# Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

Jun 3, 2023 – 08:52 PM EDT

| | | |
|---|---|---|
| PDB ID | : | 2N04 |
| BMRB ID | : | 25514 |
| Title | : | Solution Structure of the phosphorylated N-terminal region of Human Cysteine String Protein (CSP) |
| Authors | : | Patel, P.; Lian, L.; Morgan, A.; Burgoyne, R. |
| Deposited on | : | 2015-03-04 |

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

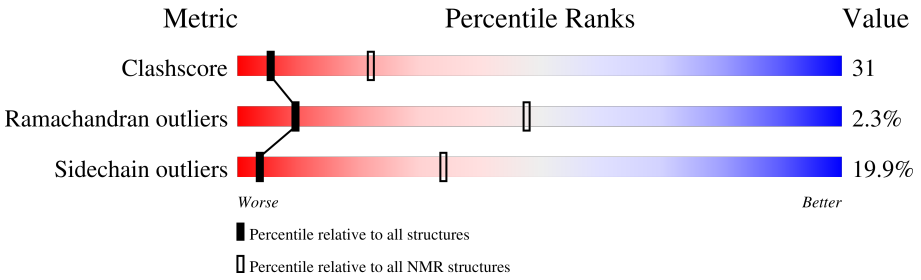
| | | |
|---|---|---|
| MolProbity | : | 4.02b-467 |
| Mogul | : | 1.8.5 (274361), CSD as541be (2020) |
| Percentile statistics | : | 20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019) |
| wwPDB-RCI | : | v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005) |
| PANAV | : | Wang et al. (2010) |
| wwPDB-ShiftChecker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

# 1 Overall quality at a glance (i)

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

The overall completeness of chemical shifts assignment is 88%.

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




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

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

| Mol | Chain | Length | Quality of chain |
|---|---|---|---|
| 1 | A | 105 | 34% 37% 10% • 18% |

# 2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 20 models. Model 14 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

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

| Well-defined (core) protein residues | | | |
|---|---|---|---|
| **Well-defined core** | **Residue range (total)** | **Backbone RMSD (Å)** | **Medoid model** |
| 1 | A:9-A:9, A:11-A:95 (86) | 0.40 | 14 |

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. No single-model clusters were found.

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

# 3 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1659 atoms, of which 817 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called DnaJ homolog subfamily C member 5.

| Mol | Chain | Residues | Atoms | | | | | | | Trace |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | Total | C | H | N | O | P | S | |
| 1 | A | 105 | 1659 | 522 | 817 | 147 | 170 | 1 | 2 | 0 |

There are 5 discrepancies between the modelled and reference sequences:

| Chain | Residue | Modelled | Actual | Comment | Reference |
|---|---|---|---|---|---|
| A | -4 | MET | - | expression tag | UNP Q9H3Z4 |
| A | -3 | ARG | - | expression tag | UNP Q9H3Z4 |
| A | -2 | SER | - | expression tag | UNP Q9H3Z4 |
| A | -1 | PRO | - | expression tag | UNP Q9H3Z4 |
| A | 0 | GLY | - | expression tag | UNP Q9H3Z4 |

# 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: DnaJ homolog subfamily C member 5

Chain A: 34% 37% 10% • 18%

M-4 R-3 S-2 P-1 G0 M1 A2 D3 Q4 R5 Q6 R7 S8 L9 S10 T11 L16 Y17 L20 G21 L22 D23 K24 N25 A26 T27 S28 D29 D30 I31 K32 K33 S34 Y35 R36 K37 L38 A39 L40 K41 Y42 H43 K46 K56 F57 I60 N61 N62 A63 H64 A65 I66 L67 T68 D69

K72 Y79 G80 S81 L82 G83 L84 Y85 V86 A87 E88 Q89 F90 G91 E92 E93 N94 V95 N96 T97 Y98 F99 V100

## 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: DnaJ homolog subfamily C member 5

Chain A: 43% 30% 9% • 18%

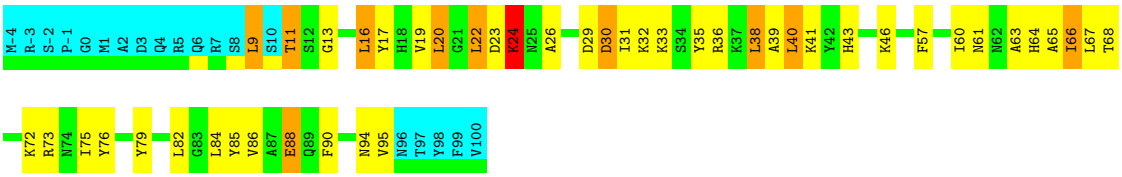
M-4 R-3 S-2 P-1 G0 M1 A2 D3 Q4 R5 Q6 R7 S8 L9 S10 T11 L16 L20 G21 L22 D23 K24 N25 A26 T27 S28 D29 D30 I31 K32 K33 S34 Y35 R36 K37 L38 A39 L40 H43 K46 K56 F57 I60 N61 N62 A63 H64 A65 I66 L67 T68 Y76

Y79 L82 G83 L84 Y85 V86 A87 E88 Q89 F90 G91 E92 V95 N96 T97 Y98 F99 V100

### 4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: DnaJ homolog subfamily C member 5

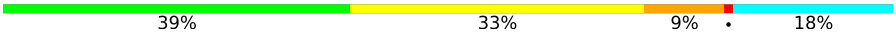
Chain A: 38% 33% 10% • 18%

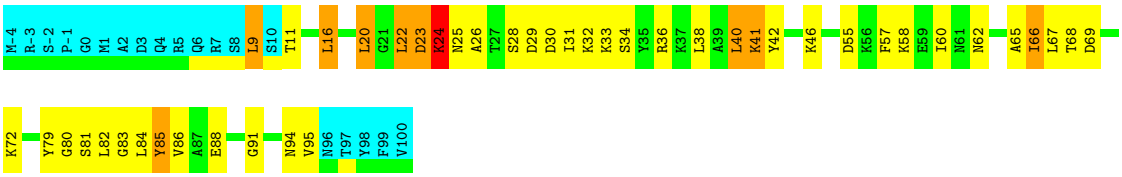



### 4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: DnaJ homolog subfamily C member 5

Chain A:

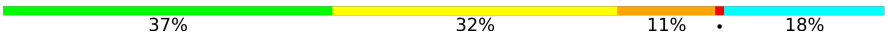


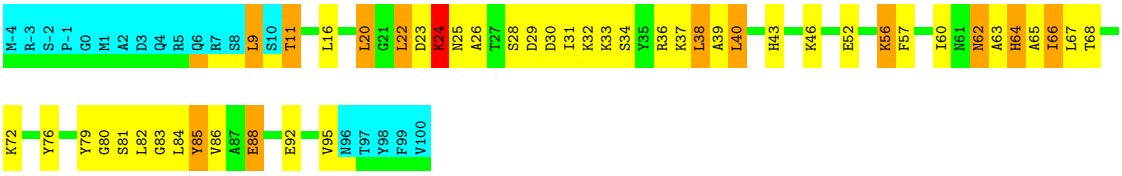




### 4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: DnaJ homolog subfamily C member 5

Chain A:

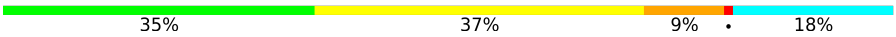


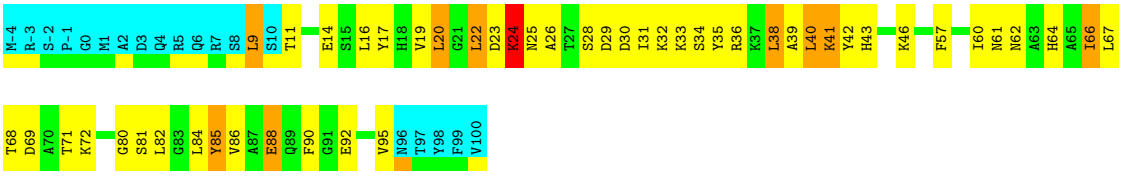




### 4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: DnaJ homolog subfamily C member 5

Chain A:




### 4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: DnaJ homolog subfamily C member 5

Chain A: 35% 31% 14% • 18%

M-4 R-3 S-2 P-1 G0 M1 A2 D3 Q4 R5 Q6 R7 S8 L9 S10 T11 L16 V19 L20 G21 L22 D23 K24 N25 A26 D29 D30 I31 K32 K33 S34 Y35 R36 K37 L38 A39 L40 K41 Y42 H43 K46 E52 K56 F57 I60 N61 N62 A63 H64 A65 I66 L67 T68

D69 A70 T71 K72 Y79 G80 S81 L82 G83 L84 Y85 V86 A87 E88 E92 N96 T97 Y98 F99 V100

### 4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: DnaJ homolog subfamily C member 5

Chain A: 40% 29% 12% • 18%

M-4 R-3 S-2 P-1 G0 M1 A2 D3 Q4 R5 Q6 R7 S8 L9 S10 T11 L16 Y17 L20 G21 L22 D23 K24 N25 A26 T27 S28 D29 D30 I31 K32 K33 S34 Y35 R36 K37 L38 A39 L40 K41 Y42 H43 K56 F57 I60 N61 N62 A63 H64 A65 I66 L67 T68 K72

I75 Y79 L82 G83 L84 Y85 V86 A87 E88 Q89 F90 G91 E92 V95 N96 T97 Y98 F99 V100

### 4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: DnaJ homolog subfamily C member 5

Chain A: 31% 38% 11% • 18%

M-4 R-3 S-2 P-1 G0 M1 A2 D3 Q4 R5 Q6 R7 S8 L9 S10 T11 L16 Y17 L20 G21 L22 D23 K24 N25 A26 D29 D30 I31 K32 K33 S34 Y35 R36 K37 L38 A39 L40 K41 Y42 H43 K46 E52 D55 K56 F57 K58 E59 I60 N61 N62 A63 H64 A65 I66

L67 T68 D69 A70 T71 K72 R73 Y76 Y79 G80 S81 L82 G83 L84 Y85 V86 A87 E88 Q89 F90 G91 E92 V95 N96 T97 Y98 F99 V100

### 4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: DnaJ homolog subfamily C member 5

Chain A: 41% 27% 13% • 18%

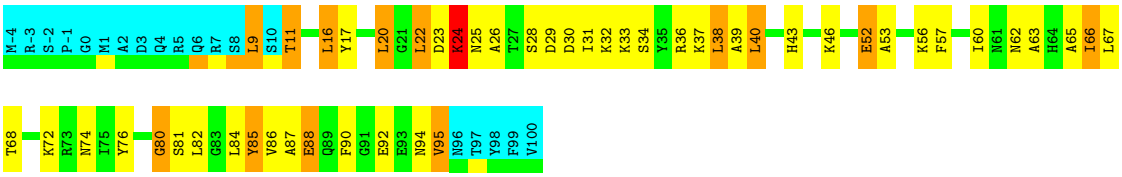
M-4 R-3 S-2 P-1 G0 M1 A2 D3 Q4 R5 Q6 R7 S8 L9 S10 T11 S15 L16 Y17 H18 V19 L20 G21 L22 D23 K24 N25 A26 D29 D30 I31 K32 K33 S34 Y35 R36 K37 L38 A39 L40 H43 F57 I60 N61 N62 A63 I66 L67 T68 D69 K72 Y76

