ILE:HG13 | 1:A:41:THR:HG23 | 12 | 0.74 |
| (1,421) | 1:A:14:MET:HE1 | 1:A:15:ASP:H | 12 | 0.74 |
| (1,421) | 1:A:14:MET:HE2 | 1:A:15:ASP:H | 12 | 0.74 |
| (1,421) | 1:A:14:MET:HE3 | 1:A:15:ASP:H | 12 | 0.74 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:20:GLN:HB2 | 4 | 0.74 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:20:GLN:HB3 | 4 | 0.74 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HB2 | 4 | 0.74 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HB3 | 4 | 0.74 |
| (1,290) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:25:TRP:HD1 | 9 | 0.74 |
| (1,258) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:H | 2 | 0.74 |
| (1,258) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:H | 2 | 0.74 |
| (1,244) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HD2 | 7 | 0.74 |
| (1,244) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HD3 | 7 | 0.74 |
| (1,223) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:36:TRP:H | 12 | 0.74 |
| (1,178) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:36:TRP:H | 10 | 0.74 |
| (2,34) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:28:ALA:HB1 | 6 | 0.73 |
| (2,34) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:28:ALA:HB2 | 6 | 0.73 |
| (2,34) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:28:ALA:HB3 | 6 | 0.73 |
| (1,86) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:25:TRP:H | 7 | 0.73 |
| (1,79) | 1:A:14:MET:HA | 1:A:17:ILE:H | 3 | 0.73 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:25:TRP:H | 15 | 0.73 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:25:TRP:H | 15 | 0.73 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:25:TRP:H | 15 | 0.73 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG21 | 6 | 0.73 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG22 | 6 | 0.73 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG23 | 6 | 0.73 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HB2 | 6 | 0.73 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HB3 | 6 | 0.73 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HB2 | 6 | 0.73 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HB3 | 6 | 0.73 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HB2 | 6 | 0.73 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HB3 | 6 | 0.73 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 3 | 0.73 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 3 | 0.73 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 3 | 0.73 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 3 | 0.73 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 3 | 0.73 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 3 | 0.73 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG21 | 1:A:7:ILE:H | 9 | 0.73 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG22 | 1:A:7:ILE:H | 9 | 0.73 |
| (1,414) | 1:A:5:THR:HG23 | 1:A:7:ILE:H | 9 | 0.73 |
| (1,332) | 1:A:38:HIS:HA | 1:A:38:HIS:HD2 | 2 | 0.73 |
| (1,258) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:H | 5 | 0.73 |
| (1,258) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:H | 5 | 0.73 |
| (1,247) | 1:A:30:LYS:HG2 | 1:A:31:GLY:H | 10 | 0.73 |
| (1,247) | 1:A:30:LYS:HG3 | 1:A:31:GLY:H | 10 | 0.73 |
| (1,168) | 1:A:4:GLY:H | 1:A:5:THR:H | 6 | 0.73 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,85) | 1:A:18:HIS:HA | 1:A:22:PHE:H | 12 | 0.72 |
| (1,8) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:10:TYR:HB2 | 1 | 0.72 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG21 | 1:A:9:ASP:H | 9 | 0.72 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG22 | 1:A:9:ASP:H | 9 | 0.72 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG23 | 1:A:9:ASP:H | 9 | 0.72 |
| (1,479) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HD11 | 4 | 0.72 |
| (1,479) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HD12 | 4 | 0.72 |
| (1,479) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HD13 | 4 | 0.72 |
| (1,326) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:HD1 | 10 | 0.72 |
| (1,326) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:HD2 | 10 | 0.72 |
| (1,290) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:25:TRP:HD1 | 10 | 0.72 |
| (1,174) | 1:A:38:HIS:H | 1:A:39:ASN:H | 1 | 0.72 |
| (1,124) | 1:A:28:ALA:HA | 1:A:31:GLY:H | 11 | 0.72 |
| (2,5) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:12:ILE:HA | 11 | 0.71 |
| (2,5) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:12:ILE:HA | 11 | 0.71 |
| (1,86) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:25:TRP:H | 11 | 0.71 |
| (1,86) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:25:TRP:H | 13 | 0.71 |
| (1,82) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:35:ASP:H | 8 | 0.71 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG21 | 1:A:9:ASP:H | 4 | 0.71 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG22 | 1:A:9:ASP:H | 4 | 0.71 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG23 | 1:A:9:ASP:H | 4 | 0.71 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG21 | 10 | 0.71 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG22 | 10 | 0.71 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG23 | 10 | 0.71 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG21 | 10 | 0.71 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG22 | 10 | 0.71 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG23 | 10 | 0.71 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 1 | 0.71 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 1 | 0.71 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 1 | 0.71 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 1 | 0.71 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 1 | 0.71 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 1 | 0.71 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 6 | 0.71 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 6 | 0.71 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 6 | 0.71 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 6 | 0.71 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 6 | 0.71 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 6 | 0.71 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD21 | 1:A:29:GLN:H | 8 | 0.71 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD22 | 1:A:29:GLN:H | 8 | 0.71 |
| (1,432) | 1:A:26:LEU:HD23 | 1:A:29:GLN:H | 8 | 0.71 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,416) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HD11 | 4 | 0.71 |
| (1,416) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HD12 | 4 | 0.71 |
| (1,416) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HD13 | 4 | 0.71 |
| (1,257) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HD2 | 14 | 0.71 |
| (1,257) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HD3 | 14 | 0.71 |
| (1,252) | 1:A:32:LYS:HD2 | 1:A:33:LYS:H | 1 | 0.71 |
| (1,252) | 1:A:32:LYS:HD3 | 1:A:33:LYS:H | 1 | 0.71 |
| (1,247) | 1:A:30:LYS:HG2 | 1:A:31:GLY:H | 4 | 0.71 |
| (1,247) | 1:A:30:LYS:HG3 | 1:A:31:GLY:H | 4 | 0.71 |
| (1,220) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:36:TRP:H | 1 | 0.71 |
| (1,200) | 1:A:14:MET:H | 1:A:15:ASP:H | 15 | 0.71 |
| (1,178) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:36:TRP:H | 7 | 0.71 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HE1 | 13 | 0.7 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HE2 | 13 | 0.7 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HE3 | 13 | 0.7 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HE1 | 13 | 0.7 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HE2 | 13 | 0.7 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HE3 | 13 | 0.7 |
| (1,85) | 1:A:18:HIS:HA | 1:A:22:PHE:H | 10 | 0.7 |
| (1,82) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:35:ASP:H | 6 | 0.7 |
| (1,82) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:35:ASP:H | 9 | 0.7 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:25:TRP:H | 6 | 0.7 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:25:TRP:H | 6 | 0.7 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:25:TRP:H | 6 | 0.7 |
| (1,479) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HD11 | 1 | 0.7 |
| (1,479) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HD12 | 1 | 0.7 |
| (1,479) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HD13 | 1 | 0.7 |
| (1,473) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:26:LEU:HD21 | 8 | 0.7 |
| (1,473) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:26:LEU:HD22 | 8 | 0.7 |
| (1,473) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:26:LEU:HD23 | 8 | 0.7 |
| (1,473) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:26:LEU:HD21 | 8 | 0.7 |
| (1,473) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:26:LEU:HD22 | 8 | 0.7 |
| (1,473) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:26:LEU:HD23 | 8 | 0.7 |
| (1,473) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:26:LEU:HD21 | 8 | 0.7 |
| (1,473) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:26:LEU:HD22 | 8 | 0.7 |
| (1,473) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:26:LEU:HD23 | 8 | 0.7 |
| (1,473) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:26:LEU:HD11 | 8 | 0.7 |
| (1,473) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:26:LEU:HD12 | 8 | 0.7 |
| (1,473) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:26:LEU:HD13 | 8 | 0.7 |
| (1,473) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:26:LEU:HD11 | 8 | 0.7 |
| (1,473) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:26:LEU:HD12 | 8 | 0.7 |
| (1,473) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:26:LEU:HD13 | 8 | 0.7 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,473) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:26:LEU:HD11 | 8 | 0.7 |
| (1,473) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:26:LEU:HD12 | 8 | 0.7 |
| (1,473) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:26:LEU:HD13 | 8 | 0.7 |
| (1,261) | 1:A:32:LYS:HG2 | 1:A:36:TRP:H | 8 | 0.7 |
| (1,261) | 1:A:32:LYS:HG3 | 1:A:36:TRP:H | 8 | 0.7 |
| (1,252) | 1:A:32:LYS:HD2 | 1:A:33:LYS:H | 2 | 0.7 |
| (1,252) | 1:A:32:LYS:HD3 | 1:A:33:LYS:H | 2 | 0.7 |
| (1,243) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HG2 | 14 | 0.7 |
| (1,243) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HG3 | 14 | 0.7 |
| (1,237) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HD2 | 7 | 0.7 |
| (1,237) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HD3 | 7 | 0.7 |
| (1,222) | 1:A:20:GLN:HA | 1:A:24:ASN:H | 5 | 0.7 |
| (1,220) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:36:TRP:H | 5 | 0.7 |
| (1,215) | 1:A:36:TRP:H | 1:A:38:HIS:H | 5 | 0.7 |
| (1,186) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:37:LYS:H | 1 | 0.7 |
| (1,174) | 1:A:38:HIS:H | 1:A:39:ASN:H | 15 | 0.7 |
| (2,13) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HG | 14 | 0.69 |
| (2,13) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HG | 14 | 0.69 |
| (1,82) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:35:ASP:H | 12 | 0.69 |
| (1,421) | 1:A:14:MET:HE1 | 1:A:15:ASP:H | 7 | 0.69 |
| (1,421) | 1:A:14:MET:HE2 | 1:A:15:ASP:H | 7 | 0.69 |
| (1,421) | 1:A:14:MET:HE3 | 1:A:15:ASP:H | 7 | 0.69 |
| (1,401) | 1:A:12:ILE:HB | 1:A:12:ILE:HG12 | 5 | 0.69 |
| (1,401) | 1:A:12:ILE:HB | 1:A:12:ILE:HG12 | 9 | 0.69 |
| (1,401) | 1:A:12:ILE:HB | 1:A:12:ILE:HG12 | 10 | 0.69 |
| (1,401) | 1:A:12:ILE:HB | 1:A:12:ILE:HG12 | 15 | 0.69 |
| (1,291) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:25:TRP:HE3 | 6 | 0.69 |
| (1,246) | 1:A:33:LYS:HD2 | 1:A:34:ASN:H | 3 | 0.69 |
| (1,246) | 1:A:33:LYS:HD3 | 1:A:34:ASN:H | 3 | 0.69 |
| (1,206) | 1:A:7:ILE:HB | 1:A:9:ASP:H | 6 | 0.69 |
| (1,82) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:35:ASP:H | 7 | 0.68 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HB2 | 8 | 0.68 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HB3 | 8 | 0.68 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HB2 | 8 | 0.68 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HB3 | 8 | 0.68 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HB2 | 8 | 0.68 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HB3 | 8 | 0.68 |
| (1,401) | 1:A:12:ILE:HB | 1:A:12:ILE:HG12 | 1 | 0.68 |
| (1,401) | 1:A:12:ILE:HB | 1:A:12:ILE:HG12 | 14 | 0.68 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:20:GLN:HB2 | 5 | 0.68 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:20:GLN:HB3 | 5 | 0.68 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HB2 | 5 | 0.68 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HB3 | 5 | 0.68 |
| (1,199) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:ALA:H | 15 | 0.68 |
| (1,179) | 1:A:25:TRP:H | 1:A:26:LEU:H | 14 | 0.68 |
| (1,176) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:36:TRP:H | 6 | 0.68 |
| (1,168) | 1:A:4:GLY:H | 1:A:5:THR:H | 8 | 0.68 |
| (1,107) | 1:A:38:HIS:HA | 1:A:39:ASN:H | 6 | 0.68 |
| (2,8) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:4:GLY:HA2 | 12 | 0.67 |
| (2,8) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:4:GLY:HA2 | 12 | 0.67 |
| (1,82) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:35:ASP:H | 15 | 0.67 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG21 | 1:A:6:PHE:H | 5 | 0.67 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG22 | 1:A:6:PHE:H | 5 | 0.67 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG23 | 1:A:6:PHE:H | 5 | 0.67 |
| (1,401) | 1:A:12:ILE:HB | 1:A:12:ILE:HG12 | 2 | 0.67 |
| (1,401) | 1:A:12:ILE:HB | 1:A:12:ILE:HG12 | 6 | 0.67 |
| (1,401) | 1:A:12:ILE:HB | 1:A:12:ILE:HG12 | 11 | 0.67 |
| (1,323) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HB2 | 13 | 0.67 |
| (1,323) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HB3 | 13 | 0.67 |
| (1,311) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:11:SER:HB2 | 11 | 0.67 |
| (1,311) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:11:SER:HB2 | 11 | 0.67 |
| (1,291) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:25:TRP:HE3 | 3 | 0.67 |
| (1,244) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HD2 | 14 | 0.67 |
| (1,244) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HD3 | 14 | 0.67 |
| (1,186) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:37:LYS:H | 13 | 0.67 |
| (1,178) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:36:TRP:H | 15 | 0.67 |
| (1,168) | 1:A:4:GLY:H | 1:A:5:THR:H | 9 | 0.67 |
| (1,107) | 1:A:38:HIS:HA | 1:A:39:ASN:H | 4 | 0.67 |
| (1,107) | 1:A:38:HIS:HA | 1:A:39:ASN:H | 13 | 0.67 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:5:THR:HG21 | 8 | 0.66 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:5:THR:HG22 | 8 | 0.66 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:5:THR:HG23 | 8 | 0.66 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:5:THR:HG21 | 8 | 0.66 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:5:THR:HG22 | 8 | 0.66 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:5:THR:HG23 | 8 | 0.66 |
| (1,79) | 1:A:14:MET:HA | 1:A:17:ILE:H | 1 | 0.66 |
| (1,7) | 1:A:6:PHE:HB2 | 1:A:7:ILE:H | 1 | 0.66 |
| (1,7) | 1:A:6:PHE:HB3 | 1:A:7:ILE:H | 1 | 0.66 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:25:TRP:H | 10 | 0.66 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:25:TRP:H | 10 | 0.66 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:25:TRP:H | 10 | 0.66 |
| (1,479) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HD11 | 6 | 0.66 |
| (1,479) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HD12 | 6 | 0.66 |
| (1,479) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HD13 | 6 | 0.66 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD11 | 6 | 0.66 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD12 | 6 | 0.66 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD13 | 6 | 0.66 |
| (1,406) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:7:ILE:HB | 9 | 0.66 |
| (1,406) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:7:ILE:HB | 9 | 0.66 |
| (1,341) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:H | 9 | 0.66 |
| (1,334) | 1:A:14:MET:HA | 1:A:18:HIS:HD2 | 13 | 0.66 |
| (1,326) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:HD1 | 14 | 0.66 |
| (1,326) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:HD2 | 14 | 0.66 |
| (1,265) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:H | 4 | 0.66 |
| (1,261) | 1:A:32:LYS:HG2 | 1:A:36:TRP:H | 13 | 0.66 |
| (1,261) | 1:A:32:LYS:HG3 | 1:A:36:TRP:H | 13 | 0.66 |
| (1,260) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:34:ASN:H | 5 | 0.66 |
| (1,260) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:34:ASN:H | 5 | 0.66 |
| (1,193) | 1:A:13:ALA:H | 1:A:14:MET:H | 10 | 0.66 |
| (1,176) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:36:TRP:H | 3 | 0.66 |
| (1,107) | 1:A:38:HIS:HA | 1:A:39:ASN:H | 2 | 0.66 |
| (1,107) | 1:A:38:HIS:HA | 1:A:39:ASN:H | 10 | 0.66 |
| (2,2) | 1:A:32:LYS:HG2 | 1:A:34:ASN:H | 15 | 0.65 |
| (2,2) | 1:A:32:LYS:HG3 | 1:A:34:ASN:H | 15 | 0.65 |
| (2,13) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HG | 8 | 0.65 |
| (2,13) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HG | 8 | 0.65 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HB2 | 12 | 0.65 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:LEU:HB3 | 12 | 0.65 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HB2 | 12 | 0.65 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:LEU:HB3 | 12 | 0.65 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HB2 | 12 | 0.65 |
| (1,459) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:LEU:HB3 | 12 | 0.65 |
| (1,436) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:40:ILE:HD11 | 12 | 0.65 |
| (1,436) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:40:ILE:HD12 | 12 | 0.65 |
| (1,436) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:40:ILE:HD13 | 12 | 0.65 |
| (1,335) | 1:A:17:ILE:HA | 1:A:18:HIS:HD2 | 5 | 0.65 |
| (1,246) | 1:A:33:LYS:HD2 | 1:A:34:ASN:H | 5 | 0.65 |
| (1,246) | 1:A:33:LYS:HD3 | 1:A:34:ASN:H | 5 | 0.65 |
| (1,135) | 1:A:5:THR:HB | 1:A:8:SER:H | 8 | 0.65 |
| (1,82) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:35:ASP:H | 13 | 0.64 |
| (1,80) | 1:A:16:LYS:HA | 1:A:19:GLN:H | 15 | 0.64 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD11 | 11 | 0.64 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD12 | 11 | 0.64 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD13 | 11 | 0.64 |
| (1,287) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HA | 4 | 0.64 |
| (1,233) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HG13 | 11 | 0.64 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,220) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:36:TRP:H | 15 | 0.64 |
| (1,212) | 1:A:6:PHE:HA | 1:A:10:TYR:H | 5 | 0.64 |
| (1,178) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:36:TRP:H | 3 | 0.64 |
| (1,137) | 1:A:38:HIS:HA | 1:A:40:ILE:H | 8 | 0.64 |
| (1,107) | 1:A:38:HIS:HA | 1:A:39:ASN:H | 15 | 0.64 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HG2 | 6 | 0.63 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HG3 | 6 | 0.63 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HG2 | 6 | 0.63 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HG3 | 6 | 0.63 |
| (1,53) | 1:A:32:LYS:HB2 | 1:A:33:LYS:H | 1 | 0.63 |
| (1,53) | 1:A:32:LYS:HB2 | 1:A:33:LYS:H | 7 | 0.63 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:25:TRP:H | 8 | 0.63 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:25:TRP:H | 8 | 0.63 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:25:TRP:H | 8 | 0.63 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG21 | 8 | 0.63 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG22 | 8 | 0.63 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG23 | 8 | 0.63 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG21 | 8 | 0.63 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG22 | 8 | 0.63 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG23 | 8 | 0.63 |
| (1,448) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:28:ALA:HB1 | 11 | 0.63 |
| (1,448) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:28:ALA:HB2 | 11 | 0.63 |
| (1,448) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:28:ALA:HB3 | 11 | 0.63 |
| (1,421) | 1:A:14:MET:HE1 | 1:A:15:ASP:H | 8 | 0.63 |
| (1,421) | 1:A:14:MET:HE2 | 1:A:15:ASP:H | 8 | 0.63 |
| (1,421) | 1:A:14:MET:HE3 | 1:A:15:ASP:H | 8 | 0.63 |
| (1,345) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:8:SER:H | 9 | 0.63 |
| (1,345) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:8:SER:H | 9 | 0.63 |
| (1,310) | 1:A:8:SER:HB3 | 1:A:10:TYR:HD1 | 8 | 0.63 |
| (1,310) | 1:A:8:SER:HB3 | 1:A:10:TYR:HD2 | 8 | 0.63 |
| (1,258) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:32:LYS:H | 9 | 0.63 |
| (1,258) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:32:LYS:H | 9 | 0.63 |
| (1,257) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HD2 | 4 | 0.63 |
| (1,257) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HD3 | 4 | 0.63 |
| (1,257) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HD2 | 10 | 0.63 |
| (1,257) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HD3 | 10 | 0.63 |
| (1,252) | 1:A:32:LYS:HD2 | 1:A:33:LYS:H | 7 | 0.63 |
| (1,252) | 1:A:32:LYS:HD3 | 1:A:33:LYS:H | 7 | 0.63 |
| (1,244) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HD2 | 5 | 0.63 |
| (1,244) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HD3 | 5 | 0.63 |
| (1,243) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HG2 | 11 | 0.63 |
| (1,243) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HG3 | 11 | 0.63 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,220) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:36:TRP:H | 3 | 0.63 |
| (1,217) | 1:A:1:TYR:HA | 1:A:3:GLU:H | 6 | 0.63 |
| (1,217) | 1:A:1:TYR:HA | 1:A:3:GLU:H | 15 | 0.63 |
| (1,178) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:36:TRP:H | 1 | 0.63 |
| (1,176) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:36:TRP:H | 15 | 0.63 |
| (1,164) | 1:A:10:TYR:HB3 | 1:A:11:SER:H | 8 | 0.63 |
| (1,107) | 1:A:38:HIS:HA | 1:A:39:ASN:H | 9 | 0.63 |
| (2,9) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HB2 | 13 | 0.62 |
| (2,9) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HB3 | 13 | 0.62 |