S81 L82 G83 L84 Y85 V86 A87 E88 Q89 F90 G91 E92 E93 N94 V95 N96 T97 Y98 F99 V100

### 4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: DnaJ homolog subfamily C member 5

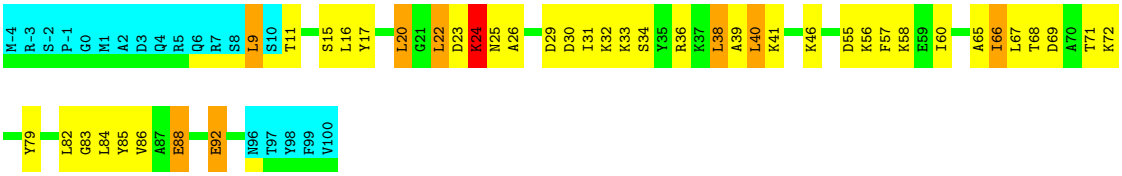
Chain A: 34% 34% 12% • 18%




### 4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: DnaJ homolog subfamily C member 5

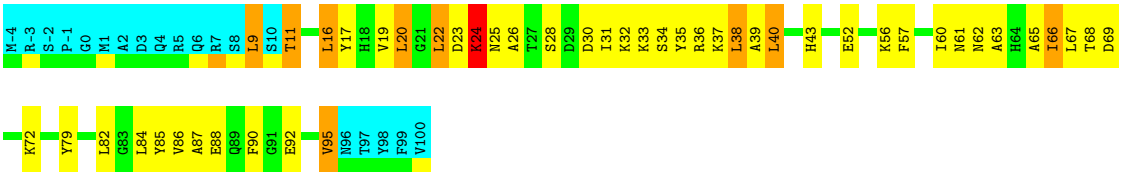
Chain A: 41% 32% 8% • 18%




### 4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: DnaJ homolog subfamily C member 5

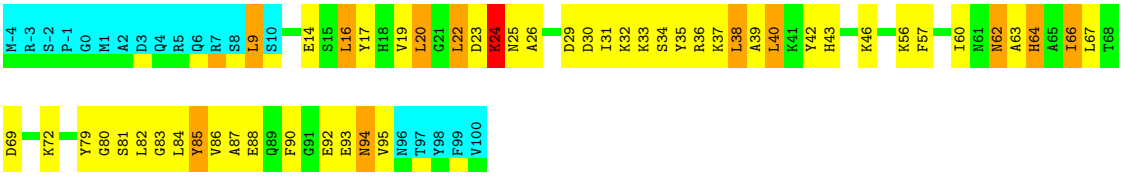
Chain A: 37% 35% 9% • 18%




### 4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: DnaJ homolog subfamily C member 5

Chain A: 33% 37% 10% • 18%



### 4.2.14 Score per residue for model 14 (medoid)

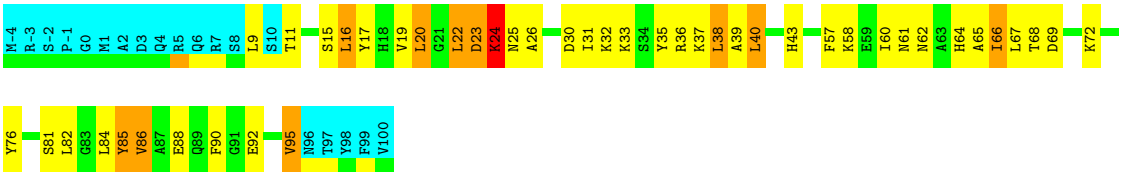
- Molecule 1: DnaJ homolog subfamily C member 5

Chain A: 39% 32% 10% • 18%

### 4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: DnaJ homolog subfamily C member 5

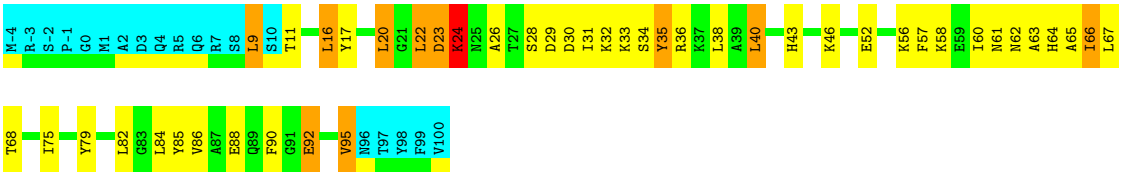
Chain A: 39% 32% 10% • 18%




### 4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: DnaJ homolog subfamily C member 5

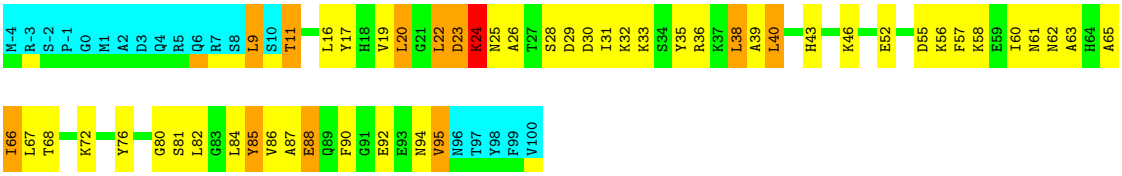
Chain A: 39% 32% 10% • 18%




### 4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: DnaJ homolog subfamily C member 5

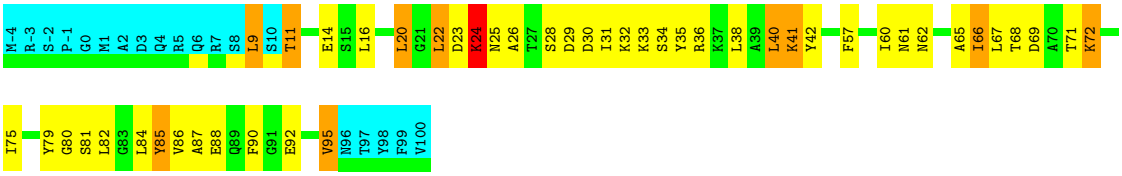
Chain A: 33% 37% 10% • 18%



### 4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: DnaJ homolog subfamily C member 5

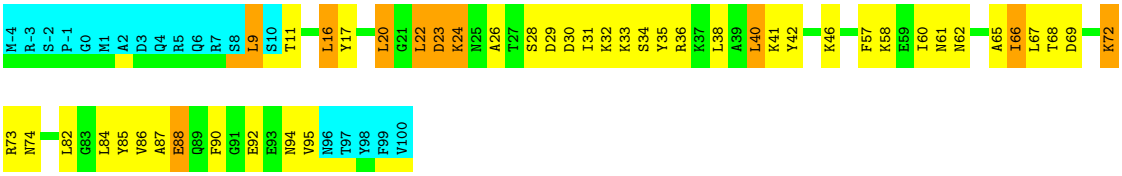
Chain A: 37% 34% 10% • 18%




### 4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: DnaJ homolog subfamily C member 5

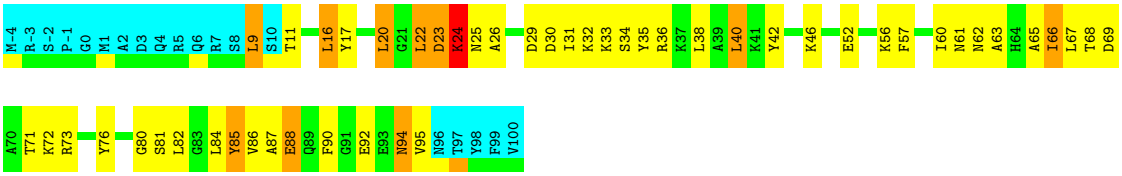
Chain A: 38% 34% 10% 18%




### 4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: DnaJ homolog subfamily C member 5

Chain A: 34% 37% 10% • 18%



# 5 Refinement protocol and experimental data overview (i)

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

Of the 100 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

| Software name | Classification | Version |
|---|---|---|
| ARIA | structure solution | |
| ARIA | refinement | |

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

| Chemical shift file(s) | working_cs.cif |
|---|---|
| Number of chemical shift lists | 1 |
| Total number of shifts | 1155 |
| Number of shifts mapped to atoms | 1155 |
| Number of unparsed shifts | 0 |
| Number of shifts with mapping errors | 0 |
| Number of shifts with mapping warnings | 0 |
| Assignment completeness (well-defined parts) | 88% |

# 6 Model quality (i)

## 6.1 Standard geometry (i)

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: SEP

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

| Mol | Chain | Bond lengths | | Bond angles | |
|---|---|---|---|---|---|
| | | RMSZ | #Z>5 | RMSZ | #Z>5 |
| 1 | A | 0.42±0.05 | 0±0/696 ( 0.0± 0.1%) | 0.51±0.01 | 0±0/939 ( 0.0± 0.0%) |
| All | All | 0.42 | 3/13920 ( 0.0%) | 0.51 | 0/18780 ( 0.0%) |

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

| Mol | Chain | Chirality | Planarity |
|---|---|---|---|
| 1 | A | 0.0±0.0 | 0.1±0.2 |
| All | All | 0 | 1 |

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

| Mol | Chain | Res | Type | Atoms | Z | Observed(Å) | Ideal(Å) | Models | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | | | | | | Worst | Total |
| 1 | A | 76 | TYR | CE2-CZ | -5.48 | 1.31 | 1.38 | 8 | 1 |
| 1 | A | 42 | TYR | CE1-CZ | -5.06 | 1.31 | 1.38 | 20 | 1 |
| 1 | A | 42 | TYR | CE2-CZ | -5.05 | 1.31 | 1.38 | 13 | 1 |

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

All unique planar outliers are listed below.

| Mol | Chain | Res | Type | Group | Models (Total) |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | 79 | TYR | Sidechain | 1 |

## 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 | 683 | 669 | 666 | 42±5 |
| All | All | 13660 | 13380 | 13320 | 839 |

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 31.

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

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|---|---|---|---|---|---|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:30:ASP:HB2 | 0.89 | 1.40 | 4 | 11 |
| 1:A:22:LEU:HG | 1:A:31:ILE:HD13 | 0.87 | 1.47 | 1 | 17 |
| 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:31:ILE:HG13 | 0.84 | 1.50 | 5 | 3 |
| 1:A:32:LYS:HE2 | 1:A:65:ALA:HA | 0.82 | 1.51 | 7 | 8 |
| 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:82:LEU:N | 0.77 | 1.94 | 7 | 19 |
| 1:A:72:LYS:HE2 | 1:A:88:GLU:HA | 0.76 | 1.55 | 10 | 8 |
| 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:30:ASP:HB3 | 0.76 | 1.56 | 15 | 9 |
| 1:A:17:TYR:HB3 | 1:A:23:ASP:HB2 | 0.72 | 1.59 | 19 | 3 |
| 1:A:31:ILE:HG13 | 1:A:68:THR:HB | 0.72 | 1.62 | 6 | 17 |
| 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:84:LEU:HD22 | 0.67 | 1.66 | 19 | 19 |
| 1:A:17:TYR:HB3 | 1:A:23:ASP:HB3 | 0.67 | 1.67 | 10 | 11 |
| 1:A:39:ALA:HA | 1:A:60:ILE:HD12 | 0.66 | 1.68 | 10 | 12 |
| 1:A:35:TYR:CE1 | 1:A:61:ASN:HA | 0.66 | 2.25 | 12 | 10 |
| 1:A:38:LEU:HD23 | 1:A:41:LYS:HE2 | 0.64 | 1.67 | 3 | 1 |
| 1:A:35:TYR:CG | 1:A:64:HIS:HB2 | 0.63 | 2.28 | 13 | 5 |
| 1:A:23:ASP:O | 1:A:24:LYS:HG3 | 0.63 | 1.94 | 16 | 20 |
| 1:A:20:LEU:HB3 | 1:A:38:LEU:HD11 | 0.62 | 1.70 | 16 | 6 |
| 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:67:LEU:HD12 | 0.61 | 1.71 | 5 | 17 |
| 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:82:LEU:N | 0.61 | 2.10 | 15 | 1 |
| 1:A:41:LYS:HD2 | 1:A:42:TYR:CD2 | 0.60 | 2.30 | 3 | 2 |
| 1:A:40:LEU:O | 1:A:46:LYS:HD2 | 0.60 | 1.97 | 1 | 8 |
| 1:A:32:LYS:NZ | 1:A:65:ALA:HA | 0.59 | 2.11 | 18 | 7 |
| 1:A:29:ASP:O | 1:A:33:LYS:HG2 | 0.59 | 1.97 | 7 | 16 |
| 1:A:32:LYS:HD2 | 1:A:64:HIS:CE1 | 0.58 | 2.33 | 5 | 2 |
| 1:A:90:PHE:HB2 | 1:A:95:VAL:HG21 | 0.58 | 1.75 | 8 | 16 |
| 1:A:62:ASN:OD1 | 1:A:81:SER:HA | 0.58 | 1.98 | 13 | 5 |
| 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:82:LEU:HA | 0.58 | 1.76 | 8 | 14 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|---|---|---|---|---|---|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:52:GLU:O | 1:A:56:LYS:HG2 | 0.57 | 1.99 | 4 | 9 |
| 1:A:40:LEU:O | 1:A:46:LYS:HD3 | 0.57 | 1.97 | 19 | 5 |
| 1:A:28:SER:O | 1:A:32:LYS:HG2 | 0.57 | 1.99 | 14 | 12 |
| 1:A:67:LEU:HA | 1:A:73:ARG:NH1 | 0.56 | 2.16 | 20 | 2 |
| 1:A:57:PHE:O | 1:A:61:ASN:HB2 | 0.56 | 2.01 | 19 | 8 |
| 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:26:ALA:HB2 | 0.56 | 1.75 | 16 | 11 |
| 1:A:52:GLU:HG3 | 1:A:53:ALA:N | 0.56 | 2.16 | 10 | 1 |
| 1:A:62:ASN:HD21 | 1:A:84:LEU:HD13 | 0.56 | 1.61 | 4 | 3 |
| 1:A:40:LEU:HD13 | 1:A:40:LEU:H | 0.56 | 1.61 | 19 | 16 |
| 1:A:38:LEU:HA | 1:A:41:LYS:HD2 | 0.56 | 1.77 | 18 | 1 |
| 1:A:35:TYR:HE1 | 1:A:61:ASN:HA | 0.55 | 1.61 | 2 | 4 |
| 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:67:LEU:HD11 | 0.55 | 1.78 | 13 | 19 |
| 1:A:87:ALA:CB | 1:A:92:GLU:HB2 | 0.55 | 2.31 | 10 | 6 |
| 1:A:81:SER:O | 1:A:85:TYR:HB3 | 0.55 | 2.02 | 4 | 13 |
| 1:A:39:ALA:HA | 1:A:60:ILE:CD1 | 0.54 | 2.31 | 10 | 12 |
| 1:A:9:LEU:CB | 1:A:58:LYS:HD3 | 0.54 | 2.32 | 15 | 1 |
| 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:82:LEU:HA | 0.54 | 1.78 | 15 | 1 |
| 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:81:SER:HB2 | 0.54 | 1.78 | 15 | 1 |
| 1:A:9:LEU:HB3 | 1:A:58:LYS:HD3 | 0.54 | 1.80 | 15 | 1 |
| 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:82:LEU:CA | 0.54 | 2.33 | 12 | 19 |
| 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:34:SER:HB2 | 0.54 | 1.79 | 20 | 16 |
| 1:A:87:ALA:HB1 | 1:A:92:GLU:HB2 | 0.53 | 1.79 | 10 | 4 |
| 1:A:38:LEU:HA | 1:A:41:LYS:HG3 | 0.53 | 1.79 | 3 | 1 |
| 1:A:36:ARG:O | 1:A:40:LEU:HD13 | 0.53 | 2.04 | 20 | 19 |
| 1:A:69:ASP:CG | 1:A:72:LYS:HD3 | 0.53 | 2.23 | 13 | 7 |
| 1:A:23:ASP:HA | 1:A:67:LEU:HB3 | 0.52 | 1.80 | 9 | 2 |
| 1:A:62:ASN:HA | 1:A:88:GLU:OE2 | 0.52 | 2.04 | 13 | 2 |
| 1:A:38:LEU:HD22 | 1:A:38:LEU:O | 0.52 | 2.03 | 2 | 11 |
| 1:A:9:LEU:HB3 | 1:A:58:LYS:HD2 | 0.52 | 1.80 | 19 | 2 |
| 1:A:72:LYS:CE | 1:A:88:GLU:HA | 0.52 | 2.35 | 11 | 11 |
| 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:67:LEU:HB2 | 0.51 | 1.82 | 19 | 16 |
| 1:A:38:LEU:HD23 | 1:A:41:LYS:CE | 0.51 | 2.34 | 3 | 1 |
| 1:A:63:ALA:O | 1:A:67:LEU:HG | 0.51 | 2.06 | 2 | 13 |
| 1:A:62:ASN:HD21 | 1:A:84:LEU:CD1 | 0.51 | 2.19 | 4 | 7 |
| 1:A:62:ASN:OD1 | 1:A:84:LEU:HB2 | 0.51 | 2.06 | 7 | 11 |
| 1:A:57:PHE:HA | 1:A:60:ILE:CD1 | 0.51 | 2.35 | 10 | 20 |
| 1:A:84:LEU:HB3 | 1:A:88:GLU:OE1 | 0.51 | 2.05 | 4 | 1 |
| 1:A:72:LYS:O | 1:A:84:LEU:HD21 | 0.51 | 2.07 | 3 | 12 |
| 1:A:41:LYS:HD3 | 1:A:42:TYR:CD2 | 0.51 | 2.41 | 19 | 2 |
| 1:A:26:ALA:CB | 1:A:30:ASP:HB3 | 0.50 | 2.34 | 15 | 8 |
| 1:A:11:THR:HG22 | 1:A:80:GLY:CA | 0.50 | 2.36 | 10 | 3 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|---|---|---|---|---|---|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:16:LEU:HD11 | 1:A:62:ASN:ND2 | 0.50 | 2.22 | 7 | 11 |
| 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HE2 | 0.50 | 1.81 | 3 | 3 |
| 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:68:THR:HG22 | 0.50 | 1.84 | 12 | 11 |
| 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:66:ILE:HG13 | 0.50 | 1.83 | 13 | 3 |
| 1:A:19:VAL:CG1 | 1:A:60:ILE:HA | 0.49 | 2.36 | 2 | 7 |
| 1:A:33:LYS:O | 1:A:37:LYS:HG2 | 0.49 | 2.07 | 12 | 7 |
| 1:A:79:TYR:CB | 1:A:83:GLY:HA3 | 0.49 | 2.38 | 6 | 6 |
| 1:A:20:LEU:HB3 | 1:A:38:LEU:CD1 | 0.49 | 2.37 | 8 | 4 |
| 1:A:32:LYS:O | 1:A:36:ARG:HG3 | 0.49 | 2.07 | 13 | 6 |
| 1:A:38:LEU:O | 1:A:41:LYS:HB3 | 0.49 | 2.08 | 11 | 1 |
| 1:A:87:ALA:HB2 | 1:A:92:GLU:HB2 | 0.49 | 1.85 | 12 | 2 |
| 1:A:23:ASP:C | 1:A:24:LYS:HG3 | 0.49 | 2.27 | 4 | 16 |
| 1:A:35:TYR:CD1 | 1:A:64:HIS:HB2 | 0.49 | 2.43 | 2 | 2 |
| 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:31:ILE:CD1 | 0.48 | 2.38 | 4 | 4 |
| 1:A:22:LEU:HG | 1:A:31:ILE:HG12 | 0.48 | 1.84 | 13 | 2 |
| 1:A:23:ASP:O | 1:A:25:ASN:N | 0.48 | 2.46 | 14 | 17 |
| 1:A:82:LEU:O | 1:A:86:VAL:HG12 | 0.48 | 2.08 | 13 | 19 |
| 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:30:ASP:CB | 0.48 | 2.35 | 17 | 5 |
| 1:A:69:ASP:OD2 | 1:A:71:THR:HB | 0.48 | 2.08 | 8 | 2 |
| 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:84:LEU:HD13 | 0.48 | 1.86 | 6 | 3 |
| 1:A:34:SER:O | 1:A:38:LEU:HB3 | 0.48 | 2.09 | 13 | 4 |
| 1:A:87:ALA:HB2 | 1:A:92:GLU:OE1 | 0.47 | 2.09 | 17 | 2 |
| 1:A:17:TYR:CB | 1:A:23:ASP:HB3 | 0.47 | 2.39 | 5 | 4 |
| 1:A:38:LEU:O | 1:A:38:LEU:HD22 | 0.47 | 2.10 | 11 | 1 |
| 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:68:THR:HB | 0.47 | 1.87 | 14 | 2 |
| 1:A:87:ALA:HB2 | 1:A:92:GLU:HB3 | 0.47 | 1.87 | 6 | 1 |
| 1:A:38:LEU:HA | 1:A:41:LYS:CG | 0.47 | 2.40 | 3 | 1 |
| 1:A:32:LYS:HZ3 | 1:A:65:ALA:HA | 0.47 | 1.70 | 1 | 1 |
| 1:A:57:PHE:HA | 1:A:60:ILE:HD11 | 0.46 | 1.85 | 20 | 19 |
| 1:A:17:TYR:HA | 1:A:22:LEU:O | 0.46 | 2.10 | 12 | 3 |
| 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:60:ILE:HB | 0.46 | 1.88 | 12 | 8 |
| 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:CE | 0.46 | 2.41 | 3 | 2 |
| 1:A:22:LEU:O | 1:A:67:LEU:HD13 | 0.45 | 2.11 | 17 | 6 |
| 1:A:66:ILE:HA | 1:A:72:LYS:CB | 0.45 | 2.41 | 11 | 1 |
| 1:A:69:ASP:OD1 | 1:A:71:THR:HB | 0.45 | 2.12 | 6 | 4 |
| 1:A:84:LEU:O | 1:A:88:GLU:HG2 | 0.45 | 2.12 | 6 | 1 |
| 1:A:46:LYS:HB3 | 1:A:46:LYS:NZ | 0.44 | 2.27 | 19 | 2 |
| 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:79:TYR:HD2 | 0.44 | 1.72 | 7 | 1 |
| 1:A:16:LEU:HD11 | 1:A:62:ASN:HD22 | 0.44 | 1.70 | 15 | 10 |
| 1:A:64:HIS:CD2 | 1:A:88:GLU:HG3 | 0.44 | 2.47 | 4 | 1 |
| 1:A:17:TYR:HB3 | 1:A:23:ASP:CB | 0.44 | 2.41 | 2 | 1 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|---|---|---|---|---|---|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:38:LEU:O | 1:A:42:TYR:N | 0.44 | 2.51 | 18 | 4 |
| 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:31:ILE:CG1 | 0.44 | 2.35 | 14 | 1 |
| 1:A:67:LEU:HA | 1:A:73:ARG:HH11 | 0.44 | 1.70 | 20 | 1 |
| 1:A:16:LEU:HG | 1:A:63:ALA:HA | 0.44 | 1.90 | 6 | 1 |
| 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:79:TYR:HD1 | 0.44 | 1.72 | 2 | 1 |
| 1:A:38:LEU:C | 1:A:38:LEU:HD13 | 0.44 | 2.33 | 11 | 4 |
| 1:A:72:LYS:HE3 | 1:A:88:GLU:HA | 0.43 | 1.89 | 11 | 3 |
| 1:A:20:LEU:CD1 | 1:A:67:LEU:HD11 | 0.43 | 2.43 | 9 | 2 |
| 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:23:ASP:H | 0.43 | 1.74 | 13 | 1 |
| 1:A:72:LYS:N | 1:A:72:LYS:HD2 | 0.43 | 2.28 | 18 | 1 |
| 1:A:24:LYS:HE3 | 1:A:24:LYS:C | 0.43 | 2.33 | 1 | 1 |
| 1:A:72:LYS:HG2 | 1:A:88:GLU:HB2 | 0.43 | 1.91 | 13 | 1 |
| 1:A:13:GLY:O | 1:A:76:TYR:HE1 | 0.43 | 1.97 | 2 | 1 |
| 1:A:38:LEU:CA | 1:A:41:LYS:HG3 | 0.43 | 2.43 | 3 | 1 |
| 1:A:22:LEU:HG | 1:A:31:ILE:CG1 | 0.43 | 2.44 | 13 | 1 |
| 1:A:35:TYR:O | 1:A:39:ALA:N | 0.42 | 2.52 | 6 | 4 |
| 1:A:41:LYS:HE3 | 1:A:42:TYR:CE2 | 0.42 | 2.50 | 6 | 1 |
| 1:A:73:ARG:O | 1:A:76:TYR:HB3 | 0.42 | 2.15 | 2 | 1 |
| 1:A:15:SER:O | 1:A:19:VAL:HG23 | 0.42 | 2.14 | 15 | 2 |
| 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HE3 | 0.42 | 1.92 | 17 | 1 |
| 1:A:24:LYS:HE3 | 1:A:24:LYS:O | 0.41 | 2.16 | 1 | 1 |
| 1:A:9:LEU:CB | 1:A:58:LYS:HD2 | 0.41 | 2.45 | 3 | 1 |
| 1:A:22:LEU:CD2 | 1:A:34:SER:HB2 | 0.41 | 2.45 | 3 | 2 |
| 1:A:75:ILE:O | 1:A:79:TYR:N | 0.41 | 2.52 | 18 | 2 |
| 1:A:35:TYR:HA | 1:A:38:LEU:HD12 | 0.41 | 1.92 | 19 | 2 |
| 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:67:LEU:CB | 0.41 | 2.45 | 4 | 2 |
| 1:A:91:GLY:O | 1:A:95:VAL:HG22 | 0.41 | 2.15 | 3 | 1 |
| 1:A:56:LYS:HA | 1:A:56:LYS:HE3 | 0.41 | 1.93 | 4 | 1 |
| 1:A:57:PHE:HA | 1:A:60:ILE:HG12 | 0.41 | 1.93 | 10 | 1 |
| 1:A:93:GLU:HG3 | 1:A:94:ASN:OD1 | 0.41 | 2.15 | 13 | 2 |
| 1:A:37:LYS:HB3 | 1:A:37:LYS:NZ | 0.40 | 2.31 | 1 | 1 |
| 1:A:38:LEU:O | 1:A:41:LYS:HG3 | 0.40 | 2.17 | 3 | 1 |
| 1:A:19:VAL:HG12 | 1:A:60:ILE:HG22 | 0.40 | 1.94 | 9 | 1 |
| 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:79:TYR:CD1 | 0.40 | 2.52 | 2 | 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 | 86/105 (82%) | 76±2 (88±2%) | 8±2 (10±2%) | 2±1 (2±1%) | 9 48 |
| All | All | 1720/2100 (82%) | 1511 (88%) | 170 (10%) | 39 (2%) | 9 48 |