| (2,9) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HB2 | 13 | 0.62 |
| (2,9) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HB3 | 13 | 0.62 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:13:ALA:HB1 | 2 | 0.62 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:13:ALA:HB2 | 2 | 0.62 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:13:ALA:HB3 | 2 | 0.62 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:13:ALA:HB1 | 2 | 0.62 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:13:ALA:HB2 | 2 | 0.62 |
| (2,35) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:13:ALA:HB3 | 2 | 0.62 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:25:TRP:H | 12 | 0.62 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:25:TRP:H | 12 | 0.62 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:25:TRP:H | 12 | 0.62 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG21 | 3 | 0.62 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG22 | 3 | 0.62 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG23 | 3 | 0.62 |
| (1,448) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:28:ALA:HB1 | 13 | 0.62 |
| (1,448) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:28:ALA:HB2 | 13 | 0.62 |
| (1,448) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:28:ALA:HB3 | 13 | 0.62 |
| (1,421) | 1:A:14:MET:HE1 | 1:A:15:ASP:H | 10 | 0.62 |
| (1,421) | 1:A:14:MET:HE2 | 1:A:15:ASP:H | 10 | 0.62 |
| (1,421) | 1:A:14:MET:HE3 | 1:A:15:ASP:H | 10 | 0.62 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG21 | 1:A:6:PHE:H | 3 | 0.62 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG22 | 1:A:6:PHE:H | 3 | 0.62 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG23 | 1:A:6:PHE:H | 3 | 0.62 |
| (1,291) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:25:TRP:HE3 | 11 | 0.62 |
| (1,290) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:25:TRP:HD1 | 4 | 0.62 |
| (1,252) | 1:A:32:LYS:HD2 | 1:A:33:LYS:H | 5 | 0.62 |
| (1,252) | 1:A:32:LYS:HD3 | 1:A:33:LYS:H | 5 | 0.62 |
| (1,219) | 1:A:30:LYS:HA | 1:A:32:LYS:H | 15 | 0.62 |
| (1,196) | 1:A:28:ALA:H | 1:A:29:GLN:H | 3 | 0.62 |
| (1,179) | 1:A:25:TRP:H | 1:A:26:LEU:H | 5 | 0.62 |
| (1,129) | 1:A:31:GLY:HA2 | 1:A:32:LYS:H | 15 | 0.62 |
| (1,129) | 1:A:31:GLY:HA3 | 1:A:32:LYS:H | 15 | 0.62 |
| (1,107) | 1:A:38:HIS:HA | 1:A:39:ASN:H | 5 | 0.62 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,107) | 1:A:38:HIS:HA | 1:A:39:ASN:H | 7 | 0.62 |
| (1,107) | 1:A:38:HIS:HA | 1:A:39:ASN:H | 11 | 0.62 |
| (1,107) | 1:A:38:HIS:HA | 1:A:39:ASN:H | 14 | 0.62 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:6:PHE:HB2 | 5 | 0.61 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:6:PHE:HB3 | 5 | 0.61 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 5 | 0.61 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:6:PHE:HB3 | 5 | 0.61 |
| (2,13) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HG | 5 | 0.61 |
| (2,13) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HG | 5 | 0.61 |
| (1,86) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:25:TRP:H | 15 | 0.61 |
| (1,85) | 1:A:18:HIS:HA | 1:A:22:PHE:H | 6 | 0.61 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG21 | 1:A:9:ASP:H | 1 | 0.61 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG22 | 1:A:9:ASP:H | 1 | 0.61 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG23 | 1:A:9:ASP:H | 1 | 0.61 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG21 | 1:A:6:PHE:H | 10 | 0.61 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG22 | 1:A:6:PHE:H | 10 | 0.61 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG23 | 1:A:6:PHE:H | 10 | 0.61 |
| (1,325) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:18:HIS:HD2 | 4 | 0.61 |
| (1,325) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:18:HIS:HD2 | 4 | 0.61 |
| (1,311) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:11:SER:HB2 | 1 | 0.61 |
| (1,311) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:11:SER:HB2 | 1 | 0.61 |
| (1,311) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:11:SER:HB2 | 2 | 0.61 |
| (1,311) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:11:SER:HB2 | 2 | 0.61 |
| (1,259) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:31:GLY:H | 14 | 0.61 |
| (1,259) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:31:GLY:H | 14 | 0.61 |
| (1,257) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HD2 | 1 | 0.61 |
| (1,257) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HD3 | 1 | 0.61 |
| (1,257) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HD2 | 7 | 0.61 |
| (1,257) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HD3 | 7 | 0.61 |
| (1,252) | 1:A:32:LYS:HD2 | 1:A:33:LYS:H | 10 | 0.61 |
| (1,252) | 1:A:32:LYS:HD3 | 1:A:33:LYS:H | 10 | 0.61 |
| (1,247) | 1:A:30:LYS:HG2 | 1:A:31:GLY:H | 1 | 0.61 |
| (1,247) | 1:A:30:LYS:HG3 | 1:A:31:GLY:H | 1 | 0.61 |
| (1,235) | 1:A:14:MET:HG2 | 1:A:15:ASP:H | 4 | 0.61 |
| (1,235) | 1:A:14:MET:HG3 | 1:A:15:ASP:H | 4 | 0.61 |
| (1,186) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:37:LYS:H | 4 | 0.61 |
| (1,180) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:34:ASN:H | 5 | 0.61 |
| (1,178) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:36:TRP:H | 2 | 0.61 |
| (1,176) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:36:TRP:H | 12 | 0.61 |
| (1,164) | 1:A:10:TYR:HB3 | 1:A:11:SER:H | 9 | 0.61 |
| (1,85) | 1:A:18:HIS:HA | 1:A:22:PHE:H | 13 | 0.6 |
| (1,8) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:10:TYR:HB2 | 5 | 0.6 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,8) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:10:TYR:HB2 | 13 | 0.6 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:25:TRP:H | 11 | 0.6 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:25:TRP:H | 11 | 0.6 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:25:TRP:H | 11 | 0.6 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:25:TRP:H | 13 | 0.6 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:25:TRP:H | 13 | 0.6 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:25:TRP:H | 13 | 0.6 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG21 | 11 | 0.6 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG22 | 11 | 0.6 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG23 | 11 | 0.6 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG21 | 11 | 0.6 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG22 | 11 | 0.6 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG23 | 11 | 0.6 |
| (1,326) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:HD1 | 2 | 0.6 |
| (1,326) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:HD2 | 2 | 0.6 |
| (1,311) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:11:SER:HB2 | 12 | 0.6 |
| (1,311) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:11:SER:HB2 | 12 | 0.6 |
| (1,254) | 1:A:33:LYS:HG2 | 1:A:34:ASN:H | 8 | 0.6 |
| (1,254) | 1:A:33:LYS:HG3 | 1:A:34:ASN:H | 8 | 0.6 |
| (1,249) | 1:A:37:LYS:HD2 | 1:A:38:HIS:H | 12 | 0.6 |
| (1,249) | 1:A:37:LYS:HD3 | 1:A:38:HIS:H | 12 | 0.6 |
| (1,187) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:38:HIS:H | 13 | 0.6 |
| (1,180) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:34:ASN:H | 1 | 0.6 |
| (1,180) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:34:ASN:H | 14 | 0.6 |
| (1,176) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:36:TRP:H | 8 | 0.6 |
| (1,168) | 1:A:4:GLY:H | 1:A:5:THR:H | 1 | 0.6 |
| (1,164) | 1:A:10:TYR:HB3 | 1:A:11:SER:H | 5 | 0.6 |
| (1,53) | 1:A:32:LYS:HB2 | 1:A:33:LYS:H | 10 | 0.59 |
| (1,479) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HD11 | 14 | 0.59 |
| (1,479) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HD12 | 14 | 0.59 |
| (1,479) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HD13 | 14 | 0.59 |
| (1,345) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:8:SER:H | 1 | 0.59 |
| (1,345) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:8:SER:H | 1 | 0.59 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:6:PHE:HB2 | 14 | 0.59 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:6:PHE:HB3 | 14 | 0.59 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 14 | 0.59 |
| (1,309) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:6:PHE:HB3 | 14 | 0.59 |
| (1,290) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:25:TRP:HD1 | 1 | 0.59 |
| (1,233) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HG13 | 2 | 0.59 |
| (1,179) | 1:A:25:TRP:H | 1:A:26:LEU:H | 7 | 0.59 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:5:THR:HG21 | 5 | 0.58 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:5:THR:HG22 | 5 | 0.58 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:5:THR:HG23 | 5 | 0.58 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:5:THR:HG21 | 5 | 0.58 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:5:THR:HG22 | 5 | 0.58 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:5:THR:HG23 | 5 | 0.58 |
| (1,51) | 1:A:30:LYS:HB2 | 1:A:31:GLY:H | 9 | 0.58 |
| (1,51) | 1:A:30:LYS:HB3 | 1:A:31:GLY:H | 9 | 0.58 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:25:TRP:H | 4 | 0.58 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:25:TRP:H | 4 | 0.58 |
| (1,489) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:25:TRP:H | 4 | 0.58 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD21 | 12 | 0.58 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD22 | 12 | 0.58 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD23 | 12 | 0.58 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD11 | 3 | 0.58 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD12 | 3 | 0.58 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD13 | 3 | 0.58 |
| (1,321) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:7:ILE:HG12 | 8 | 0.58 |
| (1,321) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:7:ILE:HG12 | 8 | 0.58 |
| (1,291) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:25:TRP:HE3 | 2 | 0.58 |
| (1,247) | 1:A:30:LYS:HG2 | 1:A:31:GLY:H | 2 | 0.58 |
| (1,247) | 1:A:30:LYS:HG3 | 1:A:31:GLY:H | 2 | 0.58 |
| (1,246) | 1:A:33:LYS:HD2 | 1:A:34:ASN:H | 7 | 0.58 |
| (1,246) | 1:A:33:LYS:HD3 | 1:A:34:ASN:H | 7 | 0.58 |
| (1,246) | 1:A:33:LYS:HD2 | 1:A:34:ASN:H | 13 | 0.58 |
| (1,246) | 1:A:33:LYS:HD3 | 1:A:34:ASN:H | 13 | 0.58 |
| (1,180) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:34:ASN:H | 6 | 0.58 |
| (2,5) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:12:ILE:HA | 3 | 0.57 |
| (2,5) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:12:ILE:HA | 3 | 0.57 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG21 | 2 | 0.57 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG22 | 2 | 0.57 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG23 | 2 | 0.57 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG21 | 1:A:6:PHE:H | 11 | 0.57 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG22 | 1:A:6:PHE:H | 11 | 0.57 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG23 | 1:A:6:PHE:H | 11 | 0.57 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG21 | 1:A:6:PHE:H | 12 | 0.57 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG22 | 1:A:6:PHE:H | 12 | 0.57 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG23 | 1:A:6:PHE:H | 12 | 0.57 |
| (1,343) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:36:TRP:HD1 | 15 | 0.57 |
| (1,326) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:HD1 | 5 | 0.57 |
| (1,326) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:HD2 | 5 | 0.57 |
| (1,318) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HG | 14 | 0.57 |
| (1,276) | 1:A:36:TRP:HA | 1:A:36:TRP:HE3 | 2 | 0.57 |
| (1,217) | 1:A:1:TYR:HA | 1:A:3:GLU:H | 5 | 0.57 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,217) | 1:A:1:TYR:HA | 1:A:3:GLU:H | 10 | 0.57 |
| (1,200) | 1:A:14:MET:H | 1:A:15:ASP:H | 1 | 0.57 |
| (1,196) | 1:A:28:ALA:H | 1:A:29:GLN:H | 15 | 0.57 |
| (1,180) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:34:ASN:H | 11 | 0.57 |
| (1,178) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:36:TRP:H | 6 | 0.57 |
| (1,176) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:36:TRP:H | 4 | 0.57 |
| (1,168) | 1:A:4:GLY:H | 1:A:5:THR:H | 14 | 0.57 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HG2 | 5 | 0.56 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HG3 | 5 | 0.56 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HG2 | 5 | 0.56 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HG3 | 5 | 0.56 |
| (1,80) | 1:A:16:LYS:HA | 1:A:19:GLN:H | 12 | 0.56 |
| (1,53) | 1:A:32:LYS:HB2 | 1:A:33:LYS:H | 14 | 0.56 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG21 | 15 | 0.56 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG22 | 15 | 0.56 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG23 | 15 | 0.56 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG21 | 15 | 0.56 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG22 | 15 | 0.56 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG23 | 15 | 0.56 |
| (1,321) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:7:ILE:HG12 | 9 | 0.56 |
| (1,321) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:7:ILE:HG12 | 9 | 0.56 |
| (1,318) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HG | 5 | 0.56 |
| (1,215) | 1:A:36:TRP:H | 1:A:38:HIS:H | 13 | 0.56 |
| (1,206) | 1:A:7:ILE:HB | 1:A:9:ASP:H | 9 | 0.56 |
| (1,204) | 1:A:29:GLN:HB2 | 1:A:31:GLY:H | 12 | 0.56 |
| (1,204) | 1:A:29:GLN:HB3 | 1:A:31:GLY:H | 12 | 0.56 |
| (1,188) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:31:GLY:H | 6 | 0.56 |
| (1,181) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:35:ASP:H | 6 | 0.56 |
| (1,179) | 1:A:25:TRP:H | 1:A:26:LEU:H | 1 | 0.56 |
| (1,178) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:36:TRP:H | 14 | 0.56 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG21 | 1:A:10:TYR:HD1 | 9 | 0.55 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG21 | 1:A:10:TYR:HD2 | 9 | 0.55 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG22 | 1:A:10:TYR:HD1 | 9 | 0.55 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG22 | 1:A:10:TYR:HD2 | 9 | 0.55 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG23 | 1:A:10:TYR:HD1 | 9 | 0.55 |
| (2,37) | 1:A:7:ILE:HG23 | 1:A:10:TYR:HD2 | 9 | 0.55 |
| (1,53) | 1:A:32:LYS:HB2 | 1:A:33:LYS:H | 5 | 0.55 |
| (1,51) | 1:A:30:LYS:HB2 | 1:A:31:GLY:H | 5 | 0.55 |
| (1,51) | 1:A:30:LYS:HB3 | 1:A:31:GLY:H | 5 | 0.55 |
| (1,468) | 1:A:13:ALA:HB1 | 1:A:17:ILE:HG21 | 14 | 0.55 |
| (1,468) | 1:A:13:ALA:HB1 | 1:A:17:ILE:HG22 | 14 | 0.55 |
| (1,468) | 1:A:13:ALA:HB1 | 1:A:17:ILE:HG23 | 14 | 0.55 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,468) | 1:A:13:ALA:HB2 | 1:A:17:ILE:HG21 | 14 | 0.55 |
| (1,468) | 1:A:13:ALA:HB2 | 1:A:17:ILE:HG22 | 14 | 0.55 |
| (1,468) | 1:A:13:ALA:HB2 | 1:A:17:ILE:HG23 | 14 | 0.55 |
| (1,468) | 1:A:13:ALA:HB3 | 1:A:17:ILE:HG21 | 14 | 0.55 |
| (1,468) | 1:A:13:ALA:HB3 | 1:A:17:ILE:HG22 | 14 | 0.55 |
| (1,468) | 1:A:13:ALA:HB3 | 1:A:17:ILE:HG23 | 14 | 0.55 |
| (1,265) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:H | 14 | 0.55 |
| (1,257) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HD2 | 8 | 0.55 |
| (1,257) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HD3 | 8 | 0.55 |
| (1,254) | 1:A:33:LYS:HG2 | 1:A:34:ASN:H | 13 | 0.55 |
| (1,254) | 1:A:33:LYS:HG3 | 1:A:34:ASN:H | 13 | 0.55 |
| (1,237) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HD2 | 10 | 0.55 |
| (1,237) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HD3 | 10 | 0.55 |
| (1,217) | 1:A:1:TYR:HA | 1:A:3:GLU:H | 7 | 0.55 |
| (1,217) | 1:A:1:TYR:HA | 1:A:3:GLU:H | 14 | 0.55 |
| (1,202) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:25:TRP:H | 2 | 0.55 |
| (1,189) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:33:LYS:H | 1 | 0.55 |
| (1,181) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:35:ASP:H | 7 | 0.55 |
| (1,179) | 1:A:25:TRP:H | 1:A:26:LEU:H | 10 | 0.55 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG21 | 12 | 0.54 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG22 | 12 | 0.54 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG23 | 12 | 0.54 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG21 | 12 | 0.54 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG22 | 12 | 0.54 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG23 | 12 | 0.54 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG21 | 1:A:6:PHE:H | 7 | 0.54 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG22 | 1:A:6:PHE:H | 7 | 0.54 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG23 | 1:A:6:PHE:H | 7 | 0.54 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG21 | 1:A:6:PHE:H | 8 | 0.54 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG22 | 1:A:6:PHE:H | 8 | 0.54 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG23 | 1:A:6:PHE:H | 8 | 0.54 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:20:GLN:HB2 | 11 | 0.54 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:20:GLN:HB3 | 11 | 0.54 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HB2 | 11 | 0.54 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HB3 | 11 | 0.54 |
| (1,326) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:HD1 | 3 | 0.54 |
| (1,326) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:HD2 | 3 | 0.54 |
| (1,244) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HD2 | 3 | 0.54 |
| (1,244) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HD3 | 3 | 0.54 |
| (1,206) | 1:A:7:ILE:HB | 1:A:9:ASP:H | 5 | 0.54 |
| (1,193) | 1:A:13:ALA:H | 1:A:14:MET:H | 3 | 0.54 |
| (1,193) | 1:A:13:ALA:H | 1:A:14:MET:H | 13 | 0.54 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,181) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:35:ASP:H | 9 | 0.54 |
| (1,178) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:36:TRP:H | 8 | 0.54 |
| (1,178) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:36:TRP:H | 12 | 0.54 |
| (1,169) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:H | 3 | 0.54 |
| (1,137) | 1:A:38:HIS:HA | 1:A:40:ILE:H | 1 | 0.54 |
| (1,82) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:35:ASP:H | 10 | 0.53 |
| (1,80) | 1:A:16:LYS:HA | 1:A:19:GLN:H | 9 | 0.53 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG21 | 12 | 0.53 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG22 | 12 | 0.53 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG23 | 12 | 0.53 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG21 | 12 | 0.53 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG22 | 12 | 0.53 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG23 | 12 | 0.53 |
| (1,376) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HE22 | 13 | 0.53 |
| (1,376) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HE21 | 13 | 0.53 |
| (1,326) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:HD1 | 4 | 0.53 |
| (1,326) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:HD2 | 4 | 0.53 |
| (1,290) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:25:TRP:HD1 | 7 | 0.53 |
| (1,202) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:25:TRP:H | 12 | 0.53 |
| (1,200) | 1:A:14:MET:H | 1:A:15:ASP:H | 3 | 0.53 |
| (1,200) | 1:A:14:MET:H | 1:A:15:ASP:H | 6 | 0.53 |
| (1,197) | 1:A:8:SER:H | 1:A:9:ASP:H | 14 | 0.53 |
| (1,193) | 1:A:13:ALA:H | 1:A:14:MET:H | 5 | 0.53 |
| (1,179) | 1:A:25:TRP:H | 1:A:26:LEU:H | 9 | 0.53 |
| (1,176) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:36:TRP:H | 11 | 0.53 |
| (1,129) | 1:A:31:GLY:HA2 | 1:A:32:LYS:H | 9 | 0.53 |
| (1,129) | 1:A:31:GLY:HA3 | 1:A:32:LYS:H | 9 | 0.53 |
| (1,53) | 1:A:32:LYS:HB2 | 1:A:33:LYS:H | 3 | 0.52 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG21 | 4 | 0.52 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG22 | 4 | 0.52 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG23 | 4 | 0.52 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD21 | 11 | 0.52 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD22 | 11 | 0.52 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HD23 | 11 | 0.52 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 11 | 0.52 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 11 | 0.52 |
| (1,446) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 11 | 0.52 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD11 | 1 | 0.52 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD12 | 1 | 0.52 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD13 | 1 | 0.52 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD11 | 5 | 0.52 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD12 | 5 | 0.52 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD13 | 5 | 0.52 |
| (1,311) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:11:SER:HB2 | 7 | 0.52 |
| (1,311) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:11:SER:HB2 | 7 | 0.52 |
| (1,257) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HD2 | 3 | 0.52 |
| (1,257) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HD3 | 3 | 0.52 |
| (1,257) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HD2 | 13 | 0.52 |
| (1,257) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HD3 | 13 | 0.52 |
| (1,197) | 1:A:8:SER:H | 1:A:9:ASP:H | 2 | 0.52 |
| (1,186) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:37:LYS:H | 5 | 0.52 |
| (1,180) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:34:ASN:H | 7 | 0.52 |
| (1,179) | 1:A:25:TRP:H | 1:A:26:LEU:H | 4 | 0.52 |
| (1,179) | 1:A:25:TRP:H | 1:A:26:LEU:H | 12 | 0.52 |
| (1,134) | 1:A:22:PHE:HB2 | 1:A:23:VAL:H | 8 | 0.52 |
| (1,134) | 1:A:22:PHE:HB3 | 1:A:23:VAL:H | 8 | 0.52 |
| (2,34) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:28:ALA:HB1 | 3 | 0.51 |
| (2,34) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:28:ALA:HB2 | 3 | 0.51 |
| (2,34) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:28:ALA:HB3 | 3 | 0.51 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE1 | 14 | 0.51 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE2 | 14 | 0.51 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HE3 | 14 | 0.51 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE1 | 14 | 0.51 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE2 | 14 | 0.51 |
| (2,22) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HE3 | 14 | 0.51 |