All 3 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 | 24 | LYS | 19 |
| 1 | A | 23 | ASP | 10 |
| 1 | A | 80 | GLY | 10 |

### 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 | 73/89 (82%) | 58±1 (80±2%) | 15±1 (20±2%) | 4 34 |
| All | All | 1460/1780 (82%) | 1169 (80%) | 291 (20%) | 4 34 |

All 33 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 | 16 | LEU | 20 |
| 1 | A | 20 | LEU | 20 |
| 1 | A | 22 | LEU | 20 |
| 1 | A | 24 | LYS | 20 |
| 1 | A | 40 | LEU | 20 |
| 1 | A | 66 | ILE | 20 |
| 1 | A | 85 | TYR | 20 |
| 1 | A | 9 | LEU | 19 |
| 1 | A | 88 | GLU | 18 |
| 1 | A | 11 | THR | 18 |
| 1 | A | 43 | HIS | 15 |
| 1 | A | 38 | LEU | 12 |
| 1 | A | 95 | VAL | 10 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|---|---|---|---|---|
| 1 | A | 94 | ASN | 8 |
| 1 | A | 76 | TYR | 7 |
| 1 | A | 56 | LYS | 5 |
| 1 | A | 41 | LYS | 5 |
| 1 | A | 35 | TYR | 4 |
| 1 | A | 92 | GLU | 4 |
| 1 | A | 62 | ASN | 3 |
| 1 | A | 64 | HIS | 3 |
| 1 | A | 14 | GLU | 3 |
| 1 | A | 72 | LYS | 3 |
| 1 | A | 30 | ASP | 2 |
| 1 | A | 86 | VAL | 2 |
| 1 | A | 74 | ASN | 2 |
| 1 | A | 46 | LYS | 2 |
| 1 | A | 37 | LYS | 1 |
| 1 | A | 82 | LEU | 1 |
| 1 | A | 73 | ARG | 1 |
| 1 | A | 23 | ASP | 1 |
| 1 | A | 52 | GLU | 1 |
| 1 | A | 15 | SER | 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)

1 non-standard protein/DNA/RNA residue is modelled in this entry.

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

| Mol | Type | Chain | Res | Link | Bond lengths | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | | | Counts | RMSZ | #Z>2 |
| 1 | SEP | A | 10 | 1 | 8,9,10 | 1.17±0.02 | 1±0 (12±0%) |

In the following table, the Counts columns list the number of angles for which Mogul statistics

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

| Mol | Type | Chain | Res | Link | Bond angles | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | | | Counts | RMSZ | #Z>2 |
| 1 | SEP | A | 10 | 1 | 8,12,14 | 1.98±0.08 | 2±0 (25±0%) |

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

| Mol | Type | Chain | Res | Link | Chirals | Torsions | Rings |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | SEP | A | 10 | 1 | - | 0±0,5,8,10 | - |

All unique bond outliers are listed below.

| Mol | Chain | Res | Type | Atoms | Z | Observed(Å) | Ideal(Å) | Models | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | | | | | | Worst | Total |
| 1 | A | 10 | SEP | P-O1P | 2.42 | 1.58 | 1.50 | 7 | 20 |

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

| Mol | Chain | Res | Type | Atoms | Z | Observed($^o$) | Ideal($^o$) | Models | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | | | | | | Worst | Total |
| 1 | A | 10 | SEP | P-OG-CB | 4.22 | 106.67 | 118.30 | 19 | 20 |
| 1 | A | 10 | SEP | OG-CB-CA | 3.65 | 111.69 | 108.14 | 8 | 20 |

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

## 6.5 Carbohydrates (i)

There are no monosaccharides in this entry.

## 6.6 Ligand geometry (i)

There are no ligands in this entry.

## 6.7 Other polymers (i)

There are no such molecules in this entry.

## 6.8 Polymer linkage issues (i)

There are no chain breaks in this entry.

# 7 Chemical shift validation (i)

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 88% for the well-defined parts and 82% 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 | 1155 |
| Number of shifts mapped to atoms | 1155 |
| Number of unparsed shifts | 0 |
| Number of shifts with mapping errors | 0 |
| Number of shifts with mapping warnings | 0 |
| Number of shift outliers (ShiftChecker) | 1 |

### 7.1.2 Chemical shift referencing (i)

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

| Nucleus | # values | Correction ± precision, *ppm* | Suggested action |
|---|---|---|---|
| $^{13}C_{\alpha}$ | 99 | -0.29 ± 0.12 | None needed (< 0.5 ppm) |
| $^{13}C_{\beta}$ | 94 | 0.03 ± 0.08 | None needed (< 0.5 ppm) |
| $^{13}C'$ | 96 | -0.06 ± 0.10 | None needed (< 0.5 ppm) |
| $^{15}N$ | 95 | 0.38 ± 0.29 | None needed (< 0.5 ppm) |

### 7.1.3 Completeness of resonance assignments (i)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 88%, i.e. 1012 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1156. 0 out of 12 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

| | Total | $^{1}H$ | $^{13}C$ | $^{15}N$ |
|---|---|---|---|---|
| Backbone | 426/429 (99%) | 174/174 (100%) | 169/172 (98%) | 83/83 (100%) |
| Sidechain | 566/629 (90%) | 386/404 (96%) | 172/201 (86%) | 8/24 (33%) |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| | Total | $^{1}$H | $^{13}$C | $^{15}$N |
|---|---|---|---|---|
| Aromatic | 20/98 (20%) | 10/46 (22%) | 10/46 (22%) | 0/6 (0%) |
| Overall | 1012/1156 (88%) | 570/624 (91%) | 351/419 (84%) | 91/113 (81%) |

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 82%, i.e. 1155 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1410. 0 out of 13 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

| | Total | $^{1}$H | $^{13}$C | $^{15}$N |
|---|---|---|---|---|
| Backbone | 489/518 (94%) | 199/210 (95%) | 195/208 (94%) | 95/100 (95%) |
| Sidechain | 646/775 (83%) | 440/497 (89%) | 195/242 (81%) | 11/36 (31%) |
| Aromatic | 20/117 (17%) | 10/55 (18%) | 10/56 (18%) | 0/6 (0%) |
| Overall | 1155/1410 (82%) | 649/762 (85%) | 400/506 (79%) | 106/142 (75%) |

### 7.1.4 Statistically unusual chemical shifts (i)

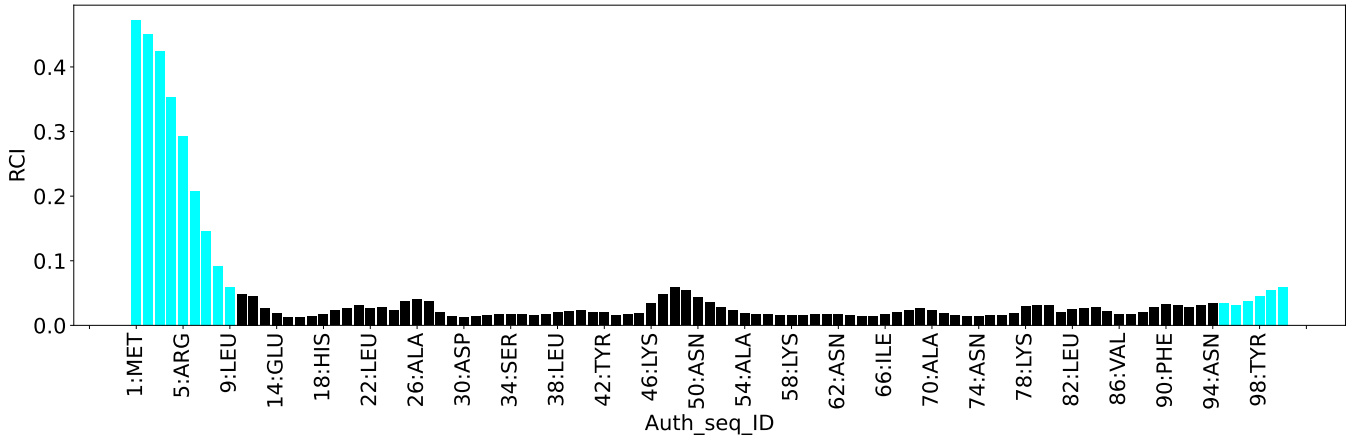
The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

| List Id | Chain | Res | Type | Atom | Shift, *ppm* | Expected range, *ppm* | Z-score |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | 44 | PRO | HD3 | 1.74 | 1.76 – 5.48 | -5.0 |

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

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

Random coil index (RCI) for chain A:


RCI
0.0
0.1
0.2
0.3
0.4
1:MET
5:ARG
9:LEU
14:GLU
18:HIS
22:LEU
26:ALA
30:ASP
34:SER
38:LEU
42:TYR
46:LYS
50:ASN
54:ALA
58:LYS
62:ASN
66:ILE
70:ALA
74:ASN
78:LYS
82:LEU
86:VAL
90:PHE
94:ASN
98:TYR
Auth_seq_ID