| (1,483) | 1:A:3:GLU:H | 1:A:5:THR:HG21 | 1 | 0.51 |
| (1,483) | 1:A:3:GLU:H | 1:A:5:THR:HG22 | 1 | 0.51 |
| (1,483) | 1:A:3:GLU:H | 1:A:5:THR:HG23 | 1 | 0.51 |
| (1,479) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HD11 | 2 | 0.51 |
| (1,479) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HD12 | 2 | 0.51 |
| (1,479) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HD13 | 2 | 0.51 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG21 | 1:A:6:PHE:H | 2 | 0.51 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG22 | 1:A:6:PHE:H | 2 | 0.51 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG23 | 1:A:6:PHE:H | 2 | 0.51 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG21 | 1:A:6:PHE:H | 13 | 0.51 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG22 | 1:A:6:PHE:H | 13 | 0.51 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG23 | 1:A:6:PHE:H | 13 | 0.51 |
| (1,326) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:HD1 | 8 | 0.51 |
| (1,326) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:HD2 | 8 | 0.51 |
| (1,318) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HG | 2 | 0.51 |
| (1,311) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:11:SER:HB2 | 6 | 0.51 |
| (1,311) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:11:SER:HB2 | 6 | 0.51 |
| (1,265) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:H | 1 | 0.51 |
| (1,223) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:36:TRP:H | 8 | 0.51 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,220) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:36:TRP:H | 14 | 0.51 |
| (1,200) | 1:A:14:MET:H | 1:A:15:ASP:H | 9 | 0.51 |
| (1,188) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:31:GLY:H | 11 | 0.51 |
| (1,187) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:38:HIS:H | 5 | 0.51 |
| (1,181) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:35:ASP:H | 2 | 0.51 |
| (1,179) | 1:A:25:TRP:H | 1:A:26:LEU:H | 2 | 0.51 |
| (1,178) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:36:TRP:H | 5 | 0.51 |
| (1,119) | 1:A:11:SER:HA | 1:A:14:MET:H | 7 | 0.51 |
| (1,117) | 1:A:11:SER:HB2 | 1:A:12:ILE:H | 10 | 0.51 |
| (2,34) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:28:ALA:HB1 | 10 | 0.5 |
| (2,34) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:28:ALA:HB2 | 10 | 0.5 |
| (2,34) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:28:ALA:HB3 | 10 | 0.5 |
| (2,34) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:28:ALA:HB1 | 15 | 0.5 |
| (2,34) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:28:ALA:HB2 | 15 | 0.5 |
| (2,34) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:28:ALA:HB3 | 15 | 0.5 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD11 | 4 | 0.5 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD12 | 4 | 0.5 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD13 | 4 | 0.5 |
| (1,416) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HD11 | 8 | 0.5 |
| (1,416) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HD12 | 8 | 0.5 |
| (1,416) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HD13 | 8 | 0.5 |
| (1,318) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HG | 12 | 0.5 |
| (1,257) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HD2 | 6 | 0.5 |
| (1,257) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HD3 | 6 | 0.5 |
| (1,244) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HD2 | 10 | 0.5 |
| (1,244) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HD3 | 10 | 0.5 |
| (1,235) | 1:A:14:MET:HG2 | 1:A:15:ASP:H | 11 | 0.5 |
| (1,235) | 1:A:14:MET:HG3 | 1:A:15:ASP:H | 11 | 0.5 |
| (1,220) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:36:TRP:H | 12 | 0.5 |
| (1,202) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:25:TRP:H | 1 | 0.5 |
| (1,202) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:25:TRP:H | 3 | 0.5 |
| (1,202) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:25:TRP:H | 11 | 0.5 |
| (1,180) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:34:ASN:H | 3 | 0.5 |
| (1,179) | 1:A:25:TRP:H | 1:A:26:LEU:H | 8 | 0.5 |
| (1,175) | 1:A:6:PHE:H | 1:A:7:ILE:H | 13 | 0.5 |
| (1,174) | 1:A:38:HIS:H | 1:A:39:ASN:H | 10 | 0.5 |
| (1,134) | 1:A:22:PHE:HB2 | 1:A:23:VAL:H | 12 | 0.5 |
| (1,134) | 1:A:22:PHE:HB3 | 1:A:23:VAL:H | 12 | 0.5 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:5:THR:HG21 | 6 | 0.49 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:5:THR:HG22 | 6 | 0.49 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:5:THR:HG23 | 6 | 0.49 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:5:THR:HG21 | 6 | 0.49 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:5:THR:HG22 | 6 | 0.49 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:5:THR:HG23 | 6 | 0.49 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG21 | 12 | 0.49 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG22 | 12 | 0.49 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG23 | 12 | 0.49 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG21 | 9 | 0.49 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG22 | 9 | 0.49 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG23 | 9 | 0.49 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG21 | 9 | 0.49 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG22 | 9 | 0.49 |
| (1,461) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG23 | 9 | 0.49 |
| (1,421) | 1:A:14:MET:HE1 | 1:A:15:ASP:H | 1 | 0.49 |
| (1,421) | 1:A:14:MET:HE2 | 1:A:15:ASP:H | 1 | 0.49 |
| (1,421) | 1:A:14:MET:HE3 | 1:A:15:ASP:H | 1 | 0.49 |
| (1,257) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HD2 | 2 | 0.49 |
| (1,257) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HD3 | 2 | 0.49 |
| (1,246) | 1:A:33:LYS:HD2 | 1:A:34:ASN:H | 8 | 0.49 |
| (1,246) | 1:A:33:LYS:HD3 | 1:A:34:ASN:H | 8 | 0.49 |
| (1,206) | 1:A:7:ILE:HB | 1:A:9:ASP:H | 7 | 0.49 |
| (1,186) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:37:LYS:H | 8 | 0.49 |
| (1,179) | 1:A:25:TRP:H | 1:A:26:LEU:H | 11 | 0.49 |
| (1,176) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:36:TRP:H | 7 | 0.49 |
| (1,172) | 1:A:4:GLY:H | 1:A:6:PHE:H | 8 | 0.49 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:6:PHE:HB2 | 4 | 0.48 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:6:PHE:HB3 | 4 | 0.48 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 4 | 0.48 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:6:PHE:HB3 | 4 | 0.48 |
| (1,486) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:26:LEU:HD21 | 15 | 0.48 |
| (1,486) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:26:LEU:HD22 | 15 | 0.48 |
| (1,486) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:26:LEU:HD23 | 15 | 0.48 |
| (1,486) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:26:LEU:HD11 | 15 | 0.48 |
| (1,486) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:26:LEU:HD12 | 15 | 0.48 |
| (1,486) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:26:LEU:HD13 | 15 | 0.48 |
| (1,326) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:HD1 | 7 | 0.48 |
| (1,326) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:PHE:HD2 | 7 | 0.48 |
| (1,318) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HG | 8 | 0.48 |
| (1,223) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:36:TRP:H | 13 | 0.48 |
| (1,206) | 1:A:7:ILE:HB | 1:A:9:ASP:H | 4 | 0.48 |
| (1,193) | 1:A:13:ALA:H | 1:A:14:MET:H | 15 | 0.48 |
| (1,191) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:17:ILE:H | 15 | 0.48 |
| (1,178) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:36:TRP:H | 9 | 0.48 |
| (1,175) | 1:A:6:PHE:H | 1:A:7:ILE:H | 11 | 0.48 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,169) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:H | 1 | 0.48 |
| (1,129) | 1:A:31:GLY:HA2 | 1:A:32:LYS:H | 8 | 0.48 |
| (1,129) | 1:A:31:GLY:HA3 | 1:A:32:LYS:H | 8 | 0.48 |
| (1,82) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:35:ASP:H | 2 | 0.47 |
| (1,71) | 1:A:37:LYS:HB2 | 1:A:38:HIS:H | 3 | 0.47 |
| (1,71) | 1:A:37:LYS:HB3 | 1:A:38:HIS:H | 3 | 0.47 |
| (1,71) | 1:A:37:LYS:HB2 | 1:A:38:HIS:H | 6 | 0.47 |
| (1,71) | 1:A:37:LYS:HB3 | 1:A:38:HIS:H | 6 | 0.47 |
| (1,53) | 1:A:32:LYS:HB2 | 1:A:33:LYS:H | 8 | 0.47 |
| (1,479) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HD11 | 8 | 0.47 |
| (1,479) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HD12 | 8 | 0.47 |
| (1,479) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HD13 | 8 | 0.47 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG21 | 8 | 0.47 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG22 | 8 | 0.47 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG23 | 8 | 0.47 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG21 | 11 | 0.47 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG22 | 11 | 0.47 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG23 | 11 | 0.47 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG21 | 12 | 0.47 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG22 | 12 | 0.47 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG23 | 12 | 0.47 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:20:GLN:HB2 | 12 | 0.47 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:20:GLN:HB3 | 12 | 0.47 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HB2 | 12 | 0.47 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HB3 | 12 | 0.47 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:20:GLN:HB2 | 13 | 0.47 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:20:GLN:HB3 | 13 | 0.47 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HB2 | 13 | 0.47 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HB3 | 13 | 0.47 |
| (1,335) | 1:A:17:ILE:HA | 1:A:18:HIS:HD2 | 4 | 0.47 |
| (1,291) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:25:TRP:HE3 | 8 | 0.47 |
| (1,251) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:40:ILE:HG12 | 12 | 0.47 |
| (1,251) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:40:ILE:HG13 | 12 | 0.47 |
| (1,244) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HD2 | 1 | 0.47 |
| (1,244) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HD3 | 1 | 0.47 |
| (1,206) | 1:A:7:ILE:HB | 1:A:9:ASP:H | 10 | 0.47 |
| (1,200) | 1:A:14:MET:H | 1:A:15:ASP:H | 7 | 0.47 |
| (1,200) | 1:A:14:MET:H | 1:A:15:ASP:H | 12 | 0.47 |
| (1,193) | 1:A:13:ALA:H | 1:A:14:MET:H | 9 | 0.47 |
| (1,179) | 1:A:25:TRP:H | 1:A:26:LEU:H | 3 | 0.47 |
| (1,175) | 1:A:6:PHE:H | 1:A:7:ILE:H | 2 | 0.47 |
| (1,175) | 1:A:6:PHE:H | 1:A:7:ILE:H | 3 | 0.47 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,175) | 1:A:6:PHE:H | 1:A:7:ILE:H | 12 | 0.47 |
| (1,175) | 1:A:6:PHE:H | 1:A:7:ILE:H | 14 | 0.47 |
| (1,169) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:H | 4 | 0.47 |
| (2,13) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HG | 2 | 0.46 |
| (2,13) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HG | 2 | 0.46 |
| (1,80) | 1:A:16:LYS:HA | 1:A:19:GLN:H | 7 | 0.46 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD11 | 14 | 0.46 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD12 | 14 | 0.46 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD13 | 14 | 0.46 |
| (1,435) | 1:A:41:THR:H | 1:A:41:THR:HG21 | 12 | 0.46 |
| (1,435) | 1:A:41:THR:H | 1:A:41:THR:HG22 | 12 | 0.46 |
| (1,435) | 1:A:41:THR:H | 1:A:41:THR:HG23 | 12 | 0.46 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG21 | 10 | 0.46 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG22 | 10 | 0.46 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG23 | 10 | 0.46 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG21 | 13 | 0.46 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG22 | 13 | 0.46 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG23 | 13 | 0.46 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG21 | 7 | 0.46 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG22 | 7 | 0.46 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG23 | 7 | 0.46 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:20:GLN:HB2 | 6 | 0.46 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:20:GLN:HB3 | 6 | 0.46 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HB2 | 6 | 0.46 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HB3 | 6 | 0.46 |
| (1,341) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:H | 6 | 0.46 |
| (1,311) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:11:SER:HB2 | 5 | 0.46 |
| (1,311) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:11:SER:HB2 | 5 | 0.46 |
| (1,233) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HG13 | 1 | 0.46 |
| (1,218) | 1:A:29:GLN:HA | 1:A:31:GLY:H | 1 | 0.46 |
| (1,203) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HB | 10 | 0.46 |
| (1,202) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:25:TRP:H | 6 | 0.46 |
| (1,183) | 1:A:9:ASP:H | 1:A:10:TYR:H | 9 | 0.46 |
| (1,179) | 1:A:25:TRP:H | 1:A:26:LEU:H | 6 | 0.46 |
| (1,174) | 1:A:38:HIS:H | 1:A:39:ASN:H | 13 | 0.46 |
| (1,169) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:H | 2 | 0.46 |
| (1,150) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:42:GLN:HB2 | 8 | 0.46 |
| (1,134) | 1:A:22:PHE:HB2 | 1:A:23:VAL:H | 7 | 0.46 |
| (1,134) | 1:A:22:PHE:HB3 | 1:A:23:VAL:H | 7 | 0.46 |
| (1,7) | 1:A:6:PHE:HB2 | 1:A:7:ILE:H | 10 | 0.45 |
| (1,7) | 1:A:6:PHE:HB3 | 1:A:7:ILE:H | 10 | 0.45 |
| (1,58) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HB2 | 15 | 0.45 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HD21 | 12 | 0.45 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HD22 | 12 | 0.45 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HD23 | 12 | 0.45 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HD21 | 12 | 0.45 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HD22 | 12 | 0.45 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HD23 | 12 | 0.45 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HD21 | 12 | 0.45 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HD22 | 12 | 0.45 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HD23 | 12 | 0.45 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HD11 | 12 | 0.45 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HD12 | 12 | 0.45 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HD13 | 12 | 0.45 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HD11 | 12 | 0.45 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HD12 | 12 | 0.45 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HD13 | 12 | 0.45 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HD11 | 12 | 0.45 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HD12 | 12 | 0.45 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HD13 | 12 | 0.45 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG21 | 5 | 0.45 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG22 | 5 | 0.45 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG23 | 5 | 0.45 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG21 | 5 | 0.45 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG22 | 5 | 0.45 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG23 | 5 | 0.45 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG21 | 14 | 0.45 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG22 | 14 | 0.45 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG23 | 14 | 0.45 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG21 | 3 | 0.45 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG22 | 3 | 0.45 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG23 | 3 | 0.45 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG21 | 4 | 0.45 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG22 | 4 | 0.45 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG23 | 4 | 0.45 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG21 | 5 | 0.45 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG22 | 5 | 0.45 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG23 | 5 | 0.45 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG21 | 6 | 0.45 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG22 | 6 | 0.45 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG23 | 6 | 0.45 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG21 | 11 | 0.45 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG22 | 11 | 0.45 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG23 | 11 | 0.45 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG21 | 13 | 0.45 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG22 | 13 | 0.45 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG23 | 13 | 0.45 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG21 | 15 | 0.45 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG22 | 15 | 0.45 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG23 | 15 | 0.45 |
| (1,311) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:11:SER:HB2 | 4 | 0.45 |
| (1,311) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:11:SER:HB2 | 4 | 0.45 |
| (1,243) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HG2 | 15 | 0.45 |
| (1,243) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:30:LYS:HG3 | 15 | 0.45 |
| (1,233) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HG13 | 14 | 0.45 |
| (1,223) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:36:TRP:H | 3 | 0.45 |
| (1,203) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HB | 12 | 0.45 |
| (1,202) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:25:TRP:H | 7 | 0.45 |
| (1,202) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:25:TRP:H | 9 | 0.45 |
| (1,202) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:25:TRP:H | 15 | 0.45 |
| (1,191) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:17:ILE:H | 9 | 0.45 |
| (1,181) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:35:ASP:H | 10 | 0.45 |
| (1,176) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:36:TRP:H | 9 | 0.45 |
| (1,169) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:H | 15 | 0.45 |
| (1,148) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:21:ASP:H | 2 | 0.45 |
| (1,148) | 1:A:20:GLN:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 2 | 0.45 |
| (1,134) | 1:A:22:PHE:HB2 | 1:A:23:VAL:H | 4 | 0.45 |
| (1,134) | 1:A:22:PHE:HB3 | 1:A:23:VAL:H | 4 | 0.45 |
| (1,129) | 1:A:31:GLY:HA2 | 1:A:32:LYS:H | 13 | 0.45 |
| (1,129) | 1:A:31:GLY:HA3 | 1:A:32:LYS:H | 13 | 0.45 |
| (1,124) | 1:A:28:ALA:HA | 1:A:31:GLY:H | 12 | 0.45 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:5:THR:HG21 | 15 | 0.44 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:5:THR:HG22 | 15 | 0.44 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:5:THR:HG23 | 15 | 0.44 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:5:THR:HG21 | 15 | 0.44 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:5:THR:HG22 | 15 | 0.44 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:5:THR:HG23 | 15 | 0.44 |
| (2,13) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HG | 10 | 0.44 |
| (2,13) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HG | 10 | 0.44 |
| (1,84) | 1:A:34:ASN:HA | 1:A:37:LYS:H | 10 | 0.44 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG21 | 2 | 0.44 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG22 | 2 | 0.44 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG23 | 2 | 0.44 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG21 | 10 | 0.44 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG22 | 10 | 0.44 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG23 | 10 | 0.44 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG21 | 12 | 0.44 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG22 | 12 | 0.44 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG23 | 12 | 0.44 |
| (1,409) | 1:A:2:ALA:HB1 | 1:A:3:GLU:H | 9 | 0.44 |
| (1,409) | 1:A:2:ALA:HB2 | 1:A:3:GLU:H | 9 | 0.44 |
| (1,409) | 1:A:2:ALA:HB3 | 1:A:3:GLU:H | 9 | 0.44 |
| (1,334) | 1:A:14:MET:HA | 1:A:18:HIS:HD2 | 10 | 0.44 |
| (1,290) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:25:TRP:HD1 | 13 | 0.44 |
| (1,277) | 1:A:36:TRP:HE3 | 1:A:37:LYS:HA | 14 | 0.44 |
| (1,213) | 1:A:8:SER:H | 1:A:10:TYR:H | 5 | 0.44 |
| (1,206) | 1:A:7:ILE:HB | 1:A:9:ASP:H | 12 | 0.44 |
| (1,202) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:25:TRP:H | 10 | 0.44 |
| (1,189) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:33:LYS:H | 4 | 0.44 |
| (1,187) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:38:HIS:H | 4 | 0.44 |
| (1,187) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:38:HIS:H | 14 | 0.44 |
| (1,186) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:37:LYS:H | 6 | 0.44 |
| (1,169) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:H | 5 | 0.44 |
| (1,169) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:H | 11 | 0.44 |
| (1,169) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:H | 12 | 0.44 |
| (1,150) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:42:GLN:HB2 | 1 | 0.44 |
| (1,134) | 1:A:22:PHE:HB2 | 1:A:23:VAL:H | 1 | 0.44 |
| (1,134) | 1:A:22:PHE:HB3 | 1:A:23:VAL:H | 1 | 0.44 |
| (1,134) | 1:A:22:PHE:HB2 | 1:A:23:VAL:H | 3 | 0.44 |
| (1,134) | 1:A:22:PHE:HB3 | 1:A:23:VAL:H | 3 | 0.44 |
| (1,129) | 1:A:31:GLY:HA2 | 1:A:32:LYS:H | 2 | 0.44 |
| (1,129) | 1:A:31:GLY:HA3 | 1:A:32:LYS:H | 2 | 0.44 |
| (2,34) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:28:ALA:HB1 | 9 | 0.43 |
| (2,34) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:28:ALA:HB2 | 9 | 0.43 |
| (2,34) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:28:ALA:HB3 | 9 | 0.43 |
| (2,34) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:28:ALA:HB1 | 14 | 0.43 |
| (2,34) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:28:ALA:HB2 | 14 | 0.43 |
| (2,34) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:28:ALA:HB3 | 14 | 0.43 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:5:THR:HG21 | 10 | 0.43 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:5:THR:HG22 | 10 | 0.43 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:5:THR:HG23 | 10 | 0.43 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:5:THR:HG21 | 10 | 0.43 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:5:THR:HG22 | 10 | 0.43 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:5:THR:HG23 | 10 | 0.43 |
| (1,84) | 1:A:34:ASN:HA | 1:A:37:LYS:H | 7 | 0.43 |