# 8 NMR restraints analysis (i)

## 8.1 Conformationally restricting restraints (i)

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

| Description | Value |
|---|---|
| Total distance restraints | 3119 |
| Intra-residue (\|i-j\|=0) | 967 |
| Sequential (\|i-j\|=1) | 839 |
| Medium range (\|i-j\|>1 and \|i-j\|<5) | 758 |
| Long range (\|i-j\|≥5) | 555 |
| Inter-chain | 0 |
| Hydrogen bond restraints | 0 |
| Disulfide bond restraints | 0 |
| Total dihedral-angle restraints | 181 |
| Number of unmapped restraints | 0 |
| Number of restraints per residue | 31.4 |
| Number of long range restraints per residue[1] | 5.3 |

[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) | 58.6 | 0.2 |
| 0.2-0.5 (Medium) | 67.3 | 0.5 |
| >0.5 (Large) | 81.4 | 3.39 |

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

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

| Bins (°) | Average number of violations per model | Max (°) |
|---|---|---|
| 1.0-10.0 (Small) | 13.8 | 5.6 |
| 10.0-20.0 (Medium) | None | None |
| >20.0 (Large) | None | None |

# 9 Distance violation analysis (i)

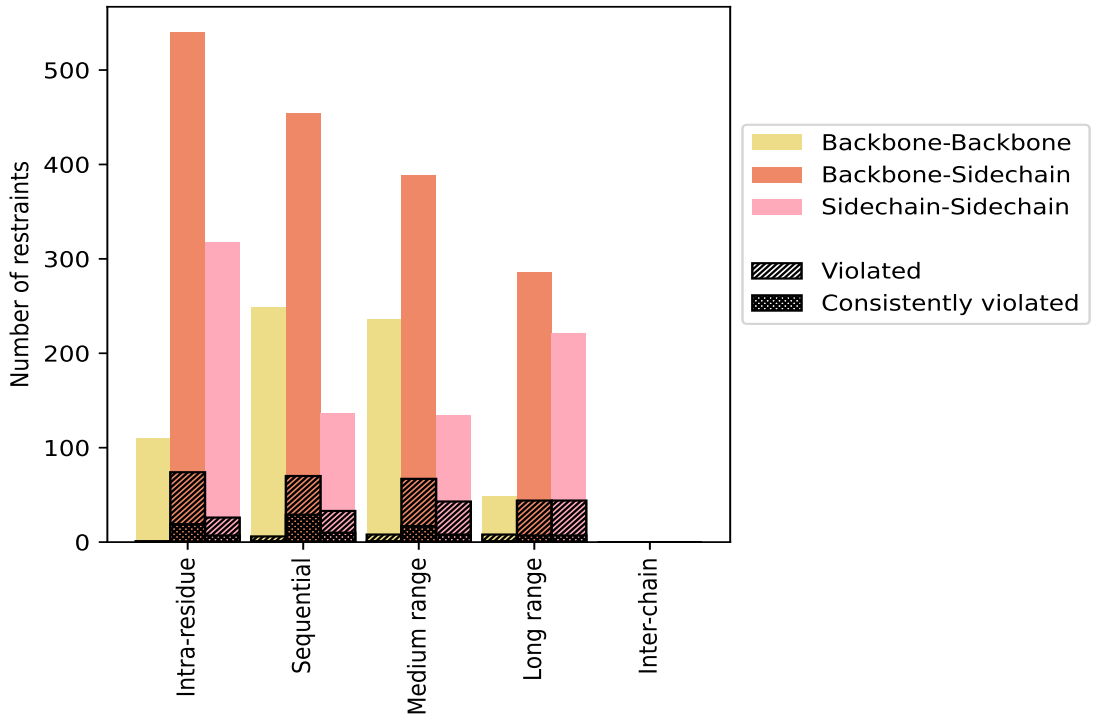
## 9.1 Summary of distance violations (i)

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

| Restraints type | Count | %[1] | Violated[3] | | | Consistently Violated[4] | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | Count | %[2] | %[1] | Count | %[2] | %[1] |
| Intra-residue (\|i-j\|=0) | 967 | 31.0 | 101 | 10.4 | 3.2 | 26 | 2.7 | 0.8 |
| Backbone-Backbone | 110 | 3.5 | 1 | 0.9 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 540 | 17.3 | 74 | 13.7 | 2.4 | 19 | 3.5 | 0.6 |
| Sidechain-Sidechain | 317 | 10.2 | 26 | 8.2 | 0.8 | 7 | 2.2 | 0.2 |
| Sequential (\|i-j\|=1) | 839 | 26.9 | 109 | 13.0 | 3.5 | 40 | 4.8 | 1.3 |
| Backbone-Backbone | 249 | 8.0 | 6 | 2.4 | 0.2 | 1 | 0.4 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 454 | 14.6 | 70 | 15.4 | 2.2 | 29 | 6.4 | 0.9 |
| Sidechain-Sidechain | 136 | 4.4 | 33 | 24.3 | 1.1 | 10 | 7.4 | 0.3 |
| Medium range (\|i-j\|>1 & \|i-j\|<5) | 758 | 24.3 | 118 | 15.6 | 3.8 | 26 | 3.4 | 0.8 |
| Backbone-Backbone | 236 | 7.6 | 8 | 3.4 | 0.3 | 1 | 0.4 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 388 | 12.4 | 67 | 17.3 | 2.1 | 17 | 4.4 | 0.5 |
| Sidechain-Sidechain | 134 | 4.3 | 43 | 32.1 | 1.4 | 8 | 6.0 | 0.3 |
| Long range (\|i-j\|≥5) | 555 | 17.8 | 96 | 17.3 | 3.1 | 15 | 2.7 | 0.5 |
| Backbone-Backbone | 48 | 1.5 | 8 | 16.7 | 0.3 | 1 | 2.1 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 286 | 9.2 | 44 | 15.4 | 1.4 | 7 | 2.4 | 0.2 |
| Sidechain-Sidechain | 221 | 7.1 | 44 | 19.9 | 1.4 | 7 | 3.2 | 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 | 3119 | 100.0 | 424 | 13.6 | 13.6 | 107 | 3.4 | 3.4 |
| Backbone-Backbone | 643 | 20.6 | 23 | 3.6 | 0.7 | 3 | 0.5 | 0.1 |
| Backbone-Sidechain | 1668 | 53.5 | 255 | 15.3 | 8.2 | 72 | 4.3 | 2.3 |
| Sidechain-Sidechain | 808 | 25.9 | 146 | 18.1 | 4.7 | 32 | 4.0 | 1.0 |

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

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




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

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

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

| Model ID | Number of violations | | | | | | Mean (Å) | Max (Å) | SD[6] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | IR[1] | SQ[2] | MR[3] | LR[4] | IC[5] | Total | | | | |
| 1 | 55 | 55 | 64 | 43 | 0 | 217 | 0.5 | 1.67 | 0.39 | 0.36 |
| 2 | 58 | 60 | 57 | 36 | 0 | 211 | 0.49 | 2.26 | 0.4 | 0.35 |
| 3 | 48 | 57 | 59 | 42 | 0 | 206 | 0.49 | 1.76 | 0.39 | 0.34 |
| 4 | 62 | 56 | 56 | 34 | 0 | 208 | 0.49 | 1.63 | 0.37 | 0.37 |
| 5 | 54 | 57 | 57 | 42 | 0 | 210 | 0.51 | 1.69 | 0.39 | 0.38 |
| 6 | 55 | 62 | 60 | 36 | 0 | 213 | 0.49 | 1.63 | 0.37 | 0.36 |
| 7 | 52 | 58 | 58 | 38 | 0 | 206 | 0.59 | 3.39 | 0.48 | 0.42 |
| 8 | 50 | 54 | 54 | 39 | 0 | 197 | 0.49 | 1.69 | 0.38 | 0.35 |
| 9 | 50 | 56 | 51 | 39 | 0 | 196 | 0.51 | 1.7 | 0.4 | 0.36 |
| 10 | 48 | 58 | 57 | 38 | 0 | 201 | 0.46 | 1.66 | 0.38 | 0.3 |
| 11 | 60 | 65 | 58 | 34 | 0 | 217 | 0.5 | 1.67 | 0.36 | 0.4 |

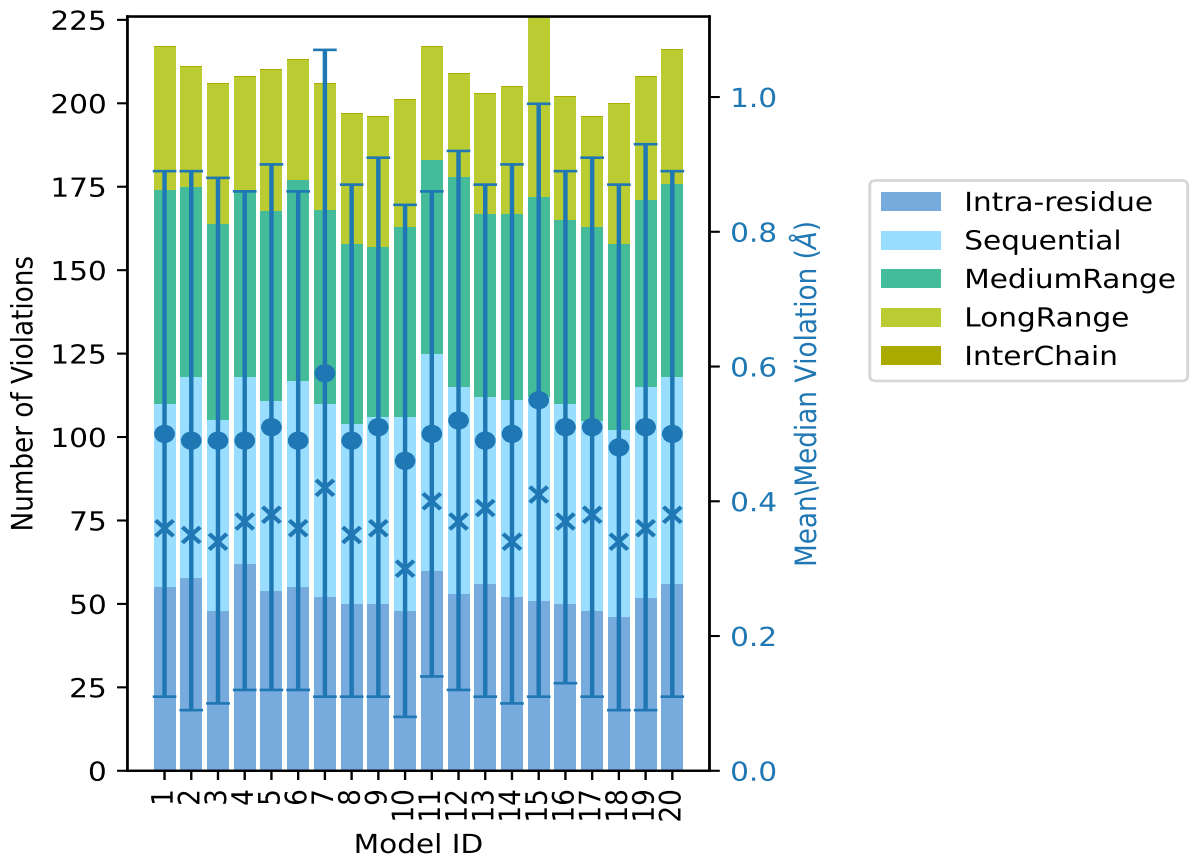
*Continued on next page...*

*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 | 53 | 62 | 63 | 31 | 0 | 209 | 0.52 | 1.67 | 0.4 | 0.37 |
| 13 | 56 | 56 | 55 | 36 | 0 | 203 | 0.49 | 1.68 | 0.38 | 0.39 |
| 14 | 52 | 59 | 56 | 38 | 0 | 205 | 0.5 | 1.74 | 0.4 | 0.34 |
| 15 | 51 | 61 | 60 | 54 | 0 | 226 | 0.55 | 2.39 | 0.44 | 0.41 |
| 16 | 50 | 60 | 55 | 37 | 0 | 202 | 0.51 | 1.72 | 0.38 | 0.37 |
| 17 | 48 | 57 | 58 | 33 | 0 | 196 | 0.51 | 1.75 | 0.4 | 0.38 |
| 18 | 46 | 56 | 56 | 42 | 0 | 200 | 0.48 | 1.64 | 0.39 | 0.34 |
| 19 | 52 | 63 | 56 | 37 | 0 | 208 | 0.51 | 2.27 | 0.42 | 0.36 |
| 20 | 56 | 62 | 58 | 40 | 0 | 216 | 0.5 | 2.23 | 0.39 | 0.38 |