| (1,434) | 1:A:13:ALA:HB1 | 1:A:14:MET:H | 7 | 0.43 |
| (1,434) | 1:A:13:ALA:HB2 | 1:A:14:MET:H | 7 | 0.43 |
| (1,434) | 1:A:13:ALA:HB3 | 1:A:14:MET:H | 7 | 0.43 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,434) | 1:A:13:ALA:HB1 | 1:A:14:MET:H | 12 | 0.43 |
| (1,434) | 1:A:13:ALA:HB2 | 1:A:14:MET:H | 12 | 0.43 |
| (1,434) | 1:A:13:ALA:HB3 | 1:A:14:MET:H | 12 | 0.43 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG21 | 2 | 0.43 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG22 | 2 | 0.43 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG23 | 2 | 0.43 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG21 | 3 | 0.43 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG22 | 3 | 0.43 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG23 | 3 | 0.43 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG21 | 5 | 0.43 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG22 | 5 | 0.43 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG23 | 5 | 0.43 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG21 | 6 | 0.43 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG22 | 6 | 0.43 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG23 | 6 | 0.43 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG21 | 7 | 0.43 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG22 | 7 | 0.43 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG23 | 7 | 0.43 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG21 | 9 | 0.43 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG22 | 9 | 0.43 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG23 | 9 | 0.43 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG21 | 15 | 0.43 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG22 | 15 | 0.43 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG23 | 15 | 0.43 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG21 | 14 | 0.43 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG22 | 14 | 0.43 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG23 | 14 | 0.43 |
| (1,348) | 1:A:36:TRP:HD1 | 1:A:37:LYS:H | 11 | 0.43 |
| (1,318) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HG | 9 | 0.43 |
| (1,291) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:25:TRP:HE3 | 1 | 0.43 |
| (1,291) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:25:TRP:HE3 | 4 | 0.43 |
| (1,259) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:31:GLY:H | 4 | 0.43 |
| (1,259) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:31:GLY:H | 4 | 0.43 |
| (1,219) | 1:A:30:LYS:HA | 1:A:32:LYS:H | 1 | 0.43 |
| (1,217) | 1:A:1:TYR:HA | 1:A:3:GLU:H | 12 | 0.43 |
| (1,196) | 1:A:28:ALA:H | 1:A:29:GLN:H | 13 | 0.43 |
| (1,189) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:33:LYS:H | 3 | 0.43 |
| (1,180) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:34:ASN:H | 4 | 0.43 |
| (1,175) | 1:A:6:PHE:H | 1:A:7:ILE:H | 15 | 0.43 |
| (2,34) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:28:ALA:HB1 | 7 | 0.42 |
| (2,34) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:28:ALA:HB2 | 7 | 0.42 |
| (2,34) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:28:ALA:HB3 | 7 | 0.42 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,53) | 1:A:32:LYS:HB2 | 1:A:33:LYS:H | 11 | 0.42 |
| (1,53) | 1:A:32:LYS:HB2 | 1:A:33:LYS:H | 13 | 0.42 |
| (1,47) | 1:A:30:LYS:HA | 1:A:31:GLY:H | 12 | 0.42 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG21 | 6 | 0.42 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG22 | 6 | 0.42 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG23 | 6 | 0.42 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG21 | 6 | 0.42 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG22 | 6 | 0.42 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG23 | 6 | 0.42 |
| (1,435) | 1:A:41:THR:H | 1:A:41:THR:HG21 | 13 | 0.42 |
| (1,435) | 1:A:41:THR:H | 1:A:41:THR:HG22 | 13 | 0.42 |
| (1,435) | 1:A:41:THR:H | 1:A:41:THR:HG23 | 13 | 0.42 |
| (1,428) | 1:A:28:ALA:HB1 | 1:A:29:GLN:H | 11 | 0.42 |
| (1,428) | 1:A:28:ALA:HB2 | 1:A:29:GLN:H | 11 | 0.42 |
| (1,428) | 1:A:28:ALA:HB3 | 1:A:29:GLN:H | 11 | 0.42 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG21 | 1 | 0.42 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG22 | 1 | 0.42 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG23 | 1 | 0.42 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG21 | 4 | 0.42 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG22 | 4 | 0.42 |
| (1,422) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HG23 | 4 | 0.42 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG21 | 1:A:6:PHE:H | 15 | 0.42 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG22 | 1:A:6:PHE:H | 15 | 0.42 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG23 | 1:A:6:PHE:H | 15 | 0.42 |
| (1,409) | 1:A:2:ALA:HB1 | 1:A:3:GLU:H | 1 | 0.42 |
| (1,409) | 1:A:2:ALA:HB2 | 1:A:3:GLU:H | 1 | 0.42 |
| (1,409) | 1:A:2:ALA:HB3 | 1:A:3:GLU:H | 1 | 0.42 |
| (1,335) | 1:A:17:ILE:HA | 1:A:18:HIS:HD2 | 2 | 0.42 |
| (1,334) | 1:A:14:MET:HA | 1:A:18:HIS:HD2 | 5 | 0.42 |
| (1,318) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HG | 7 | 0.42 |
| (1,265) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:H | 5 | 0.42 |
| (1,220) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:36:TRP:H | 6 | 0.42 |
| (1,218) | 1:A:29:GLN:HA | 1:A:31:GLY:H | 12 | 0.42 |
| (1,202) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:25:TRP:H | 5 | 0.42 |
| (1,189) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:33:LYS:H | 6 | 0.42 |
| (1,189) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:33:LYS:H | 7 | 0.42 |
| (1,186) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:37:LYS:H | 11 | 0.42 |
| (1,181) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:35:ASP:H | 1 | 0.42 |
| (1,176) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:36:TRP:H | 13 | 0.42 |
| (1,175) | 1:A:6:PHE:H | 1:A:7:ILE:H | 5 | 0.42 |
| (1,175) | 1:A:6:PHE:H | 1:A:7:ILE:H | 6 | 0.42 |
| (1,139) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:42:GLN:HB3 | 1 | 0.42 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,134) | 1:A:22:PHE:HB2 | 1:A:23:VAL:H | 5 | 0.42 |
| (1,134) | 1:A:22:PHE:HB3 | 1:A:23:VAL:H | 5 | 0.42 |
| (1,134) | 1:A:22:PHE:HB2 | 1:A:23:VAL:H | 11 | 0.42 |
| (1,134) | 1:A:22:PHE:HB3 | 1:A:23:VAL:H | 11 | 0.42 |
| (1,134) | 1:A:22:PHE:HB2 | 1:A:23:VAL:H | 13 | 0.42 |
| (1,134) | 1:A:22:PHE:HB3 | 1:A:23:VAL:H | 13 | 0.42 |
| (1,134) | 1:A:22:PHE:HB2 | 1:A:23:VAL:H | 14 | 0.42 |
| (1,134) | 1:A:22:PHE:HB3 | 1:A:23:VAL:H | 14 | 0.42 |
| (1,134) | 1:A:22:PHE:HB2 | 1:A:23:VAL:H | 15 | 0.42 |
| (1,134) | 1:A:22:PHE:HB3 | 1:A:23:VAL:H | 15 | 0.42 |
| (1,129) | 1:A:31:GLY:HA2 | 1:A:32:LYS:H | 4 | 0.42 |
| (1,129) | 1:A:31:GLY:HA3 | 1:A:32:LYS:H | 4 | 0.42 |
| (1,119) | 1:A:11:SER:HA | 1:A:14:MET:H | 12 | 0.42 |
| (2,5) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:12:ILE:HA | 2 | 0.41 |
| (2,5) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:12:ILE:HA | 2 | 0.41 |
| (2,34) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:28:ALA:HB1 | 5 | 0.41 |
| (2,34) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:28:ALA:HB2 | 5 | 0.41 |
| (2,34) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:28:ALA:HB3 | 5 | 0.41 |
| (1,53) | 1:A:32:LYS:HB2 | 1:A:33:LYS:H | 12 | 0.41 |
| (1,435) | 1:A:41:THR:H | 1:A:41:THR:HG21 | 10 | 0.41 |
| (1,435) | 1:A:41:THR:H | 1:A:41:THR:HG22 | 10 | 0.41 |
| (1,435) | 1:A:41:THR:H | 1:A:41:THR:HG23 | 10 | 0.41 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG21 | 8 | 0.41 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG22 | 8 | 0.41 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG23 | 8 | 0.41 |
| (1,409) | 1:A:2:ALA:HB1 | 1:A:3:GLU:H | 6 | 0.41 |
| (1,409) | 1:A:2:ALA:HB2 | 1:A:3:GLU:H | 6 | 0.41 |
| (1,409) | 1:A:2:ALA:HB3 | 1:A:3:GLU:H | 6 | 0.41 |
| (1,409) | 1:A:2:ALA:HB1 | 1:A:3:GLU:H | 15 | 0.41 |
| (1,409) | 1:A:2:ALA:HB2 | 1:A:3:GLU:H | 15 | 0.41 |
| (1,409) | 1:A:2:ALA:HB3 | 1:A:3:GLU:H | 15 | 0.41 |
| (1,335) | 1:A:17:ILE:HA | 1:A:18:HIS:HD2 | 9 | 0.41 |
| (1,335) | 1:A:17:ILE:HA | 1:A:18:HIS:HD2 | 14 | 0.41 |
| (1,311) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:11:SER:HB2 | 15 | 0.41 |
| (1,311) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:11:SER:HB2 | 15 | 0.41 |
| (1,246) | 1:A:33:LYS:HD2 | 1:A:34:ASN:H | 9 | 0.41 |
| (1,246) | 1:A:33:LYS:HD3 | 1:A:34:ASN:H | 9 | 0.41 |
| (1,234) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HG2 | 4 | 0.41 |
| (1,234) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HG3 | 4 | 0.41 |
| (1,189) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:33:LYS:H | 8 | 0.41 |
| (1,189) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:33:LYS:H | 9 | 0.41 |
| (1,188) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:31:GLY:H | 9 | 0.41 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,188) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:31:GLY:H | 13 | 0.41 |
| (1,186) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:37:LYS:H | 7 | 0.41 |
| (1,181) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:35:ASP:H | 14 | 0.41 |
| (1,165) | 1:A:9:ASP:HB2 | 1:A:11:SER:H | 5 | 0.41 |
| (1,165) | 1:A:9:ASP:HB3 | 1:A:11:SER:H | 5 | 0.41 |
| (1,148) | 1:A:20:GLN:HB2 | 1:A:21:ASP:H | 7 | 0.41 |
| (1,148) | 1:A:20:GLN:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 7 | 0.41 |
| (1,140) | 1:A:41:THR:H | 1:A:41:THR:HB | 1 | 0.41 |
| (1,134) | 1:A:22:PHE:HB2 | 1:A:23:VAL:H | 9 | 0.41 |
| (1,134) | 1:A:22:PHE:HB3 | 1:A:23:VAL:H | 9 | 0.41 |
| (1,129) | 1:A:31:GLY:HA2 | 1:A:32:LYS:H | 7 | 0.41 |
| (1,129) | 1:A:31:GLY:HA3 | 1:A:32:LYS:H | 7 | 0.41 |
| (2,5) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:12:ILE:HA | 15 | 0.4 |
| (2,5) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:12:ILE:HA | 15 | 0.4 |
| (2,34) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:28:ALA:HB1 | 1 | 0.4 |
| (2,34) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:28:ALA:HB2 | 1 | 0.4 |
| (2,34) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:28:ALA:HB3 | 1 | 0.4 |
| (1,77) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:40:ILE:HB | 5 | 0.4 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG21 | 7 | 0.4 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG22 | 7 | 0.4 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG23 | 7 | 0.4 |
| (1,47) | 1:A:30:LYS:HA | 1:A:31:GLY:H | 1 | 0.4 |
| (1,435) | 1:A:41:THR:H | 1:A:41:THR:HG21 | 6 | 0.4 |
| (1,435) | 1:A:41:THR:H | 1:A:41:THR:HG22 | 6 | 0.4 |
| (1,435) | 1:A:41:THR:H | 1:A:41:THR:HG23 | 6 | 0.4 |
| (1,434) | 1:A:13:ALA:HB1 | 1:A:14:MET:H | 2 | 0.4 |
| (1,434) | 1:A:13:ALA:HB2 | 1:A:14:MET:H | 2 | 0.4 |
| (1,434) | 1:A:13:ALA:HB3 | 1:A:14:MET:H | 2 | 0.4 |
| (1,434) | 1:A:13:ALA:HB1 | 1:A:14:MET:H | 4 | 0.4 |
| (1,434) | 1:A:13:ALA:HB2 | 1:A:14:MET:H | 4 | 0.4 |
| (1,434) | 1:A:13:ALA:HB3 | 1:A:14:MET:H | 4 | 0.4 |
| (1,434) | 1:A:13:ALA:HB1 | 1:A:14:MET:H | 11 | 0.4 |
| (1,434) | 1:A:13:ALA:HB2 | 1:A:14:MET:H | 11 | 0.4 |
| (1,434) | 1:A:13:ALA:HB3 | 1:A:14:MET:H | 11 | 0.4 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG21 | 9 | 0.4 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG22 | 9 | 0.4 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG23 | 9 | 0.4 |
| (1,409) | 1:A:2:ALA:HB1 | 1:A:3:GLU:H | 10 | 0.4 |
| (1,409) | 1:A:2:ALA:HB2 | 1:A:3:GLU:H | 10 | 0.4 |
| (1,409) | 1:A:2:ALA:HB3 | 1:A:3:GLU:H | 10 | 0.4 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:20:GLN:HB2 | 14 | 0.4 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:20:GLN:HB3 | 14 | 0.4 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HB2 | 14 | 0.4 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HB3 | 14 | 0.4 |
| (1,334) | 1:A:14:MET:HA | 1:A:18:HIS:HD2 | 4 | 0.4 |
| (1,254) | 1:A:33:LYS:HG2 | 1:A:34:ASN:H | 2 | 0.4 |
| (1,254) | 1:A:33:LYS:HG3 | 1:A:34:ASN:H | 2 | 0.4 |
| (1,220) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:36:TRP:H | 11 | 0.4 |
| (1,206) | 1:A:7:ILE:HB | 1:A:9:ASP:H | 11 | 0.4 |
| (1,202) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:25:TRP:H | 4 | 0.4 |
| (1,200) | 1:A:14:MET:H | 1:A:15:ASP:H | 13 | 0.4 |
| (1,198) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:H | 13 | 0.4 |
| (1,191) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:17:ILE:H | 4 | 0.4 |
| (1,190) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:18:HIS:H | 11 | 0.4 |
| (1,186) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:37:LYS:H | 9 | 0.4 |
| (1,181) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:35:ASP:H | 3 | 0.4 |
| (1,180) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:34:ASN:H | 13 | 0.4 |
| (1,178) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:36:TRP:H | 11 | 0.4 |
| (1,175) | 1:A:6:PHE:H | 1:A:7:ILE:H | 4 | 0.4 |
| (1,174) | 1:A:38:HIS:H | 1:A:39:ASN:H | 2 | 0.4 |
| (1,134) | 1:A:22:PHE:HB2 | 1:A:23:VAL:H | 2 | 0.4 |
| (1,134) | 1:A:22:PHE:HB3 | 1:A:23:VAL:H | 2 | 0.4 |
| (2,8) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:4:GLY:HA2 | 2 | 0.39 |
| (2,8) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:4:GLY:HA2 | 2 | 0.39 |
| (1,94) | 1:A:24:ASN:HB2 | 1:A:25:TRP:H | 15 | 0.39 |
| (1,82) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:35:ASP:H | 4 | 0.39 |
| (1,7) | 1:A:6:PHE:HB2 | 1:A:7:ILE:H | 15 | 0.39 |
| (1,7) | 1:A:6:PHE:HB3 | 1:A:7:ILE:H | 15 | 0.39 |
| (1,47) | 1:A:30:LYS:HA | 1:A:31:GLY:H | 10 | 0.39 |
| (1,435) | 1:A:41:THR:H | 1:A:41:THR:HG21 | 4 | 0.39 |
| (1,435) | 1:A:41:THR:H | 1:A:41:THR:HG22 | 4 | 0.39 |
| (1,435) | 1:A:41:THR:H | 1:A:41:THR:HG23 | 4 | 0.39 |
| (1,434) | 1:A:13:ALA:HB1 | 1:A:14:MET:H | 10 | 0.39 |
| (1,434) | 1:A:13:ALA:HB2 | 1:A:14:MET:H | 10 | 0.39 |
| (1,434) | 1:A:13:ALA:HB3 | 1:A:14:MET:H | 10 | 0.39 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG21 | 1 | 0.39 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG22 | 1 | 0.39 |
| (1,412) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HG23 | 1 | 0.39 |
| (1,409) | 1:A:2:ALA:HB1 | 1:A:3:GLU:H | 5 | 0.39 |
| (1,409) | 1:A:2:ALA:HB2 | 1:A:3:GLU:H | 5 | 0.39 |
| (1,409) | 1:A:2:ALA:HB3 | 1:A:3:GLU:H | 5 | 0.39 |
| (1,409) | 1:A:2:ALA:HB1 | 1:A:3:GLU:H | 14 | 0.39 |
| (1,409) | 1:A:2:ALA:HB2 | 1:A:3:GLU:H | 14 | 0.39 |
| (1,409) | 1:A:2:ALA:HB3 | 1:A:3:GLU:H | 14 | 0.39 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,335) | 1:A:17:ILE:HA | 1:A:18:HIS:HD2 | 10 | 0.39 |
| (1,325) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:18:HIS:HD2 | 2 | 0.39 |
| (1,325) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:18:HIS:HD2 | 2 | 0.39 |
| (1,236) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HG2 | 1 | 0.39 |
| (1,236) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HG3 | 1 | 0.39 |
| (1,236) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HG2 | 10 | 0.39 |
| (1,236) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HG3 | 10 | 0.39 |
| (1,236) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HG2 | 12 | 0.39 |
| (1,236) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HG3 | 12 | 0.39 |
| (1,223) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:36:TRP:H | 14 | 0.39 |
| (1,219) | 1:A:30:LYS:HA | 1:A:32:LYS:H | 12 | 0.39 |
| (1,215) | 1:A:36:TRP:H | 1:A:38:HIS:H | 9 | 0.39 |
| (1,203) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HB | 7 | 0.39 |
| (1,193) | 1:A:13:ALA:H | 1:A:14:MET:H | 14 | 0.39 |
| (1,134) | 1:A:22:PHE:HB2 | 1:A:23:VAL:H | 10 | 0.39 |
| (1,134) | 1:A:22:PHE:HB3 | 1:A:23:VAL:H | 10 | 0.39 |
| (1,129) | 1:A:31:GLY:HA2 | 1:A:32:LYS:H | 5 | 0.39 |
| (1,129) | 1:A:31:GLY:HA3 | 1:A:32:LYS:H | 5 | 0.39 |
| (1,129) | 1:A:31:GLY:HA2 | 1:A:32:LYS:H | 10 | 0.39 |
| (1,129) | 1:A:31:GLY:HA3 | 1:A:32:LYS:H | 10 | 0.39 |
| (2,8) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:4:GLY:HA2 | 13 | 0.38 |
| (2,8) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:4:GLY:HA2 | 13 | 0.38 |
| (1,53) | 1:A:32:LYS:HB2 | 1:A:33:LYS:H | 6 | 0.38 |
| (1,47) | 1:A:30:LYS:HA | 1:A:31:GLY:H | 4 | 0.38 |
| (1,47) | 1:A:30:LYS:HA | 1:A:31:GLY:H | 8 | 0.38 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD11 | 4 | 0.38 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD12 | 4 | 0.38 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD13 | 4 | 0.38 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD11 | 14 | 0.38 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD12 | 14 | 0.38 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD13 | 14 | 0.38 |
| (1,335) | 1:A:17:ILE:HA | 1:A:18:HIS:HD2 | 6 | 0.38 |
| (1,256) | 1:A:32:LYS:HG2 | 1:A:33:LYS:H | 15 | 0.38 |
| (1,256) | 1:A:32:LYS:HG3 | 1:A:33:LYS:H | 15 | 0.38 |
| (1,240) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG2 | 12 | 0.38 |
| (1,240) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG3 | 12 | 0.38 |
| (1,202) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:25:TRP:H | 14 | 0.38 |
| (1,200) | 1:A:14:MET:H | 1:A:15:ASP:H | 5 | 0.38 |
| (1,199) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:ALA:H | 9 | 0.38 |
| (1,198) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:H | 11 | 0.38 |
| (1,191) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:17:ILE:H | 12 | 0.38 |
| (1,187) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:38:HIS:H | 9 | 0.38 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,181) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:35:ASP:H | 4 | 0.38 |
| (1,170) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:20:GLN:H | 2 | 0.38 |
| (2,20) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:10:TYR:HD1 | 8 | 0.37 |
| (2,20) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:10:TYR:HD2 | 8 | 0.37 |
| (2,20) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:10:TYR:HD1 | 8 | 0.37 |
| (2,20) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:10:TYR:HD2 | 8 | 0.37 |
| (1,79) | 1:A:14:MET:HA | 1:A:17:ILE:H | 7 | 0.37 |
| (1,73) | 1:A:38:HIS:HB2 | 1:A:39:ASN:H | 9 | 0.37 |
| (1,73) | 1:A:38:HIS:HB3 | 1:A:39:ASN:H | 9 | 0.37 |
| (1,53) | 1:A:32:LYS:HB2 | 1:A:33:LYS:H | 4 | 0.37 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HD21 | 5 | 0.37 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HD22 | 5 | 0.37 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HD23 | 5 | 0.37 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HD21 | 5 | 0.37 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HD22 | 5 | 0.37 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HD23 | 5 | 0.37 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HD21 | 5 | 0.37 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HD22 | 5 | 0.37 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HD23 | 5 | 0.37 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HD11 | 5 | 0.37 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HD12 | 5 | 0.37 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HD13 | 5 | 0.37 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HD11 | 5 | 0.37 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HD12 | 5 | 0.37 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HD13 | 5 | 0.37 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HD11 | 5 | 0.37 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HD12 | 5 | 0.37 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HD13 | 5 | 0.37 |
| (1,47) | 1:A:30:LYS:HA | 1:A:31:GLY:H | 3 | 0.37 |
| (1,47) | 1:A:30:LYS:HA | 1:A:31:GLY:H | 6 | 0.37 |
| (1,47) | 1:A:30:LYS:HA | 1:A:31:GLY:H | 13 | 0.37 |
| (1,47) | 1:A:30:LYS:HA | 1:A:31:GLY:H | 15 | 0.37 |
| (1,428) | 1:A:28:ALA:HB1 | 1:A:29:GLN:H | 3 | 0.37 |
| (1,428) | 1:A:28:ALA:HB2 | 1:A:29:GLN:H | 3 | 0.37 |
| (1,428) | 1:A:28:ALA:HB3 | 1:A:29:GLN:H | 3 | 0.37 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD11 | 10 | 0.37 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD12 | 10 | 0.37 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD13 | 10 | 0.37 |
| (1,291) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:25:TRP:HE3 | 12 | 0.37 |
| (1,269) | 1:A:20:GLN:H | 1:A:20:GLN:HG2 | 8 | 0.37 |
| (1,269) | 1:A:20:GLN:H | 1:A:20:GLN:HG3 | 8 | 0.37 |
| (1,259) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:31:GLY:H | 10 | 0.37 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,259) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:31:GLY:H | 10 | 0.37 |
| (1,240) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG2 | 4 | 0.37 |
| (1,240) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG3 | 4 | 0.37 |
| (1,240) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG2 | 10 | 0.37 |
| (1,240) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG3 | 10 | 0.37 |
| (1,239) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:H | 6 | 0.37 |
| (1,239) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:H | 6 | 0.37 |
| (1,237) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HD2 | 13 | 0.37 |
| (1,237) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HD3 | 13 | 0.37 |
| (1,236) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HG2 | 9 | 0.37 |
| (1,236) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HG3 | 9 | 0.37 |
| (1,220) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:36:TRP:H | 4 | 0.37 |
| (1,206) | 1:A:7:ILE:HB | 1:A:9:ASP:H | 15 | 0.37 |
| (1,193) | 1:A:13:ALA:H | 1:A:14:MET:H | 8 | 0.37 |
| (1,189) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:33:LYS:H | 12 | 0.37 |
| (1,187) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:38:HIS:H | 11 | 0.37 |
| (1,181) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:35:ASP:H | 11 | 0.37 |
| (1,181) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:35:ASP:H | 13 | 0.37 |
| (1,181) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:35:ASP:H | 15 | 0.37 |
| (1,176) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:36:TRP:H | 10 | 0.37 |
| (1,175) | 1:A:6:PHE:H | 1:A:7:ILE:H | 7 | 0.37 |
| (2,13) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HG | 7 | 0.36 |
| (2,13) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HG | 7 | 0.36 |
| (1,66) | 1:A:35:ASP:HA | 1:A:36:TRP:H | 13 | 0.36 |
| (1,47) | 1:A:30:LYS:HA | 1:A:31:GLY:H | 2 | 0.36 |
| (1,47) | 1:A:30:LYS:HA | 1:A:31:GLY:H | 7 | 0.36 |
| (1,435) | 1:A:41:THR:H | 1:A:41:THR:HG21 | 14 | 0.36 |
| (1,435) | 1:A:41:THR:H | 1:A:41:THR:HG22 | 14 | 0.36 |
| (1,435) | 1:A:41:THR:H | 1:A:41:THR:HG23 | 14 | 0.36 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:28:ALA:H | 14 | 0.36 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:28:ALA:H | 14 | 0.36 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:28:ALA:H | 14 | 0.36 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD11 | 6 | 0.36 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD12 | 6 | 0.36 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD13 | 6 | 0.36 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD11 | 15 | 0.36 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD12 | 15 | 0.36 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD13 | 15 | 0.36 |
| (1,409) | 1:A:2:ALA:HB1 | 1:A:3:GLU:H | 8 | 0.36 |
| (1,409) | 1:A:2:ALA:HB2 | 1:A:3:GLU:H | 8 | 0.36 |
| (1,409) | 1:A:2:ALA:HB3 | 1:A:3:GLU:H | 8 | 0.36 |
| (1,381) | 1:A:25:TRP:HZ2 | 1:A:25:TRP:HE1 | 4 | 0.36 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,269) | 1:A:20:GLN:H | 1:A:20:GLN:HG2 | 1 | 0.36 |
| (1,269) | 1:A:20:GLN:H | 1:A:20:GLN:HG3 | 1 | 0.36 |
| (1,269) | 1:A:20:GLN:H | 1:A:20:GLN:HG2 | 9 | 0.36 |
| (1,269) | 1:A:20:GLN:H | 1:A:20:GLN:HG3 | 9 | 0.36 |
| (1,237) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HD2 | 11 | 0.36 |
| (1,237) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HD3 | 11 | 0.36 |
| (1,213) | 1:A:8:SER:H | 1:A:10:TYR:H | 1 | 0.36 |
| (1,189) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:33:LYS:H | 5 | 0.36 |
| (1,189) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:33:LYS:H | 14 | 0.36 |
| (1,180) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:34:ASN:H | 9 | 0.36 |
| (1,1) | 1:A:2:ALA:HA | 1:A:3:GLU:H | 7 | 0.36 |
| (1,7) | 1:A:6:PHE:HB2 | 1:A:7:ILE:H | 5 | 0.35 |
| (1,7) | 1:A:6:PHE:HB3 | 1:A:7:ILE:H | 5 | 0.35 |
| (1,7) | 1:A:6:PHE:HB2 | 1:A:7:ILE:H | 12 | 0.35 |
| (1,7) | 1:A:6:PHE:HB3 | 1:A:7:ILE:H | 12 | 0.35 |
| (1,47) | 1:A:30:LYS:HA | 1:A:31:GLY:H | 14 | 0.35 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:28:ALA:H | 7 | 0.35 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:28:ALA:H | 7 | 0.35 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:28:ALA:H | 7 | 0.35 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:28:ALA:H | 11 | 0.35 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:28:ALA:H | 11 | 0.35 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:28:ALA:H | 11 | 0.35 |
| (1,421) | 1:A:14:MET:HE1 | 1:A:15:ASP:H | 6 | 0.35 |
| (1,421) | 1:A:14:MET:HE2 | 1:A:15:ASP:H | 6 | 0.35 |
| (1,421) | 1:A:14:MET:HE3 | 1:A:15:ASP:H | 6 | 0.35 |
| (1,381) | 1:A:25:TRP:HZ2 | 1:A:25:TRP:HE1 | 1 | 0.35 |
| (1,381) | 1:A:25:TRP:HZ2 | 1:A:25:TRP:HE1 | 5 | 0.35 |
| (1,348) | 1:A:36:TRP:HD1 | 1:A:37:LYS:H | 3 | 0.35 |
| (1,348) | 1:A:36:TRP:HD1 | 1:A:37:LYS:H | 10 | 0.35 |
| (1,348) | 1:A:36:TRP:HD1 | 1:A:37:LYS:H | 15 | 0.35 |
| (1,291) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:25:TRP:HE3 | 7 | 0.35 |
| (1,269) | 1:A:20:GLN:H | 1:A:20:GLN:HG2 | 11 | 0.35 |
| (1,269) | 1:A:20:GLN:H | 1:A:20:GLN:HG3 | 11 | 0.35 |
| (1,269) | 1:A:20:GLN:H | 1:A:20:GLN:HG2 | 14 | 0.35 |
| (1,269) | 1:A:20:GLN:H | 1:A:20:GLN:HG3 | 14 | 0.35 |
| (1,269) | 1:A:20:GLN:H | 1:A:20:GLN:HG2 | 15 | 0.35 |
| (1,269) | 1:A:20:GLN:H | 1:A:20:GLN:HG3 | 15 | 0.35 |
| (1,240) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG2 | 3 | 0.35 |
| (1,240) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG3 | 3 | 0.35 |
| (1,217) | 1:A:1:TYR:HA | 1:A:3:GLU:H | 2 | 0.35 |
| (1,202) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:25:TRP:H | 13 | 0.35 |
| (1,196) | 1:A:28:ALA:H | 1:A:29:GLN:H | 4 | 0.35 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,196) | 1:A:28:ALA:H | 1:A:29:GLN:H | 6 | 0.35 |
| (1,191) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:17:ILE:H | 5 | 0.35 |
| (1,189) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:33:LYS:H | 10 | 0.35 |
| (1,178) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:36:TRP:H | 4 | 0.35 |
| (1,174) | 1:A:38:HIS:H | 1:A:39:ASN:H | 7 | 0.35 |
| (1,134) | 1:A:22:PHE:HB2 | 1:A:23:VAL:H | 6 | 0.35 |
| (1,134) | 1:A:22:PHE:HB3 | 1:A:23:VAL:H | 6 | 0.35 |
| (1,129) | 1:A:31:GLY:HA2 | 1:A:32:LYS:H | 6 | 0.35 |
| (1,129) | 1:A:31:GLY:HA3 | 1:A:32:LYS:H | 6 | 0.35 |
| (1,1) | 1:A:2:ALA:HA | 1:A:3:GLU:H | 2 | 0.35 |
| (1,1) | 1:A:2:ALA:HA | 1:A:3:GLU:H | 12 | 0.35 |
| (1,84) | 1:A:34:ASN:HA | 1:A:37:LYS:H | 2 | 0.34 |
| (1,7) | 1:A:6:PHE:HB2 | 1:A:7:ILE:H | 6 | 0.34 |
| (1,7) | 1:A:6:PHE:HB3 | 1:A:7:ILE:H | 6 | 0.34 |
| (1,436) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:40:ILE:HD11 | 15 | 0.34 |
| (1,436) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:40:ILE:HD12 | 15 | 0.34 |
| (1,436) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:40:ILE:HD13 | 15 | 0.34 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG21 | 1:A:6:PHE:H | 6 | 0.34 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG22 | 1:A:6:PHE:H | 6 | 0.34 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG23 | 1:A:6:PHE:H | 6 | 0.34 |
| (1,381) | 1:A:25:TRP:HZ2 | 1:A:25:TRP:HE1 | 2 | 0.34 |
| (1,381) | 1:A:25:TRP:HZ2 | 1:A:25:TRP:HE1 | 6 | 0.34 |
| (1,381) | 1:A:25:TRP:HZ2 | 1:A:25:TRP:HE1 | 7 | 0.34 |
| (1,381) | 1:A:25:TRP:HZ2 | 1:A:25:TRP:HE1 | 8 | 0.34 |
| (1,381) | 1:A:25:TRP:HZ2 | 1:A:25:TRP:HE1 | 9 | 0.34 |
| (1,381) | 1:A:25:TRP:HZ2 | 1:A:25:TRP:HE1 | 10 | 0.34 |
| (1,381) | 1:A:25:TRP:HZ2 | 1:A:25:TRP:HE1 | 13 | 0.34 |
| (1,381) | 1:A:25:TRP:HZ2 | 1:A:25:TRP:HE1 | 14 | 0.34 |
| (1,381) | 1:A:25:TRP:HZ2 | 1:A:25:TRP:HE1 | 15 | 0.34 |
| (1,348) | 1:A:36:TRP:HD1 | 1:A:37:LYS:H | 1 | 0.34 |
| (1,348) | 1:A:36:TRP:HD1 | 1:A:37:LYS:H | 7 | 0.34 |
| (1,341) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:H | 11 | 0.34 |
| (1,318) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:26:LEU:HG | 10 | 0.34 |
| (1,269) | 1:A:20:GLN:H | 1:A:20:GLN:HG2 | 12 | 0.34 |
| (1,269) | 1:A:20:GLN:H | 1:A:20:GLN:HG3 | 12 | 0.34 |
| (1,249) | 1:A:37:LYS:HD2 | 1:A:38:HIS:H | 3 | 0.34 |
| (1,249) | 1:A:37:LYS:HD3 | 1:A:38:HIS:H | 3 | 0.34 |
| (1,240) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG2 | 8 | 0.34 |
| (1,240) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG3 | 8 | 0.34 |
| (1,239) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:H | 1 | 0.34 |
| (1,239) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:H | 1 | 0.34 |
| (1,239) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:H | 2 | 0.34 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,239) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:H | 2 | 0.34 |
| (1,239) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:H | 14 | 0.34 |
| (1,239) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:H | 14 | 0.34 |
| (1,236) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HG2 | 15 | 0.34 |
| (1,236) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HG3 | 15 | 0.34 |
| (1,220) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:36:TRP:H | 10 | 0.34 |
| (1,191) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:17:ILE:H | 13 | 0.34 |
| (1,183) | 1:A:9:ASP:H | 1:A:10:TYR:H | 1 | 0.34 |
| (1,183) | 1:A:9:ASP:H | 1:A:10:TYR:H | 11 | 0.34 |
| (1,180) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:34:ASN:H | 12 | 0.34 |
| (1,179) | 1:A:25:TRP:H | 1:A:26:LEU:H | 15 | 0.34 |
| (1,175) | 1:A:6:PHE:H | 1:A:7:ILE:H | 10 | 0.34 |
| (1,157) | 1:A:18:HIS:H | 1:A:18:HIS:HB2 | 8 | 0.34 |
| (1,129) | 1:A:31:GLY:HA2 | 1:A:32:LYS:H | 14 | 0.34 |
| (1,129) | 1:A:31:GLY:HA3 | 1:A:32:LYS:H | 14 | 0.34 |
| (1,108) | 1:A:3:GLU:HA | 1:A:6:PHE:H | 5 | 0.34 |
| (1,1) | 1:A:2:ALA:HA | 1:A:3:GLU:H | 3 | 0.34 |
| (1,1) | 1:A:2:ALA:HA | 1:A:3:GLU:H | 11 | 0.34 |
| (1,79) | 1:A:14:MET:HA | 1:A:17:ILE:H | 9 | 0.33 |
| (1,77) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:40:ILE:HB | 13 | 0.33 |
| (1,7) | 1:A:6:PHE:HB2 | 1:A:7:ILE:H | 4 | 0.33 |
| (1,7) | 1:A:6:PHE:HB3 | 1:A:7:ILE:H | 4 | 0.33 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD11 | 3 | 0.33 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD12 | 3 | 0.33 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD13 | 3 | 0.33 |
| (1,397) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG12 | 13 | 0.33 |
| (1,397) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG13 | 13 | 0.33 |
| (1,397) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG12 | 13 | 0.33 |
| (1,397) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG13 | 13 | 0.33 |
| (1,381) | 1:A:25:TRP:HZ2 | 1:A:25:TRP:HE1 | 3 | 0.33 |
| (1,381) | 1:A:25:TRP:HZ2 | 1:A:25:TRP:HE1 | 11 | 0.33 |
| (1,381) | 1:A:25:TRP:HZ2 | 1:A:25:TRP:HE1 | 12 | 0.33 |
| (1,28) | 1:A:20:GLN:HA | 1:A:21:ASP:H | 8 | 0.33 |
| (1,254) | 1:A:33:LYS:HG2 | 1:A:34:ASN:H | 9 | 0.33 |
| (1,254) | 1:A:33:LYS:HG3 | 1:A:34:ASN:H | 9 | 0.33 |
| (1,251) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:40:ILE:HG12 | 3 | 0.33 |
| (1,251) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:40:ILE:HG13 | 3 | 0.33 |
| (1,244) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HD2 | 9 | 0.33 |
| (1,244) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HD3 | 9 | 0.33 |
| (1,240) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG2 | 1 | 0.33 |
| (1,240) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG3 | 1 | 0.33 |
| (1,237) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HD2 | 8 | 0.33 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,237) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HD3 | 8 | 0.33 |
| (1,237) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HD2 | 15 | 0.33 |
| (1,237) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HD3 | 15 | 0.33 |
| (1,236) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HG2 | 7 | 0.33 |
| (1,236) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HG3 | 7 | 0.33 |
| (1,202) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:25:TRP:H | 8 | 0.33 |
| (1,191) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:17:ILE:H | 1 | 0.33 |
| (1,191) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:17:ILE:H | 11 | 0.33 |
| (1,19) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:15:ASP:H | 13 | 0.33 |
| (1,19) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:15:ASP:H | 13 | 0.33 |
| (1,183) | 1:A:9:ASP:H | 1:A:10:TYR:H | 8 | 0.33 |
| (1,180) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:34:ASN:H | 10 | 0.33 |
| (1,174) | 1:A:38:HIS:H | 1:A:39:ASN:H | 9 | 0.33 |
| (1,115) | 1:A:13:ALA:HA | 1:A:14:MET:H | 3 | 0.33 |
| (1,1) | 1:A:2:ALA:HA | 1:A:3:GLU:H | 13 | 0.33 |
| (1,89) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HB3 | 11 | 0.32 |
| (1,80) | 1:A:16:LYS:HA | 1:A:19:GLN:H | 2 | 0.32 |
| (1,77) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:40:ILE:HB | 10 | 0.32 |
| (1,7) | 1:A:6:PHE:HB2 | 1:A:7:ILE:H | 7 | 0.32 |
| (1,7) | 1:A:6:PHE:HB3 | 1:A:7:ILE:H | 7 | 0.32 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD11 | 2 | 0.32 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD12 | 2 | 0.32 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD13 | 2 | 0.32 |
| (1,428) | 1:A:28:ALA:HB1 | 1:A:29:GLN:H | 15 | 0.32 |
| (1,428) | 1:A:28:ALA:HB2 | 1:A:29:GLN:H | 15 | 0.32 |
| (1,428) | 1:A:28:ALA:HB3 | 1:A:29:GLN:H | 15 | 0.32 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD11 | 1 | 0.32 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD12 | 1 | 0.32 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD13 | 1 | 0.32 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD11 | 7 | 0.32 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD12 | 7 | 0.32 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD13 | 7 | 0.32 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:20:GLN:HB2 | 9 | 0.32 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG2 | 1:A:20:GLN:HB3 | 9 | 0.32 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HB2 | 9 | 0.32 |
| (1,389) | 1:A:19:GLN:HG3 | 1:A:20:GLN:HB3 | 9 | 0.32 |
| (1,348) | 1:A:36:TRP:HD1 | 1:A:37:LYS:H | 8 | 0.32 |
| (1,335) | 1:A:17:ILE:HA | 1:A:18:HIS:HD2 | 3 | 0.32 |
| (1,317) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:7:ILE:HG13 | 1 | 0.32 |
| (1,317) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:7:ILE:HG13 | 1 | 0.32 |
| (1,28) | 1:A:20:GLN:HA | 1:A:21:ASP:H | 10 | 0.32 |
| (1,28) | 1:A:20:GLN:HA | 1:A:21:ASP:H | 11 | 0.32 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,265) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:H | 2 | 0.32 |
| (1,265) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:H | 8 | 0.32 |
| (1,246) | 1:A:33:LYS:HD2 | 1:A:34:ASN:H | 2 | 0.32 |
| (1,246) | 1:A:33:LYS:HD3 | 1:A:34:ASN:H | 2 | 0.32 |
| (1,236) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HG2 | 8 | 0.32 |
| (1,236) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HG3 | 8 | 0.32 |
| (1,236) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HG2 | 13 | 0.32 |
| (1,236) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HG3 | 13 | 0.32 |
| (1,234) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HG2 | 11 | 0.32 |
| (1,234) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HG3 | 11 | 0.32 |
| (1,223) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:36:TRP:H | 11 | 0.32 |
| (1,21) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HB | 11 | 0.32 |
| (1,191) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:17:ILE:H | 3 | 0.32 |
| (1,189) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:33:LYS:H | 2 | 0.32 |
| (1,189) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:33:LYS:H | 13 | 0.32 |
| (1,183) | 1:A:9:ASP:H | 1:A:10:TYR:H | 12 | 0.32 |
| (1,183) | 1:A:9:ASP:H | 1:A:10:TYR:H | 13 | 0.32 |
| (1,181) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:35:ASP:H | 5 | 0.32 |
| (1,176) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:36:TRP:H | 2 | 0.32 |
| (1,169) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:H | 14 | 0.32 |
| (2,9) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HB2 | 12 | 0.31 |
| (2,9) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HB3 | 12 | 0.31 |
| (2,9) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HB2 | 12 | 0.31 |
| (2,9) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HB3 | 12 | 0.31 |
| (2,13) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HG | 4 | 0.31 |
| (2,13) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HG | 4 | 0.31 |
| (1,77) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:40:ILE:HB | 14 | 0.31 |
| (1,7) | 1:A:6:PHE:HB2 | 1:A:7:ILE:H | 11 | 0.31 |
| (1,7) | 1:A:6:PHE:HB3 | 1:A:7:ILE:H | 11 | 0.31 |
| (1,7) | 1:A:6:PHE:HB2 | 1:A:7:ILE:H | 14 | 0.31 |
| (1,7) | 1:A:6:PHE:HB3 | 1:A:7:ILE:H | 14 | 0.31 |
| (1,58) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HB2 | 1 | 0.31 |
| (1,448) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:28:ALA:HB1 | 4 | 0.31 |
| (1,448) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:28:ALA:HB2 | 4 | 0.31 |
| (1,448) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:28:ALA:HB3 | 4 | 0.31 |
| (1,434) | 1:A:13:ALA:HB1 | 1:A:14:MET:H | 8 | 0.31 |
| (1,434) | 1:A:13:ALA:HB2 | 1:A:14:MET:H | 8 | 0.31 |
| (1,434) | 1:A:13:ALA:HB3 | 1:A:14:MET:H | 8 | 0.31 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:28:ALA:H | 3 | 0.31 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:28:ALA:H | 3 | 0.31 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:28:ALA:H | 3 | 0.31 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:28:ALA:H | 4 | 0.31 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:28:ALA:H | 4 | 0.31 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:28:ALA:H | 4 | 0.31 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD11 | 11 | 0.31 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD12 | 11 | 0.31 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD13 | 11 | 0.31 |
| (1,397) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG12 | 1 | 0.31 |
| (1,397) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG13 | 1 | 0.31 |
| (1,397) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG12 | 1 | 0.31 |
| (1,397) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG13 | 1 | 0.31 |
| (1,335) | 1:A:17:ILE:HA | 1:A:18:HIS:HD2 | 1 | 0.31 |
| (1,335) | 1:A:17:ILE:HA | 1:A:18:HIS:HD2 | 11 | 0.31 |
| (1,334) | 1:A:14:MET:HA | 1:A:18:HIS:HD2 | 12 | 0.31 |
| (1,332) | 1:A:38:HIS:HA | 1:A:38:HIS:HD2 | 1 | 0.31 |
| (1,28) | 1:A:20:GLN:HA | 1:A:21:ASP:H | 1 | 0.31 |
| (1,28) | 1:A:20:GLN:HA | 1:A:21:ASP:H | 6 | 0.31 |
| (1,28) | 1:A:20:GLN:HA | 1:A:21:ASP:H | 12 | 0.31 |
| (1,265) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:H | 7 | 0.31 |
| (1,251) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:40:ILE:HG12 | 1 | 0.31 |
| (1,251) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:40:ILE:HG13 | 1 | 0.31 |
| (1,236) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HG2 | 11 | 0.31 |
| (1,236) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HG3 | 11 | 0.31 |
| (1,223) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:36:TRP:H | 5 | 0.31 |
| (1,214) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:25:TRP:H | 14 | 0.31 |
| (1,199) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:ALA:H | 6 | 0.31 |
| (1,190) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:18:HIS:H | 12 | 0.31 |
| (1,174) | 1:A:38:HIS:H | 1:A:39:ASN:H | 5 | 0.31 |
| (1,139) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:42:GLN:HB3 | 8 | 0.31 |
| (1,135) | 1:A:5:THR:HB | 1:A:8:SER:H | 10 | 0.31 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG21 | 1:A:9:ASP:H | 8 | 0.3 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG22 | 1:A:9:ASP:H | 8 | 0.3 |
| (1,480) | 1:A:7:ILE:HG23 | 1:A:9:ASP:H | 8 | 0.3 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD11 | 9 | 0.3 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD12 | 9 | 0.3 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD13 | 9 | 0.3 |
| (1,437) | 1:A:17:ILE:HG21 | 1:A:18:HIS:H | 10 | 0.3 |
| (1,437) | 1:A:17:ILE:HG22 | 1:A:18:HIS:H | 10 | 0.3 |
| (1,437) | 1:A:17:ILE:HG23 | 1:A:18:HIS:H | 10 | 0.3 |
| (1,348) | 1:A:36:TRP:HD1 | 1:A:37:LYS:H | 6 | 0.3 |
| (1,348) | 1:A:36:TRP:HD1 | 1:A:37:LYS:H | 12 | 0.3 |
| (1,341) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:H | 3 | 0.3 |
| (1,28) | 1:A:20:GLN:HA | 1:A:21:ASP:H | 3 | 0.3 |
| (1,28) | 1:A:20:GLN:HA | 1:A:21:ASP:H | 4 | 0.3 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,28) | 1:A:20:GLN:HA | 1:A:21:ASP:H | 5 | 0.3 |
| (1,28) | 1:A:20:GLN:HA | 1:A:21:ASP:H | 9 | 0.3 |
| (1,28) | 1:A:20:GLN:HA | 1:A:21:ASP:H | 13 | 0.3 |
| (1,28) | 1:A:20:GLN:HA | 1:A:21:ASP:H | 14 | 0.3 |
| (1,28) | 1:A:20:GLN:HA | 1:A:21:ASP:H | 15 | 0.3 |
| (1,265) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:H | 9 | 0.3 |
| (1,245) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD2 | 1 | 0.3 |
| (1,245) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD3 | 1 | 0.3 |
| (1,236) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HG2 | 4 | 0.3 |
| (1,236) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HG3 | 4 | 0.3 |
| (1,236) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HG2 | 5 | 0.3 |
| (1,236) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HG3 | 5 | 0.3 |
| (1,217) | 1:A:1:TYR:HA | 1:A:3:GLU:H | 9 | 0.3 |
| (1,217) | 1:A:1:TYR:HA | 1:A:3:GLU:H | 11 | 0.3 |
| (1,216) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:39:ASN:H | 3 | 0.3 |
| (1,21) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HB | 10 | 0.3 |
| (1,191) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:17:ILE:H | 7 | 0.3 |
| (1,19) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:15:ASP:H | 6 | 0.3 |
| (1,19) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:15:ASP:H | 6 | 0.3 |
| (1,19) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:15:ASP:H | 14 | 0.3 |
| (1,19) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:15:ASP:H | 14 | 0.3 |
| (1,183) | 1:A:9:ASP:H | 1:A:10:TYR:H | 3 | 0.3 |
| (1,179) | 1:A:25:TRP:H | 1:A:26:LEU:H | 13 | 0.3 |
| (1,175) | 1:A:6:PHE:H | 1:A:7:ILE:H | 8 | 0.3 |
| (1,174) | 1:A:38:HIS:H | 1:A:39:ASN:H | 3 | 0.3 |
| (1,173) | 1:A:39:ASN:H | 1:A:40:ILE:H | 10 | 0.3 |
| (1,170) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:20:GLN:H | 6 | 0.3 |
| (1,169) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:H | 9 | 0.3 |
| (1,169) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:H | 10 | 0.3 |
| (1,157) | 1:A:18:HIS:H | 1:A:18:HIS:HB2 | 14 | 0.3 |
| (1,129) | 1:A:31:GLY:HA2 | 1:A:32:LYS:H | 3 | 0.3 |
| (1,129) | 1:A:31:GLY:HA3 | 1:A:32:LYS:H | 3 | 0.3 |
| (1,115) | 1:A:13:ALA:HA | 1:A:14:MET:H | 6 | 0.3 |
| (2,5) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:12:ILE:HA | 4 | 0.29 |
| (2,5) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:12:ILE:HA | 4 | 0.29 |
| (2,28) | 1:A:6:PHE:HE1 | 1:A:7:ILE:HD11 | 9 | 0.29 |
| (2,28) | 1:A:6:PHE:HE1 | 1:A:7:ILE:HD12 | 9 | 0.29 |
| (2,28) | 1:A:6:PHE:HE1 | 1:A:7:ILE:HD13 | 9 | 0.29 |
| (2,28) | 1:A:6:PHE:HE2 | 1:A:7:ILE:HD11 | 9 | 0.29 |
| (2,28) | 1:A:6:PHE:HE2 | 1:A:7:ILE:HD12 | 9 | 0.29 |
| (2,28) | 1:A:6:PHE:HE2 | 1:A:7:ILE:HD13 | 9 | 0.29 |
| (1,89) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HB3 | 4 | 0.29 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,58) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HB2 | 7 | 0.29 |
| (1,55) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:34:ASN:H | 15 | 0.29 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD11 | 7 | 0.29 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD12 | 7 | 0.29 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD13 | 7 | 0.29 |
| (1,28) | 1:A:20:GLN:HA | 1:A:21:ASP:H | 2 | 0.29 |
| (1,28) | 1:A:20:GLN:HA | 1:A:21:ASP:H | 7 | 0.29 |
| (1,254) | 1:A:33:LYS:HG2 | 1:A:34:ASN:H | 12 | 0.29 |
| (1,254) | 1:A:33:LYS:HG3 | 1:A:34:ASN:H | 12 | 0.29 |
| (1,246) | 1:A:33:LYS:HD2 | 1:A:34:ASN:H | 6 | 0.29 |
| (1,246) | 1:A:33:LYS:HD3 | 1:A:34:ASN:H | 6 | 0.29 |
| (1,223) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:36:TRP:H | 9 | 0.29 |
| (1,220) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:36:TRP:H | 8 | 0.29 |
| (1,191) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:17:ILE:H | 8 | 0.29 |
| (1,191) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:17:ILE:H | 14 | 0.29 |