[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

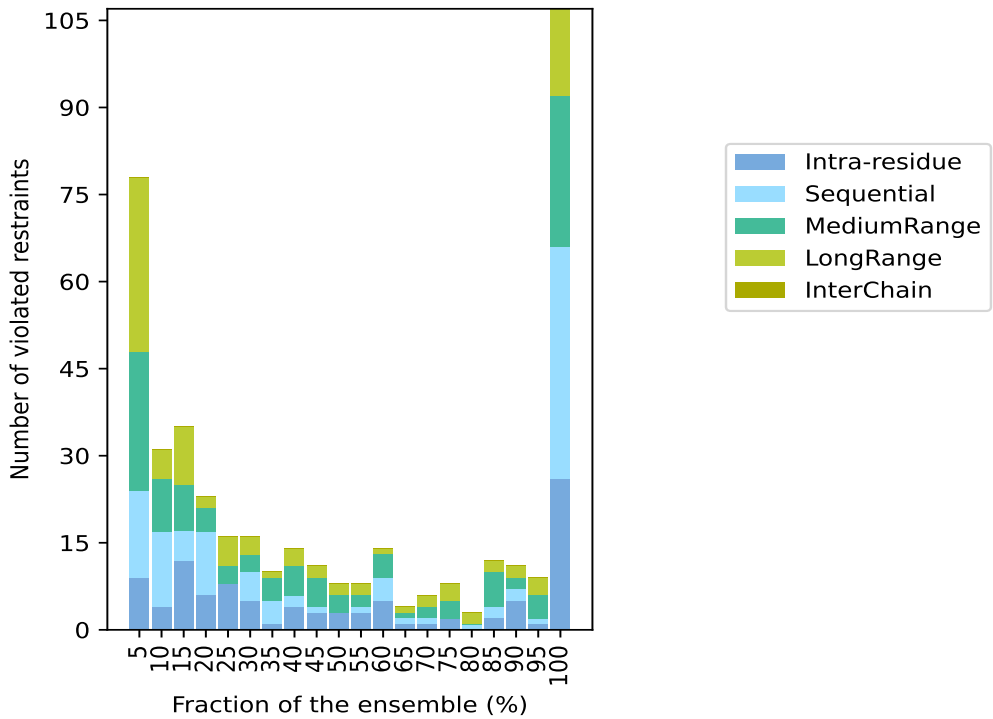
## 9.3 Distance violation statistics for the ensemble (i)

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, 2695(IR:866, SQ:730, MR:640, LR:459, 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] | % |
| 9 | 15 | 24 | 30 | 0 | 78 | 1 | 5.0 |
| 4 | 13 | 9 | 5 | 0 | 31 | 2 | 10.0 |
| 12 | 5 | 8 | 10 | 0 | 35 | 3 | 15.0 |
| 6 | 11 | 4 | 2 | 0 | 23 | 4 | 20.0 |
| 8 | 0 | 3 | 5 | 0 | 16 | 5 | 25.0 |
| 5 | 5 | 3 | 3 | 0 | 16 | 6 | 30.0 |
| 1 | 4 | 4 | 1 | 0 | 10 | 7 | 35.0 |
| 4 | 2 | 5 | 3 | 0 | 14 | 8 | 40.0 |
| 3 | 1 | 5 | 2 | 0 | 11 | 9 | 45.0 |
| 3 | 0 | 3 | 2 | 0 | 8 | 10 | 50.0 |
| 3 | 1 | 2 | 2 | 0 | 8 | 11 | 55.0 |
| 5 | 4 | 4 | 1 | 0 | 14 | 12 | 60.0 |
| 1 | 1 | 1 | 1 | 0 | 4 | 13 | 65.0 |
| 1 | 1 | 2 | 2 | 0 | 6 | 14 | 70.0 |
| 2 | 0 | 3 | 3 | 0 | 8 | 15 | 75.0 |
| 0 | 1 | 0 | 2 | 0 | 3 | 16 | 80.0 |
| 2 | 2 | 6 | 2 | 0 | 12 | 17 | 85.0 |
| 5 | 2 | 2 | 2 | 0 | 11 | 18 | 90.0 |
| 1 | 1 | 4 | 3 | 0 | 9 | 19 | 95.0 |
| 26 | 40 | 26 | 15 | 0 | 107 | 20 | 100.0 |

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

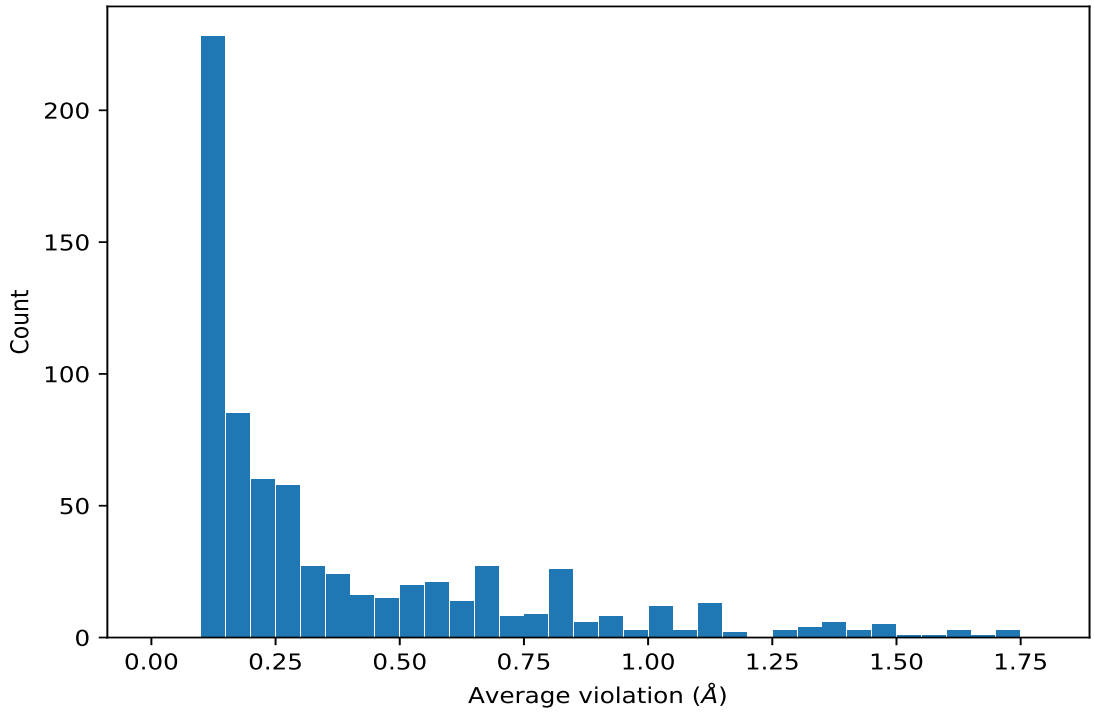
### 9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble (i)