| (1,190) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:18:HIS:H | 13 | 0.29 |
| (1,190) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:18:HIS:H | 14 | 0.29 |
| (1,186) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:37:LYS:H | 15 | 0.29 |
| (1,183) | 1:A:9:ASP:H | 1:A:10:TYR:H | 4 | 0.29 |
| (1,181) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:35:ASP:H | 8 | 0.29 |
| (1,174) | 1:A:38:HIS:H | 1:A:39:ASN:H | 11 | 0.29 |
| (1,165) | 1:A:9:ASP:HB2 | 1:A:11:SER:H | 12 | 0.29 |
| (1,165) | 1:A:9:ASP:HB3 | 1:A:11:SER:H | 12 | 0.29 |
| (1,146) | 1:A:19:GLN:HB2 | 1:A:20:GLN:H | 7 | 0.29 |
| (1,146) | 1:A:19:GLN:HB3 | 1:A:20:GLN:H | 7 | 0.29 |
| (2,5) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:12:ILE:HA | 1 | 0.28 |
| (2,5) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:12:ILE:HA | 1 | 0.28 |
| (2,36) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:12:ILE:HD11 | 9 | 0.28 |
| (2,36) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:12:ILE:HD12 | 9 | 0.28 |
| (2,36) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:12:ILE:HD13 | 9 | 0.28 |
| (2,36) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 9 | 0.28 |
| (2,36) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 9 | 0.28 |
| (2,36) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 9 | 0.28 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG21 | 11 | 0.28 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG22 | 11 | 0.28 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG23 | 11 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:28:ALA:HB1 | 4 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:28:ALA:HB2 | 4 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:28:ALA:HB3 | 4 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:28:ALA:HB1 | 4 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:28:ALA:HB2 | 4 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:28:ALA:HB3 | 4 | 0.28 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:28:ALA:HB1 | 4 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:28:ALA:HB2 | 4 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:28:ALA:HB3 | 4 | 0.28 |
| (1,47) | 1:A:30:LYS:HA | 1:A:31:GLY:H | 5 | 0.28 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD11 | 5 | 0.28 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD12 | 5 | 0.28 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD13 | 5 | 0.28 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG21 | 1:A:6:PHE:H | 14 | 0.28 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG22 | 1:A:6:PHE:H | 14 | 0.28 |
| (1,411) | 1:A:5:THR:HG23 | 1:A:6:PHE:H | 14 | 0.28 |
| (1,334) | 1:A:14:MET:HA | 1:A:18:HIS:HD2 | 11 | 0.28 |
| (1,260) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:34:ASN:H | 12 | 0.28 |
| (1,260) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:34:ASN:H | 12 | 0.28 |
| (1,240) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG2 | 13 | 0.28 |
| (1,240) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG3 | 13 | 0.28 |
| (1,230) | 1:A:15:ASP:HA | 1:A:18:HIS:H | 7 | 0.28 |
| (1,218) | 1:A:29:GLN:HA | 1:A:31:GLY:H | 10 | 0.28 |
| (1,216) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:39:ASN:H | 6 | 0.28 |
| (1,214) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:25:TRP:H | 5 | 0.28 |
| (1,21) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HB | 12 | 0.28 |
| (1,198) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:H | 4 | 0.28 |
| (1,197) | 1:A:8:SER:H | 1:A:9:ASP:H | 13 | 0.28 |
| (1,196) | 1:A:28:ALA:H | 1:A:29:GLN:H | 2 | 0.28 |
| (1,196) | 1:A:28:ALA:H | 1:A:29:GLN:H | 12 | 0.28 |
| (1,191) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:17:ILE:H | 2 | 0.28 |
| (1,190) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:18:HIS:H | 5 | 0.28 |
| (1,19) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:15:ASP:H | 12 | 0.28 |
| (1,19) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:15:ASP:H | 12 | 0.28 |
| (1,19) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:15:ASP:H | 15 | 0.28 |
| (1,19) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:15:ASP:H | 15 | 0.28 |
| (1,186) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:37:LYS:H | 2 | 0.28 |
| (1,184) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:H | 8 | 0.28 |
| (1,183) | 1:A:9:ASP:H | 1:A:10:TYR:H | 10 | 0.28 |
| (1,180) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:34:ASN:H | 8 | 0.28 |
| (1,165) | 1:A:9:ASP:HB2 | 1:A:11:SER:H | 8 | 0.28 |
| (1,165) | 1:A:9:ASP:HB3 | 1:A:11:SER:H | 8 | 0.28 |
| (1,157) | 1:A:18:HIS:H | 1:A:18:HIS:HB2 | 9 | 0.28 |
| (1,147) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:24:ASN:H | 6 | 0.28 |
| (1,129) | 1:A:31:GLY:HA2 | 1:A:32:LYS:H | 12 | 0.28 |
| (1,129) | 1:A:31:GLY:HA3 | 1:A:32:LYS:H | 12 | 0.28 |
| (1,115) | 1:A:13:ALA:HA | 1:A:14:MET:H | 1 | 0.28 |
| (1,115) | 1:A:13:ALA:HA | 1:A:14:MET:H | 5 | 0.28 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,115) | 1:A:13:ALA:HA | 1:A:14:MET:H | 15 | 0.28 |
| (2,34) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:28:ALA:HB1 | 2 | 0.27 |
| (2,34) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:28:ALA:HB2 | 2 | 0.27 |
| (2,34) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:28:ALA:HB3 | 2 | 0.27 |
| (1,7) | 1:A:6:PHE:HB2 | 1:A:7:ILE:H | 3 | 0.27 |
| (1,7) | 1:A:6:PHE:HB3 | 1:A:7:ILE:H | 3 | 0.27 |
| (1,51) | 1:A:30:LYS:HB2 | 1:A:31:GLY:H | 15 | 0.27 |
| (1,51) | 1:A:30:LYS:HB3 | 1:A:31:GLY:H | 15 | 0.27 |
| (1,47) | 1:A:30:LYS:HA | 1:A:31:GLY:H | 9 | 0.27 |
| (1,416) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HD11 | 5 | 0.27 |
| (1,416) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HD12 | 5 | 0.27 |
| (1,416) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HD13 | 5 | 0.27 |
| (1,348) | 1:A:36:TRP:HD1 | 1:A:37:LYS:H | 2 | 0.27 |
| (1,335) | 1:A:17:ILE:HA | 1:A:18:HIS:HD2 | 15 | 0.27 |
| (1,311) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:11:SER:HB2 | 3 | 0.27 |
| (1,311) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:11:SER:HB2 | 3 | 0.27 |
| (1,311) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:11:SER:HB2 | 9 | 0.27 |
| (1,311) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:11:SER:HB2 | 9 | 0.27 |
| (1,250) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:37:LYS:HG2 | 6 | 0.27 |
| (1,250) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:37:LYS:HG3 | 6 | 0.27 |
| (1,240) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG2 | 5 | 0.27 |
| (1,240) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG3 | 5 | 0.27 |
| (1,240) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG2 | 6 | 0.27 |
| (1,240) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG3 | 6 | 0.27 |
| (1,240) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG2 | 9 | 0.27 |
| (1,240) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG3 | 9 | 0.27 |
| (1,230) | 1:A:15:ASP:HA | 1:A:18:HIS:H | 3 | 0.27 |
| (1,224) | 1:A:38:HIS:HA | 1:A:42:GLN:H | 8 | 0.27 |
| (1,21) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HB | 13 | 0.27 |
| (1,203) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HB | 13 | 0.27 |
| (1,196) | 1:A:28:ALA:H | 1:A:29:GLN:H | 1 | 0.27 |
| (1,190) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:18:HIS:H | 7 | 0.27 |
| (1,188) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:31:GLY:H | 5 | 0.27 |
| (1,186) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:37:LYS:H | 12 | 0.27 |
| (1,152) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:24:ASN:HB2 | 4 | 0.27 |
| (1,152) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:24:ASN:HB2 | 7 | 0.27 |
| (1,73) | 1:A:38:HIS:HB2 | 1:A:39:ASN:H | 11 | 0.26 |
| (1,73) | 1:A:38:HIS:HB3 | 1:A:39:ASN:H | 11 | 0.26 |
| (1,7) | 1:A:6:PHE:HB2 | 1:A:7:ILE:H | 13 | 0.26 |
| (1,7) | 1:A:6:PHE:HB3 | 1:A:7:ILE:H | 13 | 0.26 |
| (1,58) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HB2 | 3 | 0.26 |
| (1,55) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:34:ASN:H | 7 | 0.26 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,55) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:34:ASN:H | 9 | 0.26 |
| (1,437) | 1:A:17:ILE:HG21 | 1:A:18:HIS:H | 8 | 0.26 |
| (1,437) | 1:A:17:ILE:HG22 | 1:A:18:HIS:H | 8 | 0.26 |
| (1,437) | 1:A:17:ILE:HG23 | 1:A:18:HIS:H | 8 | 0.26 |
| (1,437) | 1:A:17:ILE:HG21 | 1:A:18:HIS:H | 14 | 0.26 |
| (1,437) | 1:A:17:ILE:HG22 | 1:A:18:HIS:H | 14 | 0.26 |
| (1,437) | 1:A:17:ILE:HG23 | 1:A:18:HIS:H | 14 | 0.26 |
| (1,416) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HD11 | 9 | 0.26 |
| (1,416) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HD12 | 9 | 0.26 |
| (1,416) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HD13 | 9 | 0.26 |
| (1,402) | 1:A:33:LYS:HB3 | 1:A:33:LYS:HD2 | 10 | 0.26 |
| (1,402) | 1:A:33:LYS:HB3 | 1:A:33:LYS:HD3 | 10 | 0.26 |
| (1,272) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG12 | 12 | 0.26 |
| (1,260) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:34:ASN:H | 1 | 0.26 |
| (1,260) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:34:ASN:H | 1 | 0.26 |
| (1,240) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG2 | 11 | 0.26 |
| (1,240) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG3 | 11 | 0.26 |
| (1,240) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG2 | 14 | 0.26 |
| (1,240) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG3 | 14 | 0.26 |
| (1,237) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HD2 | 5 | 0.26 |
| (1,237) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HD3 | 5 | 0.26 |
| (1,214) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:25:TRP:H | 2 | 0.26 |
| (1,190) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:18:HIS:H | 1 | 0.26 |
| (1,190) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:18:HIS:H | 4 | 0.26 |
| (1,188) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:31:GLY:H | 1 | 0.26 |
| (1,187) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:38:HIS:H | 2 | 0.26 |
| (1,184) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:H | 13 | 0.26 |
| (1,180) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:34:ASN:H | 2 | 0.26 |
| (1,172) | 1:A:4:GLY:H | 1:A:6:PHE:H | 9 | 0.26 |
| (1,170) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:20:GLN:H | 3 | 0.26 |
| (1,170) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:20:GLN:H | 13 | 0.26 |
| (1,169) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:H | 6 | 0.26 |
| (1,169) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:H | 7 | 0.26 |
| (1,152) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:24:ASN:HB2 | 15 | 0.26 |
| (1,147) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:24:ASN:H | 15 | 0.26 |
| (1,139) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:42:GLN:HB3 | 15 | 0.26 |
| (1,135) | 1:A:5:THR:HB | 1:A:8:SER:H | 15 | 0.26 |
| (1,10) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:ALA:H | 1 | 0.26 |
| (1,10) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:ALA:H | 10 | 0.26 |
| (1,10) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:ALA:H | 11 | 0.26 |
| (1,10) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:ALA:H | 12 | 0.26 |
| (1,10) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:ALA:H | 13 | 0.26 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,10) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:ALA:H | 14 | 0.26 |
| (2,9) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HB2 | 7 | 0.25 |
| (2,9) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HB3 | 7 | 0.25 |
| (2,9) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HB2 | 7 | 0.25 |
| (2,9) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HB3 | 7 | 0.25 |
| (2,5) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:12:ILE:HA | 6 | 0.25 |
| (2,5) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:12:ILE:HA | 6 | 0.25 |
| (2,26) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:7:ILE:HG21 | 1 | 0.25 |
| (2,26) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:7:ILE:HG22 | 1 | 0.25 |
| (2,26) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:7:ILE:HG23 | 1 | 0.25 |
| (2,26) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:7:ILE:HG21 | 1 | 0.25 |
| (2,26) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:7:ILE:HG22 | 1 | 0.25 |
| (2,26) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:7:ILE:HG23 | 1 | 0.25 |
| (1,90) | 1:A:32:LYS:HB3 | 1:A:33:LYS:H | 8 | 0.25 |
| (1,89) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HB3 | 13 | 0.25 |
| (1,89) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HB3 | 14 | 0.25 |
| (1,79) | 1:A:14:MET:HA | 1:A:17:ILE:H | 2 | 0.25 |
| (1,64) | 1:A:36:TRP:H | 1:A:36:TRP:HA | 13 | 0.25 |
| (1,55) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:34:ASN:H | 2 | 0.25 |
| (1,55) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:34:ASN:H | 3 | 0.25 |
| (1,55) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:34:ASN:H | 5 | 0.25 |
| (1,55) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:34:ASN:H | 11 | 0.25 |
| (1,55) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:34:ASN:H | 13 | 0.25 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:28:ALA:HB1 | 7 | 0.25 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:28:ALA:HB2 | 7 | 0.25 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:28:ALA:HB3 | 7 | 0.25 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:28:ALA:HB1 | 7 | 0.25 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:28:ALA:HB2 | 7 | 0.25 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:28:ALA:HB3 | 7 | 0.25 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:28:ALA:HB1 | 7 | 0.25 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:28:ALA:HB2 | 7 | 0.25 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:28:ALA:HB3 | 7 | 0.25 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD11 | 10 | 0.25 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD12 | 10 | 0.25 |
| (1,443) | 1:A:25:TRP:HE3 | 1:A:26:LEU:HD13 | 10 | 0.25 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:28:ALA:H | 10 | 0.25 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:28:ALA:H | 10 | 0.25 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:28:ALA:H | 10 | 0.25 |
| (1,286) | 1:A:25:TRP:HB2 | 1:A:25:TRP:HE3 | 13 | 0.25 |
| (1,286) | 1:A:25:TRP:HB3 | 1:A:25:TRP:HE3 | 13 | 0.25 |
| (1,240) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG2 | 2 | 0.25 |
| (1,240) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:19:GLN:HG3 | 2 | 0.25 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,234) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HG2 | 2 | 0.25 |
| (1,234) | 1:A:14:MET:H | 1:A:14:MET:HG3 | 2 | 0.25 |
| (1,230) | 1:A:15:ASP:HA | 1:A:18:HIS:H | 12 | 0.25 |
| (1,215) | 1:A:36:TRP:H | 1:A:38:HIS:H | 14 | 0.25 |
| (1,214) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:25:TRP:H | 6 | 0.25 |
| (1,197) | 1:A:8:SER:H | 1:A:9:ASP:H | 9 | 0.25 |
| (1,196) | 1:A:28:ALA:H | 1:A:29:GLN:H | 5 | 0.25 |
| (1,190) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:18:HIS:H | 10 | 0.25 |
| (1,19) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:15:ASP:H | 9 | 0.25 |
| (1,19) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:15:ASP:H | 9 | 0.25 |
| (1,183) | 1:A:9:ASP:H | 1:A:10:TYR:H | 15 | 0.25 |
| (1,174) | 1:A:38:HIS:H | 1:A:39:ASN:H | 14 | 0.25 |
| (1,157) | 1:A:18:HIS:H | 1:A:18:HIS:HB2 | 10 | 0.25 |
| (1,152) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:24:ASN:HB2 | 1 | 0.25 |
| (1,152) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:24:ASN:HB2 | 5 | 0.25 |
| (1,152) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:24:ASN:HB2 | 13 | 0.25 |
| (1,135) | 1:A:5:THR:HB | 1:A:8:SER:H | 6 | 0.25 |
| (1,10) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:ALA:H | 2 | 0.25 |
| (1,10) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:ALA:H | 4 | 0.25 |
| (1,10) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:ALA:H | 7 | 0.25 |
| (1,10) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:ALA:H | 15 | 0.25 |
| (2,11) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HG2 | 7 | 0.24 |
| (2,11) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HG3 | 7 | 0.24 |
| (2,11) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HG2 | 7 | 0.24 |
| (2,11) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HG3 | 7 | 0.24 |
| (1,95) | 1:A:1:TYR:HA | 1:A:2:ALA:H | 7 | 0.24 |
| (1,89) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HB3 | 12 | 0.24 |
| (1,75) | 1:A:39:ASN:HA | 1:A:40:ILE:H | 8 | 0.24 |
| (1,7) | 1:A:6:PHE:HB2 | 1:A:7:ILE:H | 2 | 0.24 |
| (1,7) | 1:A:6:PHE:HB3 | 1:A:7:ILE:H | 2 | 0.24 |
| (1,55) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:34:ASN:H | 1 | 0.24 |
| (1,55) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:34:ASN:H | 14 | 0.24 |
| (1,436) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:40:ILE:HD11 | 2 | 0.24 |
| (1,436) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:40:ILE:HD12 | 2 | 0.24 |
| (1,436) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:40:ILE:HD13 | 2 | 0.24 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:28:ALA:H | 13 | 0.24 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:28:ALA:H | 13 | 0.24 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:28:ALA:H | 13 | 0.24 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD11 | 12 | 0.24 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD12 | 12 | 0.24 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD13 | 12 | 0.24 |
| (1,335) | 1:A:17:ILE:HA | 1:A:18:HIS:HD2 | 7 | 0.24 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,328) | 1:A:34:ASN:HD22 | 1:A:38:HIS:HB2 | 13 | 0.24 |
| (1,265) | 1:A:26:LEU:HG | 1:A:29:GLN:H | 10 | 0.24 |
| (1,244) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HD2 | 2 | 0.24 |
| (1,244) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HD3 | 2 | 0.24 |
| (1,237) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HD2 | 4 | 0.24 |
| (1,237) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HD3 | 4 | 0.24 |
| (1,223) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:36:TRP:H | 7 | 0.24 |
| (1,21) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HB | 8 | 0.24 |
| (1,206) | 1:A:7:ILE:HB | 1:A:9:ASP:H | 8 | 0.24 |
| (1,203) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HB | 14 | 0.24 |
| (1,199) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:ALA:H | 5 | 0.24 |
| (1,196) | 1:A:28:ALA:H | 1:A:29:GLN:H | 9 | 0.24 |
| (1,190) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:18:HIS:H | 9 | 0.24 |
| (1,19) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:15:ASP:H | 8 | 0.24 |
| (1,19) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:15:ASP:H | 8 | 0.24 |
| (1,188) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:31:GLY:H | 8 | 0.24 |
| (1,183) | 1:A:9:ASP:H | 1:A:10:TYR:H | 5 | 0.24 |
| (1,170) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:20:GLN:H | 1 | 0.24 |
| (1,170) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:20:GLN:H | 5 | 0.24 |
| (1,152) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:24:ASN:HB2 | 2 | 0.24 |
| (1,152) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:24:ASN:HB2 | 14 | 0.24 |
| (1,129) | 1:A:31:GLY:HA2 | 1:A:32:LYS:H | 1 | 0.24 |
| (1,129) | 1:A:31:GLY:HA3 | 1:A:32:LYS:H | 1 | 0.24 |
| (1,10) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:ALA:H | 6 | 0.24 |
| (1,10) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:ALA:H | 8 | 0.24 |
| (1,10) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:ALA:H | 9 | 0.24 |
| (2,13) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HG | 9 | 0.23 |
| (2,13) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HG | 9 | 0.23 |
| (1,89) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HB3 | 5 | 0.23 |
| (1,75) | 1:A:39:ASN:HA | 1:A:40:ILE:H | 3 | 0.23 |
| (1,75) | 1:A:39:ASN:HA | 1:A:40:ILE:H | 4 | 0.23 |
| (1,75) | 1:A:39:ASN:HA | 1:A:40:ILE:H | 5 | 0.23 |
| (1,75) | 1:A:39:ASN:HA | 1:A:40:ILE:H | 14 | 0.23 |
| (1,61) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:35:ASP:HB3 | 10 | 0.23 |
| (1,61) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:35:ASP:HB2 | 10 | 0.23 |
| (1,58) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HB2 | 6 | 0.23 |
| (1,55) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:34:ASN:H | 4 | 0.23 |
| (1,55) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:34:ASN:H | 6 | 0.23 |
| (1,55) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:34:ASN:H | 10 | 0.23 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:28:ALA:H | 2 | 0.23 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:28:ALA:H | 2 | 0.23 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:28:ALA:H | 2 | 0.23 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD11 | 13 | 0.23 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD12 | 13 | 0.23 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD13 | 13 | 0.23 |
| (1,334) | 1:A:14:MET:HA | 1:A:18:HIS:HD2 | 2 | 0.23 |
| (1,334) | 1:A:14:MET:HA | 1:A:18:HIS:HD2 | 6 | 0.23 |
| (1,250) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:37:LYS:HG2 | 3 | 0.23 |
| (1,250) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:37:LYS:HG3 | 3 | 0.23 |
| (1,237) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HD2 | 3 | 0.23 |
| (1,237) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HD3 | 3 | 0.23 |
| (1,228) | 1:A:5:THR:H | 1:A:5:THR:HA | 1 | 0.23 |
| (1,215) | 1:A:36:TRP:H | 1:A:38:HIS:H | 1 | 0.23 |
| (1,200) | 1:A:14:MET:H | 1:A:15:ASP:H | 8 | 0.23 |
| (1,188) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:31:GLY:H | 4 | 0.23 |
| (1,188) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:31:GLY:H | 14 | 0.23 |
| (1,184) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:H | 1 | 0.23 |
| (1,184) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:H | 12 | 0.23 |
| (1,183) | 1:A:9:ASP:H | 1:A:10:TYR:H | 7 | 0.23 |
| (1,170) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:20:GLN:H | 7 | 0.23 |
| (1,170) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:20:GLN:H | 8 | 0.23 |
| (1,17) | 1:A:15:ASP:H | 1:A:15:ASP:HB3 | 5 | 0.23 |
| (1,157) | 1:A:18:HIS:H | 1:A:18:HIS:HB2 | 5 | 0.23 |
| (1,157) | 1:A:18:HIS:H | 1:A:18:HIS:HB2 | 7 | 0.23 |
| (1,152) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:24:ASN:HB2 | 12 | 0.23 |
| (1,147) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:24:ASN:H | 1 | 0.23 |
| (1,147) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:24:ASN:H | 3 | 0.23 |
| (1,132) | 1:A:27:LEU:H | 1:A:27:LEU:HA | 6 | 0.23 |
| (1,10) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:ALA:H | 5 | 0.23 |
| (1,77) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:40:ILE:HB | 2 | 0.22 |
| (1,75) | 1:A:39:ASN:HA | 1:A:40:ILE:H | 7 | 0.22 |
| (1,64) | 1:A:36:TRP:H | 1:A:36:TRP:HA | 4 | 0.22 |
| (1,58) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HB2 | 4 | 0.22 |
| (1,55) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:34:ASN:H | 8 | 0.22 |
| (1,448) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:28:ALA:HB1 | 3 | 0.22 |
| (1,448) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:28:ALA:HB2 | 3 | 0.22 |
| (1,448) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:28:ALA:HB3 | 3 | 0.22 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:28:ALA:H | 5 | 0.22 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:28:ALA:H | 5 | 0.22 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:28:ALA:H | 5 | 0.22 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:28:ALA:H | 6 | 0.22 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:28:ALA:H | 6 | 0.22 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:28:ALA:H | 6 | 0.22 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:28:ALA:H | 15 | 0.22 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:28:ALA:H | 15 | 0.22 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:28:ALA:H | 15 | 0.22 |
| (1,332) | 1:A:38:HIS:HA | 1:A:38:HIS:HD2 | 14 | 0.22 |
| (1,291) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:25:TRP:HE3 | 9 | 0.22 |
| (1,291) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:25:TRP:HE3 | 10 | 0.22 |
| (1,260) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:34:ASN:H | 13 | 0.22 |
| (1,260) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:34:ASN:H | 13 | 0.22 |
| (1,250) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:37:LYS:HG2 | 5 | 0.22 |
| (1,250) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:37:LYS:HG3 | 5 | 0.22 |
| (1,214) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:25:TRP:H | 10 | 0.22 |
| (1,191) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:17:ILE:H | 10 | 0.22 |
| (1,19) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:15:ASP:H | 7 | 0.22 |
| (1,19) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:15:ASP:H | 7 | 0.22 |
| (1,186) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:37:LYS:H | 3 | 0.22 |
| (1,180) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:34:ASN:H | 15 | 0.22 |
| (1,170) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:20:GLN:H | 9 | 0.22 |
| (1,170) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:20:GLN:H | 15 | 0.22 |
| (1,17) | 1:A:15:ASP:H | 1:A:15:ASP:HB3 | 14 | 0.22 |
| (1,164) | 1:A:10:TYR:HB3 | 1:A:11:SER:H | 2 | 0.22 |
| (1,157) | 1:A:18:HIS:H | 1:A:18:HIS:HB2 | 3 | 0.22 |
| (1,152) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:24:ASN:HB2 | 6 | 0.22 |
| (1,10) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:ALA:H | 3 | 0.22 |
| (2,5) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:12:ILE:HA | 9 | 0.21 |
| (2,5) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:12:ILE:HA | 9 | 0.21 |
| (2,13) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HG | 13 | 0.21 |
| (2,13) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HG | 13 | 0.21 |
| (1,95) | 1:A:1:TYR:HA | 1:A:2:ALA:H | 8 | 0.21 |
| (1,89) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HB3 | 3 | 0.21 |
| (1,75) | 1:A:39:ASN:HA | 1:A:40:ILE:H | 15 | 0.21 |
| (1,58) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HB2 | 14 | 0.21 |
| (1,434) | 1:A:13:ALA:HB1 | 1:A:14:MET:H | 9 | 0.21 |
| (1,434) | 1:A:13:ALA:HB2 | 1:A:14:MET:H | 9 | 0.21 |
| (1,434) | 1:A:13:ALA:HB3 | 1:A:14:MET:H | 9 | 0.21 |
| (1,332) | 1:A:38:HIS:HA | 1:A:38:HIS:HD2 | 8 | 0.21 |
| (1,259) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:31:GLY:H | 7 | 0.21 |
| (1,259) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:31:GLY:H | 7 | 0.21 |
| (1,237) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HD2 | 1 | 0.21 |
| (1,237) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HD3 | 1 | 0.21 |
| (1,217) | 1:A:1:TYR:HA | 1:A:3:GLU:H | 3 | 0.21 |
| (1,214) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:25:TRP:H | 9 | 0.21 |
| (1,21) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HB | 2 | 0.21 |
| (1,196) | 1:A:28:ALA:H | 1:A:29:GLN:H | 8 | 0.21 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,196) | 1:A:28:ALA:H | 1:A:29:GLN:H | 10 | 0.21 |
| (1,190) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:18:HIS:H | 2 | 0.21 |
| (1,184) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:H | 11 | 0.21 |
| (1,17) | 1:A:15:ASP:H | 1:A:15:ASP:HB3 | 7 | 0.21 |
| (1,17) | 1:A:15:ASP:H | 1:A:15:ASP:HB3 | 8 | 0.21 |
| (1,17) | 1:A:15:ASP:H | 1:A:15:ASP:HB3 | 9 | 0.21 |
| (1,165) | 1:A:9:ASP:HB2 | 1:A:11:SER:H | 13 | 0.21 |
| (1,165) | 1:A:9:ASP:HB3 | 1:A:11:SER:H | 13 | 0.21 |
| (1,157) | 1:A:18:HIS:H | 1:A:18:HIS:HB2 | 1 | 0.21 |
| (1,157) | 1:A:18:HIS:H | 1:A:18:HIS:HB2 | 2 | 0.21 |
| (1,152) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:24:ASN:HB2 | 3 | 0.21 |
| (1,147) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:24:ASN:H | 7 | 0.21 |
| (1,147) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:24:ASN:H | 9 | 0.21 |
| (1,111) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:34:ASN:H | 15 | 0.21 |
| (1,110) | 1:A:5:THR:HB | 1:A:6:PHE:H | 9 | 0.21 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:5:THR:HG21 | 14 | 0.2 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:5:THR:HG22 | 14 | 0.2 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:5:THR:HG23 | 14 | 0.2 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:5:THR:HG21 | 14 | 0.2 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:5:THR:HG22 | 14 | 0.2 |
| (2,33) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:5:THR:HG23 | 14 | 0.2 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HE1 | 15 | 0.2 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HE2 | 15 | 0.2 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HE3 | 15 | 0.2 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HE1 | 15 | 0.2 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HE2 | 15 | 0.2 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HE3 | 15 | 0.2 |
| (1,90) | 1:A:32:LYS:HB3 | 1:A:33:LYS:H | 13 | 0.2 |
| (1,75) | 1:A:39:ASN:HA | 1:A:40:ILE:H | 1 | 0.2 |
| (1,75) | 1:A:39:ASN:HA | 1:A:40:ILE:H | 6 | 0.2 |
| (1,75) | 1:A:39:ASN:HA | 1:A:40:ILE:H | 9 | 0.2 |
| (1,75) | 1:A:39:ASN:HA | 1:A:40:ILE:H | 11 | 0.2 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HD21 | 14 | 0.2 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HD22 | 14 | 0.2 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HD23 | 14 | 0.2 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HD21 | 14 | 0.2 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HD22 | 14 | 0.2 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HD23 | 14 | 0.2 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HD21 | 14 | 0.2 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HD22 | 14 | 0.2 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HD23 | 14 | 0.2 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HD11 | 14 | 0.2 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HD12 | 14 | 0.2 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HD13 | 14 | 0.2 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HD11 | 14 | 0.2 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HD12 | 14 | 0.2 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HD13 | 14 | 0.2 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HD11 | 14 | 0.2 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HD12 | 14 | 0.2 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HD13 | 14 | 0.2 |
| (1,436) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:40:ILE:HD11 | 7 | 0.2 |
| (1,436) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:40:ILE:HD12 | 7 | 0.2 |
| (1,436) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:40:ILE:HD13 | 7 | 0.2 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:28:ALA:H | 1 | 0.2 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:28:ALA:H | 1 | 0.2 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:28:ALA:H | 1 | 0.2 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD11 | 2 | 0.2 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD12 | 2 | 0.2 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD13 | 2 | 0.2 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD11 | 8 | 0.2 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD12 | 8 | 0.2 |
| (1,413) | 1:A:7:ILE:H | 1:A:7:ILE:HD13 | 8 | 0.2 |
| (1,335) | 1:A:17:ILE:HA | 1:A:18:HIS:HD2 | 13 | 0.2 |
| (1,237) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HD2 | 12 | 0.2 |
| (1,237) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HD3 | 12 | 0.2 |
| (1,220) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:36:TRP:H | 7 | 0.2 |
| (1,217) | 1:A:1:TYR:HA | 1:A:3:GLU:H | 1 | 0.2 |
| (1,193) | 1:A:13:ALA:H | 1:A:14:MET:H | 6 | 0.2 |
| (1,190) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:18:HIS:H | 6 | 0.2 |
| (1,186) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:37:LYS:H | 10 | 0.2 |
| (1,184) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:H | 14 | 0.2 |
| (1,157) | 1:A:18:HIS:H | 1:A:18:HIS:HB2 | 15 | 0.2 |
| (1,152) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:24:ASN:HB2 | 9 | 0.2 |
| (1,152) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:24:ASN:HB2 | 10 | 0.2 |
| (1,139) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:42:GLN:HB3 | 9 | 0.2 |
| (1,136) | 1:A:5:THR:HA | 1:A:8:SER:H | 1 | 0.2 |
| (1,119) | 1:A:11:SER:HA | 1:A:14:MET:H | 10 | 0.2 |
| (1,108) | 1:A:3:GLU:HA | 1:A:6:PHE:H | 4 | 0.2 |
| (2,18) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:10:TYR:HE1 | 8 | 0.19 |
| (2,18) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:10:TYR:HE2 | 8 | 0.19 |
| (2,18) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:10:TYR:HE1 | 8 | 0.19 |
| (2,18) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:10:TYR:HE2 | 8 | 0.19 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HG2 | 3 | 0.19 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:14:MET:HG3 | 3 | 0.19 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HG2 | 3 | 0.19 |
| (2,12) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:14:MET:HG3 | 3 | 0.19 |
| (1,89) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HB3 | 8 | 0.19 |
| (1,84) | 1:A:34:ASN:HA | 1:A:37:LYS:H | 12 | 0.19 |
| (1,80) | 1:A:16:LYS:HA | 1:A:19:GLN:H | 3 | 0.19 |
| (1,64) | 1:A:36:TRP:H | 1:A:36:TRP:HA | 7 | 0.19 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD21 | 8 | 0.19 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD22 | 8 | 0.19 |
| (1,477) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:26:LEU:HD23 | 8 | 0.19 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:28:ALA:H | 8 | 0.19 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:28:ALA:H | 8 | 0.19 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:28:ALA:H | 8 | 0.19 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:28:ALA:H | 9 | 0.19 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:28:ALA:H | 9 | 0.19 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:28:ALA:H | 9 | 0.19 |
| (1,380) | 1:A:36:TRP:HZ2 | 1:A:36:TRP:HE1 | 5 | 0.19 |
| (1,380) | 1:A:36:TRP:HZ2 | 1:A:36:TRP:HE1 | 9 | 0.19 |
| (1,380) | 1:A:36:TRP:HZ2 | 1:A:36:TRP:HE1 | 11 | 0.19 |
| (1,380) | 1:A:36:TRP:HZ2 | 1:A:36:TRP:HE1 | 13 | 0.19 |
| (1,380) | 1:A:36:TRP:HZ2 | 1:A:36:TRP:HE1 | 14 | 0.19 |
| (1,36) | 1:A:21:ASP:HB2 | 1:A:22:PHE:H | 6 | 0.19 |
| (1,346) | 1:A:36:TRP:H | 1:A:36:TRP:HD1 | 12 | 0.19 |
| (1,334) | 1:A:14:MET:HA | 1:A:18:HIS:HD2 | 15 | 0.19 |
| (1,272) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HG12 | 7 | 0.19 |
| (1,260) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:34:ASN:H | 3 | 0.19 |
| (1,260) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:34:ASN:H | 3 | 0.19 |
| (1,250) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:37:LYS:HG2 | 4 | 0.19 |
| (1,250) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:37:LYS:HG3 | 4 | 0.19 |
| (1,250) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:37:LYS:HG2 | 14 | 0.19 |
| (1,250) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:37:LYS:HG3 | 14 | 0.19 |
| (1,245) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD2 | 12 | 0.19 |
| (1,245) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD3 | 12 | 0.19 |
| (1,215) | 1:A:36:TRP:H | 1:A:38:HIS:H | 4 | 0.19 |
| (1,198) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:H | 1 | 0.19 |
| (1,196) | 1:A:28:ALA:H | 1:A:29:GLN:H | 7 | 0.19 |
| (1,191) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:17:ILE:H | 6 | 0.19 |
| (1,184) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:H | 6 | 0.19 |
| (1,184) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:H | 10 | 0.19 |
| (1,166) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:11:SER:H | 11 | 0.19 |
| (1,147) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:24:ASN:H | 2 | 0.19 |
| (1,132) | 1:A:27:LEU:H | 1:A:27:LEU:HA | 12 | 0.19 |
| (1,98) | 1:A:1:TYR:HB3 | 1:A:2:ALA:H | 2 | 0.18 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,89) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HB3 | 10 | 0.18 |
| (1,84) | 1:A:34:ASN:HA | 1:A:37:LYS:H | 8 | 0.18 |
| (1,75) | 1:A:39:ASN:HA | 1:A:40:ILE:H | 12 | 0.18 |
| (1,73) | 1:A:38:HIS:HB2 | 1:A:39:ASN:H | 7 | 0.18 |
| (1,73) | 1:A:38:HIS:HB3 | 1:A:39:ASN:H | 7 | 0.18 |
| (1,64) | 1:A:36:TRP:H | 1:A:36:TRP:HA | 10 | 0.18 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:28:ALA:HB1 | 14 | 0.18 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:28:ALA:HB2 | 14 | 0.18 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:28:ALA:HB3 | 14 | 0.18 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:28:ALA:HB1 | 14 | 0.18 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:28:ALA:HB2 | 14 | 0.18 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:28:ALA:HB3 | 14 | 0.18 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:28:ALA:HB1 | 14 | 0.18 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:28:ALA:HB2 | 14 | 0.18 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:28:ALA:HB3 | 14 | 0.18 |
| (1,397) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG12 | 10 | 0.18 |
| (1,397) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:ILE:HG13 | 10 | 0.18 |
| (1,397) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG12 | 10 | 0.18 |
| (1,397) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:ILE:HG13 | 10 | 0.18 |
| (1,385) | 1:A:25:TRP:HE1 | 1:A:29:GLN:HE22 | 9 | 0.18 |
| (1,385) | 1:A:25:TRP:HE1 | 1:A:29:GLN:HE21 | 9 | 0.18 |
| (1,380) | 1:A:36:TRP:HZ2 | 1:A:36:TRP:HE1 | 1 | 0.18 |
| (1,380) | 1:A:36:TRP:HZ2 | 1:A:36:TRP:HE1 | 3 | 0.18 |
| (1,380) | 1:A:36:TRP:HZ2 | 1:A:36:TRP:HE1 | 4 | 0.18 |
| (1,380) | 1:A:36:TRP:HZ2 | 1:A:36:TRP:HE1 | 6 | 0.18 |
| (1,380) | 1:A:36:TRP:HZ2 | 1:A:36:TRP:HE1 | 7 | 0.18 |
| (1,380) | 1:A:36:TRP:HZ2 | 1:A:36:TRP:HE1 | 8 | 0.18 |
| (1,380) | 1:A:36:TRP:HZ2 | 1:A:36:TRP:HE1 | 10 | 0.18 |
| (1,380) | 1:A:36:TRP:HZ2 | 1:A:36:TRP:HE1 | 12 | 0.18 |
| (1,380) | 1:A:36:TRP:HZ2 | 1:A:36:TRP:HE1 | 15 | 0.18 |
| (1,346) | 1:A:36:TRP:H | 1:A:36:TRP:HD1 | 1 | 0.18 |
| (1,325) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:18:HIS:HD2 | 11 | 0.18 |
| (1,325) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:18:HIS:HD2 | 11 | 0.18 |
| (1,219) | 1:A:30:LYS:HA | 1:A:32:LYS:H | 3 | 0.18 |
| (1,212) | 1:A:6:PHE:HA | 1:A:10:TYR:H | 9 | 0.18 |
| (1,21) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HB | 14 | 0.18 |
| (1,206) | 1:A:7:ILE:HB | 1:A:9:ASP:H | 1 | 0.18 |
| (1,203) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HB | 11 | 0.18 |
| (1,199) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:ALA:H | 4 | 0.18 |
| (1,170) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:20:GLN:H | 12 | 0.18 |
| (1,17) | 1:A:15:ASP:H | 1:A:15:ASP:HB3 | 10 | 0.18 |
| (1,169) | 1:A:5:THR:H | 1:A:6:PHE:H | 8 | 0.18 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,157) | 1:A:18:HIS:H | 1:A:18:HIS:HB2 | 11 | 0.18 |
| (1,157) | 1:A:18:HIS:H | 1:A:18:HIS:HB2 | 12 | 0.18 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:6:PHE:HB2 | 15 | 0.17 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE1 | 1:A:6:PHE:HB3 | 15 | 0.17 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 15 | 0.17 |
| (2,4) | 1:A:1:TYR:HE2 | 1:A:6:PHE:HB3 | 15 | 0.17 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HE1 | 3 | 0.17 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HE2 | 3 | 0.17 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HE3 | 3 | 0.17 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HE1 | 3 | 0.17 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HE2 | 3 | 0.17 |
| (2,21) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HE3 | 3 | 0.17 |
| (1,95) | 1:A:1:TYR:HA | 1:A:2:ALA:H | 11 | 0.17 |
| (1,94) | 1:A:24:ASN:HB2 | 1:A:25:TRP:H | 3 | 0.17 |
| (1,77) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:40:ILE:HB | 6 | 0.17 |
| (1,66) | 1:A:35:ASP:HA | 1:A:36:TRP:H | 4 | 0.17 |
| (1,64) | 1:A:36:TRP:H | 1:A:36:TRP:HA | 2 | 0.17 |
| (1,64) | 1:A:36:TRP:H | 1:A:36:TRP:HA | 11 | 0.17 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:28:ALA:HB1 | 2 | 0.17 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:28:ALA:HB2 | 2 | 0.17 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:28:ALA:HB3 | 2 | 0.17 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:28:ALA:HB1 | 2 | 0.17 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:28:ALA:HB2 | 2 | 0.17 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:28:ALA:HB3 | 2 | 0.17 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:28:ALA:HB1 | 2 | 0.17 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:28:ALA:HB2 | 2 | 0.17 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:28:ALA:HB3 | 2 | 0.17 |
| (1,437) | 1:A:17:ILE:HG21 | 1:A:18:HIS:H | 11 | 0.17 |
| (1,437) | 1:A:17:ILE:HG22 | 1:A:18:HIS:H | 11 | 0.17 |
| (1,437) | 1:A:17:ILE:HG23 | 1:A:18:HIS:H | 11 | 0.17 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:28:ALA:H | 12 | 0.17 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:28:ALA:H | 12 | 0.17 |
| (1,431) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:28:ALA:H | 12 | 0.17 |
| (1,41) | 1:A:25:TRP:H | 1:A:25:TRP:HB3 | 8 | 0.17 |
| (1,335) | 1:A:17:ILE:HA | 1:A:18:HIS:HD2 | 12 | 0.17 |
| (1,184) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:H | 2 | 0.17 |
| (1,175) | 1:A:6:PHE:H | 1:A:7:ILE:H | 9 | 0.17 |
| (1,157) | 1:A:18:HIS:H | 1:A:18:HIS:HB2 | 4 | 0.17 |
| (1,157) | 1:A:18:HIS:H | 1:A:18:HIS:HB2 | 6 | 0.17 |
| (1,152) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:24:ASN:HB2 | 11 | 0.17 |
| (1,140) | 1:A:41:THR:H | 1:A:41:THR:HB | 4 | 0.17 |
| (1,110) | 1:A:5:THR:HB | 1:A:6:PHE:H | 3 | 0.17 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,95) | 1:A:1:TYR:HA | 1:A:2:ALA:H | 9 | 0.16 |
| (1,90) | 1:A:32:LYS:HB3 | 1:A:33:LYS:H | 12 | 0.16 |
| (1,89) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HB3 | 2 | 0.16 |
| (1,89) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HB3 | 7 | 0.16 |
| (1,75) | 1:A:39:ASN:HA | 1:A:40:ILE:H | 13 | 0.16 |
| (1,73) | 1:A:38:HIS:HB2 | 1:A:39:ASN:H | 5 | 0.16 |
| (1,73) | 1:A:38:HIS:HB3 | 1:A:39:ASN:H | 5 | 0.16 |
| (1,64) | 1:A:36:TRP:H | 1:A:36:TRP:HA | 1 | 0.16 |
| (1,64) | 1:A:36:TRP:H | 1:A:36:TRP:HA | 15 | 0.16 |
| (1,58) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HB2 | 2 | 0.16 |
| (1,58) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HB2 | 12 | 0.16 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG21 | 13 | 0.16 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG22 | 13 | 0.16 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB2 | 1:A:17:ILE:HG23 | 13 | 0.16 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG21 | 13 | 0.16 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG22 | 13 | 0.16 |
| (1,453) | 1:A:14:MET:HB3 | 1:A:17:ILE:HG23 | 13 | 0.16 |
| (1,416) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HD11 | 15 | 0.16 |
| (1,416) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HD12 | 15 | 0.16 |
| (1,416) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HD13 | 15 | 0.16 |
| (1,380) | 1:A:36:TRP:HZ2 | 1:A:36:TRP:HE1 | 2 | 0.16 |
| (1,36) | 1:A:21:ASP:HB2 | 1:A:22:PHE:H | 15 | 0.16 |
| (1,293) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:22:PHE:HE1 | 6 | 0.16 |
| (1,293) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:22:PHE:HE2 | 6 | 0.16 |
| (1,291) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:25:TRP:HE3 | 14 | 0.16 |
| (1,259) | 1:A:30:LYS:HD2 | 1:A:31:GLY:H | 1 | 0.16 |
| (1,259) | 1:A:30:LYS:HD3 | 1:A:31:GLY:H | 1 | 0.16 |
| (1,253) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HG2 | 10 | 0.16 |
| (1,253) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HG3 | 10 | 0.16 |
| (1,237) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HD2 | 9 | 0.16 |
| (1,237) | 1:A:16:LYS:H | 1:A:16:LYS:HD3 | 9 | 0.16 |
| (1,215) | 1:A:36:TRP:H | 1:A:38:HIS:H | 7 | 0.16 |
| (1,214) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:25:TRP:H | 1 | 0.16 |
| (1,199) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:ALA:H | 2 | 0.16 |
| (1,197) | 1:A:8:SER:H | 1:A:9:ASP:H | 8 | 0.16 |
| (1,190) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:18:HIS:H | 15 | 0.16 |
| (1,184) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:H | 9 | 0.16 |
| (1,183) | 1:A:9:ASP:H | 1:A:10:TYR:H | 2 | 0.16 |
| (1,166) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:11:SER:H | 14 | 0.16 |
| (1,157) | 1:A:18:HIS:H | 1:A:18:HIS:HB2 | 13 | 0.16 |
| (1,137) | 1:A:38:HIS:HA | 1:A:40:ILE:H | 12 | 0.16 |
| (1,129) | 1:A:31:GLY:HA2 | 1:A:32:LYS:H | 11 | 0.16 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,129) | 1:A:31:GLY:HA3 | 1:A:32:LYS:H | 11 | 0.16 |