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

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

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




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

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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,1391) | 1:A:23:ASP:HB3 | 1:A:67:LEU:HB2 | 20 | 1.66 | 0.26 | 1.58 |
| (1,985) | 1:A:44:PRO:HG2 | 1:A:54:ALA:H | 20 | 1.64 | 0.06 | 1.66 |
| (1,57) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:45:ASP:HB2 | 20 | 1.63 | 0.03 | 1.63 |
| (1,57) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:45:ASP:HB3 | 20 | 1.63 | 0.03 | 1.63 |
| (1,2666) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:64:HIS:HB3 | 20 | 1.52 | 0.16 | 1.55 |
| (1,910) | 1:A:45:ASP:HA | 1:A:44:PRO:HB3 | 20 | 1.47 | 0.02 | 1.48 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:25:ASN:HD22 | 20 | 1.44 | 0.03 | 1.44 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:25:ASN:HD22 | 20 | 1.44 | 0.03 | 1.44 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:25:ASN:HD22 | 20 | 1.44 | 0.03 | 1.44 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB1 | 1:A:62:ASN:HB2 | 20 | 1.38 | 0.06 | 1.39 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB2 | 1:A:62:ASN:HB2 | 20 | 1.38 | 0.06 | 1.39 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB3 | 1:A:62:ASN:HB2 | 20 | 1.38 | 0.06 | 1.39 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:25:ASN:HD22 | 20 | 1.37 | 0.08 | 1.38 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:25:ASN:HD22 | 20 | 1.37 | 0.08 | 1.38 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:25:ASN:HD22 | 20 | 1.37 | 0.08 | 1.38 |
| (1,2203) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:73:ARG:HB2 | 20 | 1.32 | 0.26 | 1.38 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,1751) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:H | 20 | 1.31 | 0.24 | 1.38 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD12 | 1:A:85:TYR:HB2 | 20 | 1.25 | 0.52 | 1.19 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD11 | 1:A:85:TYR:HB2 | 20 | 1.25 | 0.52 | 1.19 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD13 | 1:A:85:TYR:HB2 | 20 | 1.25 | 0.52 | 1.19 |
| (1,2852) | 1:A:61:ASN:H | 1:A:61:ASN:HD22 | 20 | 1.19 | 0.04 | 1.22 |
| (1,927) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:57:PHE:H | 20 | 1.17 | 0.1 | 1.19 |
| (1,1839) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:59:GLU:H | 20 | 1.13 | 0.04 | 1.13 |
| (1,1357) | 1:A:22:LEU:HB2 | 1:A:68:THR:H | 20 | 1.12 | 0.07 | 1.12 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB2 | 1:A:44:PRO:HB2 | 20 | 1.08 | 0.14 | 1.08 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB1 | 1:A:44:PRO:HB2 | 20 | 1.08 | 0.14 | 1.08 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB3 | 1:A:44:PRO:HB2 | 20 | 1.08 | 0.14 | 1.08 |
| (1,1916) | 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HG3 | 20 | 1.03 | 0.19 | 1.08 |
| (1,1846) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:52:GLU:HA | 20 | 0.99 | 0.04 | 0.98 |
| (1,1752) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:47:ASN:HD22 | 20 | 0.99 | 0.19 | 1.04 |
| (1,1076) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:33:LYS:HB3 | 20 | 0.96 | 0.22 | 0.98 |
| (1,1675) | 1:A:62:ASN:HD21 | 1:A:62:ASN:HB2 | 20 | 0.91 | 0.01 | 0.92 |
| (1,2460) | 1:A:33:LYS:HD2 | 1:A:33:LYS:H | 20 | 0.89 | 0.08 | 0.9 |
| (1,1384) | 1:A:23:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HB2 | 20 | 0.89 | 0.04 | 0.9 |
| (1,1454) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:32:LYS:HG3 | 20 | 0.87 | 0.3 | 0.87 |
| (1,1985) | 1:A:59:GLU:HG3 | 1:A:58:LYS:H | 20 | 0.85 | 0.09 | 0.86 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG21 | 20 | 0.84 | 0.06 | 0.84 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG23 | 20 | 0.84 | 0.06 | 0.84 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG22 | 20 | 0.84 | 0.06 | 0.84 |
| (1,3046) | 1:A:23:ASP:H | 1:A:22:LEU:HB2 | 20 | 0.83 | 0.02 | 0.83 |
| (1,1698) | 1:A:44:PRO:HA | 1:A:47:ASN:HB3 | 20 | 0.82 | 0.12 | 0.85 |
| (1,1075) | 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HB2 | 20 | 0.8 | 0.25 | 0.88 |
| (1,3024) | 1:A:5:ARG:H | 1:A:5:ARG:HB3 | 20 | 0.79 | 0.07 | 0.8 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB1 | 1:A:55:ASP:HB3 | 20 | 0.79 | 0.07 | 0.78 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB2 | 1:A:55:ASP:HB3 | 20 | 0.79 | 0.07 | 0.78 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB3 | 1:A:55:ASP:HB3 | 20 | 0.79 | 0.07 | 0.78 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG21 | 1:A:59:GLU:HG2 | 20 | 0.77 | 0.14 | 0.74 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG22 | 1:A:59:GLU:HG2 | 20 | 0.77 | 0.14 | 0.74 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG23 | 1:A:59:GLU:HG2 | 20 | 0.77 | 0.14 | 0.74 |
| (1,264) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:60:ILE:HA | 20 | 0.74 | 0.06 | 0.76 |
| (1,264) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:63:ALA:HA | 20 | 0.74 | 0.06 | 0.76 |
| (1,2021) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:63:ALA:HA | 20 | 0.73 | 0.04 | 0.74 |
| (1,2585) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:62:ASN:H | 20 | 0.73 | 0.22 | 0.68 |
| (1,2858) | 1:A:53:ALA:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 20 | 0.72 | 0.13 | 0.74 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD13 | 20 | 0.7 | 0.04 | 0.7 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD11 | 20 | 0.7 | 0.04 | 0.7 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD12 | 20 | 0.7 | 0.04 | 0.7 |
| (1,2756) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:25:ASN:HD22 | 20 | 0.7 | 0.09 | 0.71 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,2828) | 1:A:59:GLU:H | 1:A:59:GLU:HB2 | 20 | 0.7 | 0.01 | 0.7 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG22 | 20 | 0.67 | 0.04 | 0.68 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG21 | 20 | 0.67 | 0.04 | 0.68 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG23 | 20 | 0.67 | 0.04 | 0.68 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:78:LYS:HG2 | 20 | 0.67 | 0.04 | 0.68 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:78:LYS:HG2 | 20 | 0.67 | 0.04 | 0.68 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD13 | 20 | 0.67 | 0.04 | 0.68 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD11 | 20 | 0.67 | 0.04 | 0.68 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD12 | 20 | 0.67 | 0.04 | 0.68 |
| (1,1763) | 1:A:58:LYS:HG3 | 1:A:58:LYS:H | 20 | 0.65 | 0.04 | 0.64 |
| (1,1791) | 1:A:47:ASN:HB2 | 1:A:48:PRO:HD2 | 20 | 0.65 | 0.01 | 0.64 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:72:LYS:HB3 | 20 | 0.64 | 0.05 | 0.64 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:72:LYS:HD2 | 20 | 0.64 | 0.05 | 0.64 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:73:ARG:HB3 | 20 | 0.64 | 0.05 | 0.64 |
| (1,1790) | 1:A:48:PRO:HB3 | 1:A:49:ASP:HB3 | 20 | 0.63 | 0.07 | 0.64 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB2 | 1:A:47:ASN:HB3 | 20 | 0.63 | 0.16 | 0.64 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB1 | 1:A:47:ASN:HB3 | 20 | 0.63 | 0.16 | 0.64 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB3 | 1:A:47:ASN:HB3 | 20 | 0.63 | 0.16 | 0.64 |
| (1,2971) | 1:A:65:ALA:H | 1:A:64:HIS:HB2 | 20 | 0.61 | 0.06 | 0.62 |
| (1,2592) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HB3 | 20 | 0.61 | 0.1 | 0.64 |
| (1,1843) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:51:PRO:HD2 | 20 | 0.59 | 0.02 | 0.58 |
| (1,2611) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:67:LEU:HB3 | 20 | 0.59 | 0.04 | 0.6 |
| (1,3001) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:45:ASP:HB2 | 20 | 0.58 | 0.05 | 0.58 |
| (1,1841) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 20 | 0.56 | 0.04 | 0.57 |
| (1,1612) | 1:A:39:ALA:HA | 1:A:42:TYR:HB3 | 20 | 0.56 | 0.1 | 0.56 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD11 | 1:A:36:ARG:HB2 | 20 | 0.55 | 0.1 | 0.58 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD13 | 1:A:36:ARG:HB2 | 20 | 0.55 | 0.1 | 0.58 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD12 | 1:A:36:ARG:HB2 | 20 | 0.55 | 0.1 | 0.58 |
| (1,838) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:58:LYS:HB2 | 20 | 0.55 | 0.14 | 0.57 |
| (1,838) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 20 | 0.55 | 0.14 | 0.57 |
| (1,2551) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:7:ARG:HG2 | 20 | 0.54 | 0.17 | 0.48 |
| (1,3052) | 1:A:56:LYS:H | 1:A:55:ASP:HB2 | 20 | 0.54 | 0.04 | 0.54 |
| (1,2510) | 1:A:49:ASP:HB2 | 1:A:48:PRO:HB3 | 20 | 0.53 | 0.08 | 0.53 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB2 | 20 | 0.53 | 0.1 | 0.52 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB1 | 20 | 0.53 | 0.1 | 0.52 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB3 | 20 | 0.53 | 0.1 | 0.52 |
| (1,986) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:43:HIS:HD2 | 20 | 0.52 | 0.17 | 0.58 |
| (1,2928) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HG3 | 20 | 0.48 | 0.06 | 0.46 |
| (1,2664) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:34:SER:HB2 | 20 | 0.47 | 0.04 | 0.48 |
| (1,1978) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:56:LYS:HB2 | 20 | 0.46 | 0.07 | 0.48 |
| (1,999) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:7:ARG:HB2 | 20 | 0.45 | 0.06 | 0.44 |
| (1,2356) | 1:A:86:VAL:HA | 1:A:89:GLN:HG2 | 20 | 0.44 | 0.09 | 0.44 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,2912) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:62:ASN:HB2 | 20 | 0.44 | 0.06 | 0.44 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:47:ASN:H | 20 | 0.42 | 0.02 | 0.42 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:46:LYS:H | 20 | 0.42 | 0.02 | 0.42 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG2 | 1:A:47:ASN:H | 20 | 0.42 | 0.02 | 0.42 |
| (1,912) | 1:A:46:LYS:HB3 | 1:A:43:HIS:HB3 | 20 | 0.42 | 0.17 | 0.37 |
| (1,2584) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:58:LYS:HA | 20 | 0.41 | 0.1 | 0.38 |
| (1,1832) | 1:A:51:PRO:HA | 1:A:51:PRO:HB2 | 20 | 0.39 | 0.01 | 0.38 |
| (1,1753) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:HB2 | 20 | 0.38 | 0.18 | 0.38 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:58:LYS:HB2 | 20 | 0.37 | 0.05 | 0.38 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:58:LYS:HB3 | 20 | 0.37 | 0.05 | 0.38 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB3 | 1:A:58:LYS:HB3 | 20 | 0.37 | 0.05 | 0.38 |
| (1,1508) | 1:A:58:LYS:HA | 1:A:58:LYS:HB3 | 20 | 0.36 | 0.02 | 0.36 |
| (1,1984) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:60:ILE:HA | 20 | 0.36 | 0.07 | 0.36 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:33:LYS:HB2 | 20 | 0.36 | 0.04 | 0.36 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:33:LYS:HB3 | 20 | 0.36 | 0.04 | 0.36 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:36:ARG:HG2 | 20 | 0.36 | 0.04 | 0.36 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 20 | 0.36 | 0.04 | 0.36 |
| (1,1838) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:58:LYS:H | 20 | 0.36 | 0.04 | 0.36 |
| (1,3002) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:46:LYS:HB3 | 20 | 0.33 | 0.02 | 0.33 |
| (1,760) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:48:PRO:HB3 | 20 | 0.33 | 0.03 | 0.33 |
| (1,760) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:48:PRO:HG2 | 20 | 0.33 | 0.03 | 0.33 |
| (1,987) | 1:A:45:ASP:H | 1:A:44:PRO:HG3 | 20 | 0.33 | 0.04 | 0.32 |
| (1,2792) | 1:A:49:ASP:H | 1:A:48:PRO:HB3 | 20 | 0.32 | 0.03 | 0.32 |
| (1,2242) | 1:A:78:LYS:HG2 | 1:A:79:TYR:H | 20 | 0.32 | 0.03 | 0.32 |
| (1,2403) | 1:A:89:GLN:HA | 1:A:89:GLN:HG3 | 20 | 0.31 | 0.02 | 0.31 |
| (1,2867) | 1:A:47:ASN:H | 1:A:47:ASN:HB3 | 20 | 0.3 | 0.02 | 0.3 |
| (1,864) | 1:A:47:ASN:HB3 | 1:A:47:ASN:HD22 | 20 | 0.29 | 0.0 | 0.29 |
| (1,877) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:25:ASN:HA | 20 | 0.29 | 0.05 | 0.3 |
| (1,839) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:56:LYS:HB3 | 20 | 0.29 | 0.09 | 0.29 |
| (1,839) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:56:LYS:HG3 | 20 | 0.29 | 0.09 | 0.29 |
| (1,2405) | 1:A:90:PHE:H | 1:A:89:GLN:HG3 | 20 | 0.28 | 0.09 | 0.26 |
| (1,3090) | 1:A:60:ILE:H | 1:A:59:GLU:HB3 | 20 | 0.28 | 0.03 | 0.29 |
| (1,2817) | 1:A:89:GLN:H | 1:A:89:GLN:HG3 | 20 | 0.27 | 0.06 | 0.27 |
| (1,2843) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:67:LEU:HB2 | 20 | 0.27 | 0.09 | 0.3 |
| (1,1952) | 1:A:78:LYS:HG2 | 1:A:78:LYS:H | 20 | 0.26 | 0.06 | 0.26 |
| (1,2869) | 1:A:47:ASN:H | 1:A:46:LYS:HB3 | 20 | 0.26 | 0.05 | 0.27 |
| (1,993) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:6:GLN:HB2 | 20 | 0.25 | 0.01 | 0.25 |
| (1,1793) | 1:A:48:PRO:HD2 | 1:A:48:PRO:HB2 | 20 | 0.23 | 0.0 | 0.23 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD11 | 20 | 0.23 | 0.03 | 0.24 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD12 | 20 | 0.23 | 0.03 | 0.24 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD13 | 20 | 0.23 | 0.03 | 0.24 |