| (1,110) | 1:A:5:THR:HB | 1:A:6:PHE:H | 12 | 0.16 |
| (1,108) | 1:A:3:GLU:HA | 1:A:6:PHE:H | 14 | 0.16 |
| (1,95) | 1:A:1:TYR:HA | 1:A:2:ALA:H | 12 | 0.15 |
| (1,94) | 1:A:24:ASN:HB2 | 1:A:25:TRP:H | 5 | 0.15 |
| (1,94) | 1:A:24:ASN:HB2 | 1:A:25:TRP:H | 7 | 0.15 |
| (1,94) | 1:A:24:ASN:HB2 | 1:A:25:TRP:H | 11 | 0.15 |
| (1,89) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HB3 | 6 | 0.15 |
| (1,79) | 1:A:14:MET:HA | 1:A:17:ILE:H | 15 | 0.15 |
| (1,73) | 1:A:38:HIS:HB2 | 1:A:39:ASN:H | 2 | 0.15 |
| (1,73) | 1:A:38:HIS:HB3 | 1:A:39:ASN:H | 2 | 0.15 |
| (1,67) | 1:A:36:TRP:HA | 1:A:37:LYS:H | 11 | 0.15 |
| (1,64) | 1:A:36:TRP:H | 1:A:36:TRP:HA | 9 | 0.15 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:28:ALA:HB1 | 1 | 0.15 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:28:ALA:HB2 | 1 | 0.15 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:28:ALA:HB3 | 1 | 0.15 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:28:ALA:HB1 | 1 | 0.15 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:28:ALA:HB2 | 1 | 0.15 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:28:ALA:HB3 | 1 | 0.15 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:28:ALA:HB1 | 1 | 0.15 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:28:ALA:HB2 | 1 | 0.15 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:28:ALA:HB3 | 1 | 0.15 |
| (1,45) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HB2 | 12 | 0.15 |
| (1,45) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HB3 | 12 | 0.15 |
| (1,41) | 1:A:25:TRP:H | 1:A:25:TRP:HB3 | 13 | 0.15 |
| (1,41) | 1:A:25:TRP:H | 1:A:25:TRP:HB3 | 14 | 0.15 |
| (1,409) | 1:A:2:ALA:HB1 | 1:A:3:GLU:H | 4 | 0.15 |
| (1,409) | 1:A:2:ALA:HB2 | 1:A:3:GLU:H | 4 | 0.15 |
| (1,409) | 1:A:2:ALA:HB3 | 1:A:3:GLU:H | 4 | 0.15 |
| (1,402) | 1:A:33:LYS:HB3 | 1:A:33:LYS:HD2 | 8 | 0.15 |
| (1,402) | 1:A:33:LYS:HB3 | 1:A:33:LYS:HD3 | 8 | 0.15 |
| (1,346) | 1:A:36:TRP:H | 1:A:36:TRP:HD1 | 3 | 0.15 |
| (1,293) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:22:PHE:HE1 | 4 | 0.15 |
| (1,293) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:22:PHE:HE2 | 4 | 0.15 |
| (1,293) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:22:PHE:HE1 | 9 | 0.15 |
| (1,293) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:22:PHE:HE2 | 9 | 0.15 |
| (1,250) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:37:LYS:HG2 | 13 | 0.15 |
| (1,250) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:37:LYS:HG3 | 13 | 0.15 |
| (1,231) | 1:A:3:GLU:H | 1:A:3:GLU:HG2 | 9 | 0.15 |
| (1,231) | 1:A:3:GLU:H | 1:A:3:GLU:HG3 | 9 | 0.15 |
| (1,214) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:25:TRP:H | 3 | 0.15 |
| (1,198) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:H | 6 | 0.15 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,197) | 1:A:8:SER:H | 1:A:9:ASP:H | 6 | 0.15 |
| (1,190) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:18:HIS:H | 8 | 0.15 |
| (1,184) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:H | 4 | 0.15 |
| (1,183) | 1:A:9:ASP:H | 1:A:10:TYR:H | 6 | 0.15 |
| (1,147) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:24:ASN:H | 14 | 0.15 |
| (1,135) | 1:A:5:THR:HB | 1:A:8:SER:H | 14 | 0.15 |
| (1,132) | 1:A:27:LEU:H | 1:A:27:LEU:HA | 1 | 0.15 |
| (1,132) | 1:A:27:LEU:H | 1:A:27:LEU:HA | 2 | 0.15 |
| (1,132) | 1:A:27:LEU:H | 1:A:27:LEU:HA | 3 | 0.15 |
| (1,132) | 1:A:27:LEU:H | 1:A:27:LEU:HA | 5 | 0.15 |
| (1,132) | 1:A:27:LEU:H | 1:A:27:LEU:HA | 9 | 0.15 |
| (1,132) | 1:A:27:LEU:H | 1:A:27:LEU:HA | 13 | 0.15 |
| (1,119) | 1:A:11:SER:HA | 1:A:14:MET:H | 15 | 0.15 |
| (1,115) | 1:A:13:ALA:HA | 1:A:14:MET:H | 14 | 0.15 |
| (1,102) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HA | 15 | 0.15 |
| (1,95) | 1:A:1:TYR:HA | 1:A:2:ALA:H | 3 | 0.14 |
| (1,95) | 1:A:1:TYR:HA | 1:A:2:ALA:H | 10 | 0.14 |
| (1,95) | 1:A:1:TYR:HA | 1:A:2:ALA:H | 14 | 0.14 |
| (1,94) | 1:A:24:ASN:HB2 | 1:A:25:TRP:H | 2 | 0.14 |
| (1,92) | 1:A:9:ASP:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 3 | 0.14 |
| (1,92) | 1:A:9:ASP:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 3 | 0.14 |
| (1,79) | 1:A:14:MET:HA | 1:A:17:ILE:H | 4 | 0.14 |
| (1,75) | 1:A:39:ASN:HA | 1:A:40:ILE:H | 2 | 0.14 |
| (1,67) | 1:A:36:TRP:HA | 1:A:37:LYS:H | 15 | 0.14 |
| (1,64) | 1:A:36:TRP:H | 1:A:36:TRP:HA | 6 | 0.14 |
| (1,64) | 1:A:36:TRP:H | 1:A:36:TRP:HA | 12 | 0.14 |
| (1,64) | 1:A:36:TRP:H | 1:A:36:TRP:HA | 14 | 0.14 |
| (1,55) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:34:ASN:H | 12 | 0.14 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HD21 | 10 | 0.14 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HD22 | 10 | 0.14 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HD23 | 10 | 0.14 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HD21 | 10 | 0.14 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HD22 | 10 | 0.14 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HD23 | 10 | 0.14 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HD21 | 10 | 0.14 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HD22 | 10 | 0.14 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HD23 | 10 | 0.14 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HD11 | 10 | 0.14 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HD12 | 10 | 0.14 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:26:LEU:HD13 | 10 | 0.14 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HD11 | 10 | 0.14 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HD12 | 10 | 0.14 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:26:LEU:HD13 | 10 | 0.14 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HD11 | 10 | 0.14 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HD12 | 10 | 0.14 |
| (1,471) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:26:LEU:HD13 | 10 | 0.14 |
| (1,41) | 1:A:25:TRP:H | 1:A:25:TRP:HB3 | 5 | 0.14 |
| (1,402) | 1:A:33:LYS:HB3 | 1:A:33:LYS:HD2 | 13 | 0.14 |
| (1,402) | 1:A:33:LYS:HB3 | 1:A:33:LYS:HD3 | 13 | 0.14 |
| (1,36) | 1:A:21:ASP:HB2 | 1:A:22:PHE:H | 13 | 0.14 |
| (1,338) | 1:A:36:TRP:HE3 | 1:A:37:LYS:H | 13 | 0.14 |
| (1,293) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:22:PHE:HE1 | 3 | 0.14 |
| (1,293) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:22:PHE:HE2 | 3 | 0.14 |
| (1,293) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:22:PHE:HE1 | 10 | 0.14 |
| (1,293) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:22:PHE:HE2 | 10 | 0.14 |
| (1,293) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:22:PHE:HE1 | 11 | 0.14 |
| (1,293) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:22:PHE:HE2 | 11 | 0.14 |
| (1,293) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:22:PHE:HE1 | 12 | 0.14 |
| (1,293) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:22:PHE:HE2 | 12 | 0.14 |
| (1,250) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:37:LYS:HG2 | 9 | 0.14 |
| (1,250) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:37:LYS:HG3 | 9 | 0.14 |
| (1,231) | 1:A:3:GLU:H | 1:A:3:GLU:HG2 | 7 | 0.14 |
| (1,231) | 1:A:3:GLU:H | 1:A:3:GLU:HG3 | 7 | 0.14 |
| (1,228) | 1:A:5:THR:H | 1:A:5:THR:HA | 8 | 0.14 |
| (1,228) | 1:A:5:THR:H | 1:A:5:THR:HA | 14 | 0.14 |
| (1,223) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:36:TRP:H | 2 | 0.14 |
| (1,220) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:36:TRP:H | 9 | 0.14 |
| (1,21) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HB | 6 | 0.14 |
| (1,196) | 1:A:28:ALA:H | 1:A:29:GLN:H | 14 | 0.14 |
| (1,188) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:31:GLY:H | 7 | 0.14 |
| (1,187) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:38:HIS:H | 10 | 0.14 |
| (1,184) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:H | 3 | 0.14 |
| (1,184) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:H | 5 | 0.14 |
| (1,174) | 1:A:38:HIS:H | 1:A:39:ASN:H | 4 | 0.14 |
| (1,170) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:20:GLN:H | 14 | 0.14 |
| (1,143) | 1:A:8:SER:HA | 1:A:9:ASP:H | 13 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:27:LEU:H | 1:A:27:LEU:HA | 4 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:27:LEU:H | 1:A:27:LEU:HA | 7 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:27:LEU:H | 1:A:27:LEU:HA | 10 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:27:LEU:H | 1:A:27:LEU:HA | 11 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:27:LEU:H | 1:A:27:LEU:HA | 14 | 0.14 |
| (1,132) | 1:A:27:LEU:H | 1:A:27:LEU:HA | 15 | 0.14 |
| (1,102) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HA | 11 | 0.14 |
| (2,11) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HG2 | 12 | 0.13 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (2,11) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:14:MET:HG3 | 12 | 0.13 |
| (2,11) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HG2 | 12 | 0.13 |
| (2,11) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:14:MET:HG3 | 12 | 0.13 |
| (1,94) | 1:A:24:ASN:HB2 | 1:A:25:TRP:H | 9 | 0.13 |
| (1,92) | 1:A:9:ASP:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 9 | 0.13 |
| (1,92) | 1:A:9:ASP:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 9 | 0.13 |
| (1,79) | 1:A:14:MET:HA | 1:A:17:ILE:H | 11 | 0.13 |
| (1,77) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:40:ILE:HB | 15 | 0.13 |
| (1,67) | 1:A:36:TRP:HA | 1:A:37:LYS:H | 1 | 0.13 |
| (1,67) | 1:A:36:TRP:HA | 1:A:37:LYS:H | 4 | 0.13 |
| (1,67) | 1:A:36:TRP:HA | 1:A:37:LYS:H | 5 | 0.13 |
| (1,67) | 1:A:36:TRP:HA | 1:A:37:LYS:H | 7 | 0.13 |
| (1,67) | 1:A:36:TRP:HA | 1:A:37:LYS:H | 10 | 0.13 |
| (1,64) | 1:A:36:TRP:H | 1:A:36:TRP:HA | 8 | 0.13 |
| (1,61) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:35:ASP:HB3 | 7 | 0.13 |
| (1,61) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:35:ASP:HB2 | 7 | 0.13 |
| (1,61) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:35:ASP:HB3 | 9 | 0.13 |
| (1,61) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:35:ASP:HB2 | 9 | 0.13 |
| (1,58) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HB2 | 5 | 0.13 |
| (1,58) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HB2 | 11 | 0.13 |
| (1,448) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:28:ALA:HB1 | 6 | 0.13 |
| (1,448) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:28:ALA:HB2 | 6 | 0.13 |
| (1,448) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:28:ALA:HB3 | 6 | 0.13 |
| (1,41) | 1:A:25:TRP:H | 1:A:25:TRP:HB3 | 15 | 0.13 |
| (1,383) | 1:A:36:TRP:HD1 | 1:A:36:TRP:HE1 | 14 | 0.13 |
| (1,382) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:25:TRP:HE1 | 4 | 0.13 |
| (1,36) | 1:A:21:ASP:HB2 | 1:A:22:PHE:H | 11 | 0.13 |
| (1,293) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:22:PHE:HE1 | 5 | 0.13 |
| (1,293) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:22:PHE:HE2 | 5 | 0.13 |
| (1,293) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:22:PHE:HE1 | 13 | 0.13 |
| (1,293) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:22:PHE:HE2 | 13 | 0.13 |
| (1,293) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:22:PHE:HE1 | 14 | 0.13 |
| (1,293) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:22:PHE:HE2 | 14 | 0.13 |
| (1,231) | 1:A:3:GLU:H | 1:A:3:GLU:HG2 | 4 | 0.13 |
| (1,231) | 1:A:3:GLU:H | 1:A:3:GLU:HG3 | 4 | 0.13 |
| (1,228) | 1:A:5:THR:H | 1:A:5:THR:HA | 6 | 0.13 |
| (1,228) | 1:A:5:THR:H | 1:A:5:THR:HA | 7 | 0.13 |
| (1,220) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:36:TRP:H | 2 | 0.13 |
| (1,21) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HB | 7 | 0.13 |
| (1,21) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HB | 15 | 0.13 |
| (1,203) | 1:A:11:SER:H | 1:A:12:ILE:HB | 15 | 0.13 |
| (1,199) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:ALA:H | 8 | 0.13 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,187) | 1:A:37:LYS:H | 1:A:38:HIS:H | 7 | 0.13 |
| (1,184) | 1:A:22:PHE:H | 1:A:23:VAL:H | 7 | 0.13 |
| (1,165) | 1:A:9:ASP:HB2 | 1:A:11:SER:H | 14 | 0.13 |
| (1,165) | 1:A:9:ASP:HB3 | 1:A:11:SER:H | 14 | 0.13 |
| (1,150) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:42:GLN:HB2 | 11 | 0.13 |
| (1,147) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:24:ASN:H | 13 | 0.13 |
| (1,143) | 1:A:8:SER:HA | 1:A:9:ASP:H | 5 | 0.13 |
| (1,143) | 1:A:8:SER:HA | 1:A:9:ASP:H | 9 | 0.13 |
| (1,143) | 1:A:8:SER:HA | 1:A:9:ASP:H | 14 | 0.13 |
| (1,135) | 1:A:5:THR:HB | 1:A:8:SER:H | 2 | 0.13 |
| (1,132) | 1:A:27:LEU:H | 1:A:27:LEU:HA | 8 | 0.13 |
| (1,95) | 1:A:1:TYR:HA | 1:A:2:ALA:H | 2 | 0.12 |
| (1,94) | 1:A:24:ASN:HB2 | 1:A:25:TRP:H | 1 | 0.12 |
| (1,90) | 1:A:32:LYS:HB3 | 1:A:33:LYS:H | 4 | 0.12 |
| (1,77) | 1:A:40:ILE:H | 1:A:40:ILE:HB | 9 | 0.12 |
| (1,67) | 1:A:36:TRP:HA | 1:A:37:LYS:H | 2 | 0.12 |
| (1,67) | 1:A:36:TRP:HA | 1:A:37:LYS:H | 13 | 0.12 |
| (1,67) | 1:A:36:TRP:HA | 1:A:37:LYS:H | 14 | 0.12 |
| (1,64) | 1:A:36:TRP:H | 1:A:36:TRP:HA | 5 | 0.12 |
| (1,61) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:35:ASP:HB3 | 2 | 0.12 |
| (1,61) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:35:ASP:HB2 | 2 | 0.12 |
| (1,61) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:35:ASP:HB3 | 12 | 0.12 |
| (1,61) | 1:A:35:ASP:H | 1:A:35:ASP:HB2 | 12 | 0.12 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG21 | 9 | 0.12 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG22 | 9 | 0.12 |
| (1,482) | 1:A:2:ALA:H | 1:A:5:THR:HG23 | 9 | 0.12 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:28:ALA:HB1 | 8 | 0.12 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:28:ALA:HB2 | 8 | 0.12 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD21 | 1:A:28:ALA:HB3 | 8 | 0.12 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:28:ALA:HB1 | 8 | 0.12 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:28:ALA:HB2 | 8 | 0.12 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD22 | 1:A:28:ALA:HB3 | 8 | 0.12 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:28:ALA:HB1 | 8 | 0.12 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:28:ALA:HB2 | 8 | 0.12 |
| (1,470) | 1:A:27:LEU:HD23 | 1:A:28:ALA:HB3 | 8 | 0.12 |
| (1,45) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HB2 | 6 | 0.12 |
| (1,45) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HB3 | 6 | 0.12 |
| (1,383) | 1:A:36:TRP:HD1 | 1:A:36:TRP:HE1 | 3 | 0.12 |
| (1,383) | 1:A:36:TRP:HD1 | 1:A:36:TRP:HE1 | 5 | 0.12 |
| (1,383) | 1:A:36:TRP:HD1 | 1:A:36:TRP:HE1 | 8 | 0.12 |
| (1,383) | 1:A:36:TRP:HD1 | 1:A:36:TRP:HE1 | 9 | 0.12 |
| (1,383) | 1:A:36:TRP:HD1 | 1:A:36:TRP:HE1 | 12 | 0.12 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,383) | 1:A:36:TRP:HD1 | 1:A:36:TRP:HE1 | 13 | 0.12 |
| (1,382) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:25:TRP:HE1 | 1 | 0.12 |
| (1,382) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:25:TRP:HE1 | 2 | 0.12 |
| (1,382) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:25:TRP:HE1 | 3 | 0.12 |
| (1,382) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:25:TRP:HE1 | 5 | 0.12 |
| (1,382) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:25:TRP:HE1 | 6 | 0.12 |
| (1,382) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:25:TRP:HE1 | 9 | 0.12 |
| (1,382) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:25:TRP:HE1 | 11 | 0.12 |
| (1,382) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:25:TRP:HE1 | 13 | 0.12 |
| (1,382) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:25:TRP:HE1 | 14 | 0.12 |
| (1,376) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HE22 | 4 | 0.12 |
| (1,376) | 1:A:29:GLN:H | 1:A:29:GLN:HE21 | 4 | 0.12 |
| (1,348) | 1:A:36:TRP:HD1 | 1:A:37:LYS:H | 9 | 0.12 |
| (1,346) | 1:A:36:TRP:H | 1:A:36:TRP:HD1 | 10 | 0.12 |
| (1,332) | 1:A:38:HIS:HA | 1:A:38:HIS:HD2 | 15 | 0.12 |
| (1,305) | 1:A:24:ASN:HB2 | 1:A:24:ASN:HD21 | 7 | 0.12 |
| (1,305) | 1:A:24:ASN:HB3 | 1:A:24:ASN:HD21 | 7 | 0.12 |
| (1,305) | 1:A:24:ASN:HB2 | 1:A:24:ASN:HD21 | 15 | 0.12 |
| (1,305) | 1:A:24:ASN:HB3 | 1:A:24:ASN:HD21 | 15 | 0.12 |
| (1,293) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:22:PHE:HE1 | 1 | 0.12 |
| (1,293) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:22:PHE:HE2 | 1 | 0.12 |
| (1,293) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:22:PHE:HE1 | 2 | 0.12 |
| (1,293) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:22:PHE:HE2 | 2 | 0.12 |
| (1,293) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:22:PHE:HE1 | 7 | 0.12 |
| (1,293) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:22:PHE:HE2 | 7 | 0.12 |
| (1,253) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HG2 | 11 | 0.12 |
| (1,253) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HG3 | 11 | 0.12 |
| (1,218) | 1:A:29:GLN:HA | 1:A:31:GLY:H | 8 | 0.12 |
| (1,193) | 1:A:13:ALA:H | 1:A:14:MET:H | 1 | 0.12 |
| (1,190) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:18:HIS:H | 3 | 0.12 |
| (1,188) | 1:A:30:LYS:H | 1:A:31:GLY:H | 2 | 0.12 |
| (1,170) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:20:GLN:H | 11 | 0.12 |
| (1,164) | 1:A:10:TYR:HB3 | 1:A:11:SER:H | 3 | 0.12 |
| (1,147) | 1:A:23:VAL:HB | 1:A:24:ASN:H | 10 | 0.12 |
| (1,143) | 1:A:8:SER:HA | 1:A:9:ASP:H | 12 | 0.12 |
| (1,139) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:42:GLN:HB3 | 3 | 0.12 |
| (1,111) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:34:ASN:H | 11 | 0.12 |
| (1,102) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HA | 9 | 0.12 |
| (1,102) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HA | 12 | 0.12 |
| (1,102) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HA | 14 | 0.12 |
| (2,7) | 1:A:1:TYR:HD1 | 1:A:2:ALA:HA | 11 | 0.11 |
| (2,7) | 1:A:1:TYR:HD2 | 1:A:2:ALA:HA | 11 | 0.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (2,13) | 1:A:22:PHE:HE1 | 1:A:26:LEU:HG | 3 | 0.11 |
| (2,13) | 1:A:22:PHE:HE2 | 1:A:26:LEU:HG | 3 | 0.11 |
| (1,95) | 1:A:1:TYR:HA | 1:A:2:ALA:H | 4 | 0.11 |
| (1,95) | 1:A:1:TYR:HA | 1:A:2:ALA:H | 5 | 0.11 |
| (1,95) | 1:A:1:TYR:HA | 1:A:2:ALA:H | 6 | 0.11 |
| (1,95) | 1:A:1:TYR:HA | 1:A:2:ALA:H | 13 | 0.11 |
| (1,95) | 1:A:1:TYR:HA | 1:A:2:ALA:H | 15 | 0.11 |
| (1,73) | 1:A:38:HIS:HB2 | 1:A:39:ASN:H | 4 | 0.11 |
| (1,73) | 1:A:38:HIS:HB3 | 1:A:39:ASN:H | 4 | 0.11 |
| (1,72) | 1:A:38:HIS:H | 1:A:38:HIS:HA | 1 | 0.11 |
| (1,72) | 1:A:38:HIS:H | 1:A:38:HIS:HA | 3 | 0.11 |
| (1,69) | 1:A:37:LYS:HA | 1:A:38:HIS:H | 5 | 0.11 |
| (1,67) | 1:A:36:TRP:HA | 1:A:37:LYS:H | 3 | 0.11 |
| (1,67) | 1:A:36:TRP:HA | 1:A:37:LYS:H | 8 | 0.11 |
| (1,67) | 1:A:36:TRP:HA | 1:A:37:LYS:H | 9 | 0.11 |
| (1,67) | 1:A:36:TRP:HA | 1:A:37:LYS:H | 12 | 0.11 |
| (1,64) | 1:A:36:TRP:H | 1:A:36:TRP:HA | 3 | 0.11 |
| (1,402) | 1:A:33:LYS:HB3 | 1:A:33:LYS:HD2 | 2 | 0.11 |
| (1,402) | 1:A:33:LYS:HB3 | 1:A:33:LYS:HD3 | 2 | 0.11 |
| (1,402) | 1:A:33:LYS:HB3 | 1:A:33:LYS:HD2 | 9 | 0.11 |
| (1,402) | 1:A:33:LYS:HB3 | 1:A:33:LYS:HD3 | 9 | 0.11 |
| (1,383) | 1:A:36:TRP:HD1 | 1:A:36:TRP:HE1 | 1 | 0.11 |
| (1,383) | 1:A:36:TRP:HD1 | 1:A:36:TRP:HE1 | 2 | 0.11 |
| (1,383) | 1:A:36:TRP:HD1 | 1:A:36:TRP:HE1 | 6 | 0.11 |
| (1,383) | 1:A:36:TRP:HD1 | 1:A:36:TRP:HE1 | 7 | 0.11 |
| (1,383) | 1:A:36:TRP:HD1 | 1:A:36:TRP:HE1 | 10 | 0.11 |
| (1,383) | 1:A:36:TRP:HD1 | 1:A:36:TRP:HE1 | 11 | 0.11 |
| (1,383) | 1:A:36:TRP:HD1 | 1:A:36:TRP:HE1 | 15 | 0.11 |
| (1,382) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:25:TRP:HE1 | 7 | 0.11 |
| (1,382) | 1:A:25:TRP:HD1 | 1:A:25:TRP:HE1 | 10 | 0.11 |
| (1,364) | 1:A:25:TRP:HZ3 | 1:A:25:TRP:HE3 | 4 | 0.11 |
| (1,364) | 1:A:25:TRP:HZ3 | 1:A:25:TRP:HE3 | 13 | 0.11 |
| (1,360) | 1:A:25:TRP:HH2 | 1:A:25:TRP:HZ2 | 4 | 0.11 |
| (1,356) | 1:A:36:TRP:HZ3 | 1:A:36:TRP:HE3 | 4 | 0.11 |
| (1,356) | 1:A:36:TRP:HZ3 | 1:A:36:TRP:HE3 | 5 | 0.11 |
| (1,356) | 1:A:36:TRP:HZ3 | 1:A:36:TRP:HE3 | 13 | 0.11 |
| (1,338) | 1:A:36:TRP:HE3 | 1:A:37:LYS:H | 4 | 0.11 |
| (1,305) | 1:A:24:ASN:HB2 | 1:A:24:ASN:HD21 | 3 | 0.11 |
| (1,305) | 1:A:24:ASN:HB3 | 1:A:24:ASN:HD21 | 3 | 0.11 |
| (1,293) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:22:PHE:HE1 | 8 | 0.11 |
| (1,293) | 1:A:22:PHE:HA | 1:A:22:PHE:HE2 | 8 | 0.11 |
| (1,286) | 1:A:25:TRP:HB2 | 1:A:25:TRP:HE3 | 8 | 0.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,286) | 1:A:25:TRP:HB3 | 1:A:25:TRP:HE3 | 8 | 0.11 |
| (1,286) | 1:A:25:TRP:HB2 | 1:A:25:TRP:HE3 | 12 | 0.11 |
| (1,286) | 1:A:25:TRP:HB3 | 1:A:25:TRP:HE3 | 12 | 0.11 |
| (1,278) | 1:A:18:HIS:HA | 1:A:18:HIS:HD2 | 9 | 0.11 |
| (1,249) | 1:A:37:LYS:HD2 | 1:A:38:HIS:H | 6 | 0.11 |
| (1,249) | 1:A:37:LYS:HD3 | 1:A:38:HIS:H | 6 | 0.11 |
| (1,235) | 1:A:14:MET:HG2 | 1:A:15:ASP:H | 2 | 0.11 |
| (1,235) | 1:A:14:MET:HG3 | 1:A:15:ASP:H | 2 | 0.11 |
| (1,230) | 1:A:15:ASP:HA | 1:A:18:HIS:H | 9 | 0.11 |
| (1,228) | 1:A:5:THR:H | 1:A:5:THR:HA | 10 | 0.11 |
| (1,219) | 1:A:30:LYS:HA | 1:A:32:LYS:H | 14 | 0.11 |
| (1,21) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HB | 1 | 0.11 |
| (1,21) | 1:A:17:ILE:H | 1:A:17:ILE:HB | 5 | 0.11 |
| (1,197) | 1:A:8:SER:H | 1:A:9:ASP:H | 4 | 0.11 |
| (1,181) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:35:ASP:H | 12 | 0.11 |
| (1,178) | 1:A:34:ASN:H | 1:A:36:TRP:H | 13 | 0.11 |
| (1,170) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:20:GLN:H | 4 | 0.11 |
| (1,170) | 1:A:19:GLN:H | 1:A:20:GLN:H | 10 | 0.11 |
| (1,143) | 1:A:8:SER:HA | 1:A:9:ASP:H | 2 | 0.11 |
| (1,143) | 1:A:8:SER:HA | 1:A:9:ASP:H | 7 | 0.11 |
| (1,143) | 1:A:8:SER:HA | 1:A:9:ASP:H | 10 | 0.11 |
| (1,143) | 1:A:8:SER:HA | 1:A:9:ASP:H | 11 | 0.11 |
| (1,139) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:42:GLN:HB3 | 10 | 0.11 |
| (1,135) | 1:A:5:THR:HB | 1:A:8:SER:H | 4 | 0.11 |
| (1,12) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HB | 7 | 0.11 |
| (1,12) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HB | 10 | 0.11 |
| (1,12) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:12:ILE:HB | 12 | 0.11 |
| (1,116) | 1:A:13:ALA:HA | 1:A:16:LYS:H | 11 | 0.11 |
| (1,110) | 1:A:5:THR:HB | 1:A:6:PHE:H | 4 | 0.11 |
| (1,102) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HA | 1 | 0.11 |
| (1,102) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HA | 3 | 0.11 |
| (1,102) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HA | 7 | 0.11 |

# 10 Dihedral-angle violation analysis (i)

No dihedral-angle restraints found