| (1,2888) | 1:A:25:ASN:HD22 | 1:A:25:ASN:HB2 | 20 | 0.23 | 0.01 | 0.22 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD22 | 20 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD21 | 20 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD23 | 20 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD22 | 20 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD21 | 20 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD23 | 20 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD22 | 20 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD21 | 20 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD23 | 20 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (1,1373) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:31:ILE:H | 20 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG22 | 20 | 0.22 | 0.05 | 0.22 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG21 | 20 | 0.22 | 0.05 | 0.22 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG23 | 20 | 0.22 | 0.05 | 0.22 |
| (1,1531) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:34:SER:HB3 | 20 | 0.21 | 0.04 | 0.2 |
| (1,2635) | 1:A:10:SEP:H | 1:A:82:LEU:H | 20 | 0.2 | 0.03 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD11 | 20 | 0.19 | 0.02 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD13 | 20 | 0.19 | 0.02 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD12 | 20 | 0.19 | 0.02 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD13 | 20 | 0.19 | 0.02 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD11 | 20 | 0.19 | 0.02 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD12 | 20 | 0.19 | 0.02 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG21 | 20 | 0.19 | 0.02 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG23 | 20 | 0.19 | 0.02 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG22 | 20 | 0.19 | 0.02 | 0.2 |
| (1,1427) | 1:A:26:ALA:HA | 1:A:30:ASP:H | 20 | 0.19 | 0.04 | 0.19 |
| (1,2512) | 1:A:55:ASP:HB3 | 1:A:55:ASP:HA | 20 | 0.18 | 0.0 | 0.18 |
| (1,2) | 1:A:61:ASN:HB3 | 1:A:61:ASN:HD22 | 20 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (1,2) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:61:ASN:HD22 | 20 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (1,422) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:73:ARG:HA | 20 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,422) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HA | 20 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,2462) | 1:A:75:ILE:HA | 1:A:75:ILE:HG12 | 20 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,1700) | 1:A:44:PRO:HB2 | 1:A:44:PRO:HD2 | 20 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,2549) | 1:A:50:ASN:HD21 | 1:A:52:GLU:HB3 | 19 | 1.57 | 0.34 | 1.67 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:85:TYR:HB2 | 19 | 0.83 | 0.14 | 0.83 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:85:TYR:HB2 | 19 | 0.83 | 0.14 | 0.83 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:85:TYR:HB2 | 19 | 0.83 | 0.14 | 0.83 |
| (1,644) | 1:A:84:LEU:H | 1:A:92:GLU:HG3 | 19 | 0.58 | 0.38 | 0.62 |
| (1,644) | 1:A:84:LEU:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 19 | 0.58 | 0.38 | 0.62 |
| (1,2271) | 1:A:81:SER:HB3 | 1:A:9:LEU:HB3 | 19 | 0.4 | 0.08 | 0.4 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:69:ASP:HB2 | 19 | 0.34 | 0.18 | 0.34 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:69:ASP:HB2 | 19 | 0.34 | 0.18 | 0.34 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:69:ASP:HB2 | 19 | 0.34 | 0.18 | 0.34 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:73:ARG:HD3 | 19 | 0.34 | 0.18 | 0.34 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:73:ARG:HD3 | 19 | 0.34 | 0.18 | 0.34 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:73:ARG:HD3 | 19 | 0.34 | 0.18 | 0.34 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG12 | 19 | 0.27 | 0.07 | 0.26 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG11 | 19 | 0.27 | 0.07 | 0.26 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG13 | 19 | 0.27 | 0.07 | 0.26 |
| (1,915) | 1:A:46:LYS:HG3 | 1:A:46:LYS:HA | 19 | 0.25 | 0.1 | 0.22 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:24:LYS:HB2 | 19 | 0.19 | 0.04 | 0.2 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG21 | 19 | 0.19 | 0.04 | 0.2 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG22 | 19 | 0.19 | 0.04 | 0.2 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG23 | 19 | 0.19 | 0.04 | 0.2 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:67:LEU:HB2 | 19 | 0.19 | 0.04 | 0.2 |
| (1,1237) | 1:A:20:LEU:H | 1:A:18:HIS:HA | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (1,625) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 18 | 0.85 | 0.02 | 0.85 |
| (1,625) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 18 | 0.85 | 0.02 | 0.85 |
| (1,977) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 18 | 0.59 | 0.02 | 0.59 |
| (1,978) | 1:A:50:ASN:HD22 | 1:A:52:GLU:HB3 | 18 | 0.49 | 0.08 | 0.5 |
| (1,1864) | 1:A:52:GLU:HB2 | 1:A:52:GLU:HA | 18 | 0.39 | 0.0 | 0.39 |
| (1,1571) | 1:A:58:LYS:HG2 | 1:A:58:LYS:HA | 18 | 0.28 | 0.06 | 0.29 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD13 | 18 | 0.28 | 0.1 | 0.29 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD11 | 18 | 0.28 | 0.1 | 0.29 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD12 | 18 | 0.28 | 0.1 | 0.29 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB1 | 1:A:61:ASN:HA | 18 | 0.28 | 0.1 | 0.29 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB2 | 1:A:61:ASN:HA | 18 | 0.28 | 0.1 | 0.29 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB3 | 1:A:61:ASN:HA | 18 | 0.28 | 0.1 | 0.29 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG21 | 18 | 0.28 | 0.1 | 0.29 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG23 | 18 | 0.28 | 0.1 | 0.29 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG22 | 18 | 0.28 | 0.1 | 0.29 |
| (1,2947) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:44:PRO:HB2 | 18 | 0.27 | 0.14 | 0.24 |
| (1,182) | 1:A:29:ASP:H | 1:A:28:SER:HA | 18 | 0.18 | 0.03 | 0.19 |
| (1,182) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:28:SER:HA | 18 | 0.18 | 0.03 | 0.19 |
| (1,802) | 1:A:72:LYS:H | 1:A:75:ILE:HB | 18 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (1,802) | 1:A:72:LYS:H | 1:A:88:GLU:HB3 | 18 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (1,980) | 1:A:5:ARG:HA | 1:A:5:ARG:HB2 | 18 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,3117) | 1:A:50:ASN:HD22 | 1:A:50:ASN:HB3 | 18 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG21 | 17 | 1.13 | 0.17 | 1.15 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG22 | 17 | 1.13 | 0.17 | 1.15 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG23 | 17 | 1.13 | 0.17 | 1.15 |
| (1,949) | 1:A:90:PHE:HB2 | 1:A:94:ASN:HD22 | 17 | 0.86 | 0.12 | 0.84 |
| (1,55) | 1:A:5:ARG:HD2 | 1:A:5:ARG:HB2 | 17 | 0.68 | 0.06 | 0.67 |
| (1,55) | 1:A:5:ARG:HD3 | 1:A:5:ARG:HB2 | 17 | 0.68 | 0.06 | 0.67 |
| (1,55) | 1:A:7:ARG:HD3 | 1:A:7:ARG:HB3 | 17 | 0.68 | 0.06 | 0.67 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,55) | 1:A:7:ARG:HD2 | 1:A:7:ARG:HB3 | 17 | 0.68 | 0.06 | 0.67 |
| (1,2550) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:6:GLN:HB2 | 17 | 0.65 | 0.21 | 0.79 |
| (1,221) | 1:A:34:SER:HB3 | 1:A:37:LYS:HE2 | 17 | 0.62 | 0.23 | 0.64 |
| (1,221) | 1:A:34:SER:HB3 | 1:A:37:LYS:HE3 | 17 | 0.62 | 0.23 | 0.64 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD11 | 1:A:62:ASN:HB2 | 17 | 0.5 | 0.06 | 0.49 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD13 | 1:A:62:ASN:HB2 | 17 | 0.5 | 0.06 | 0.49 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD12 | 1:A:62:ASN:HB2 | 17 | 0.5 | 0.06 | 0.49 |
| (1,1931) | 1:A:56:LYS:HB3 | 1:A:53:ALA:HA | 17 | 0.36 | 0.11 | 0.37 |
| (1,109) | 1:A:18:HIS:HB2 | 1:A:15:SER:HB3 | 17 | 0.3 | 0.11 | 0.34 |
| (1,109) | 1:A:18:HIS:HB3 | 1:A:15:SER:HB3 | 17 | 0.3 | 0.11 | 0.34 |
| (1,1412) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:23:ASP:HB3 | 17 | 0.23 | 0.04 | 0.23 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HB2 | 17 | 0.21 | 0.04 | 0.23 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HB3 | 17 | 0.21 | 0.04 | 0.23 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HG2 | 17 | 0.21 | 0.04 | 0.23 |
| (1,1421) | 1:A:25:ASN:HA | 1:A:25:ASN:HD22 | 17 | 0.19 | 0.05 | 0.18 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:68:THR:HB | 17 | 0.14 | 0.03 | 0.13 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:68:THR:HB | 17 | 0.14 | 0.03 | 0.13 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:68:THR:HB | 17 | 0.14 | 0.03 | 0.13 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:34:SER:HB3 | 17 | 0.14 | 0.03 | 0.13 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:34:SER:HB3 | 17 | 0.14 | 0.03 | 0.13 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:34:SER:HB3 | 17 | 0.14 | 0.03 | 0.13 |
| (1,774) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:41:LYS:HB2 | 16 | 0.43 | 0.1 | 0.42 |
| (1,774) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:41:LYS:HD2 | 16 | 0.43 | 0.1 | 0.42 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:72:LYS:HE3 | 16 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:76:TYR:HB2 | 16 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:76:TYR:HB3 | 16 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD22 | 16 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD21 | 16 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD23 | 16 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:26:ALA:HA | 16 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:26:ALA:HA | 16 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:26:ALA:HA | 16 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1408) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HA | 15 | 0.61 | 0.45 | 0.73 |
| (1,1135) | 1:A:92:GLU:HG3 | 1:A:92:GLU:HA | 15 | 0.51 | 0.12 | 0.56 |
| (1,276) | 1:A:99:PHE:HB3 | 1:A:96:ASN:HA | 15 | 0.32 | 0.08 | 0.35 |
| (1,276) | 1:A:49:ASP:HB3 | 1:A:49:ASP:HA | 15 | 0.32 | 0.08 | 0.35 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:79:TYR:HB3 | 15 | 0.23 | 0.08 | 0.22 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:72:LYS:HE2 | 15 | 0.23 | 0.08 | 0.22 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:72:LYS:HE3 | 15 | 0.23 | 0.08 | 0.22 |
| (1,370) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:72:LYS:HD2 | 15 | 0.15 | 0.01 | 0.15 |
| (1,370) | 1:A:72:LYS:HG2 | 1:A:66:ILE:HA | 15 | 0.15 | 0.01 | 0.15 |
| (1,2324) | 1:A:84:LEU:HB2 | 1:A:88:GLU:HB3 | 15 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,2787) | 1:A:57:PHE:H | 1:A:42:TYR:HD2 | 15 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,2787) | 1:A:57:PHE:H | 1:A:42:TYR:HD1 | 15 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG12 | 1:A:82:LEU:HA | 15 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG11 | 1:A:82:LEU:HA | 15 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG13 | 1:A:82:LEU:HA | 15 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG12 | 1:A:85:TYR:HA | 15 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG11 | 1:A:85:TYR:HA | 15 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG13 | 1:A:85:TYR:HA | 15 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:55:ASP:HB2 | 14 | 0.29 | 0.17 | 0.24 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:56:LYS:HE2 | 14 | 0.29 | 0.17 | 0.24 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:56:LYS:HE3 | 14 | 0.29 | 0.17 | 0.24 |
| (1,652) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:6:GLN:HB2 | 14 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (1,652) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:84:LEU:HB2 | 14 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:11:THR:H | 14 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:11:THR:H | 14 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:11:THR:H | 14 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:86:VAL:H | 14 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:86:VAL:H | 14 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:86:VAL:H | 14 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG21 | 1:A:26:ALA:HA | 14 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG22 | 1:A:26:ALA:HA | 14 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG23 | 1:A:26:ALA:HA | 14 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,440) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:39:ALA:HA | 14 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,440) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:58:LYS:HA | 14 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,440) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:88:GLU:HA | 14 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,501) | 1:A:33:LYS:HB3 | 1:A:33:LYS:HG2 | 14 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,501) | 1:A:33:LYS:HB2 | 1:A:33:LYS:HD3 | 14 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1071) | 1:A:99:PHE:HA | 1:A:99:PHE:HB2 | 13 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (1,2265) | 1:A:81:SER:HA | 1:A:84:LEU:HB3 | 13 | 0.16 | 0.06 | 0.15 |
| (1,2813) | 1:A:89:GLN:H | 1:A:90:PHE:HB3 | 13 | 0.16 | 0.03 | 0.15 |
| (1,1939) | 1:A:56:LYS:HD2 | 1:A:42:TYR:HD2 | 13 | 0.14 | 0.03 | 0.14 |
| (1,1939) | 1:A:56:LYS:HD2 | 1:A:42:TYR:HD1 | 13 | 0.14 | 0.03 | 0.14 |
| (1,1534) | 1:A:35:TYR:HA | 1:A:38:LEU:HB2 | 12 | 1.49 | 0.14 | 1.58 |
| (1,2876) | 1:A:39:ALA:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 12 | 0.84 | 0.11 | 0.89 |
| (1,965) | 1:A:94:ASN:HD21 | 1:A:90:PHE:HB2 | 12 | 0.78 | 0.11 | 0.78 |
| (1,1733) | 1:A:99:PHE:HB2 | 1:A:100:VAL:HG13 | 12 | 0.67 | 0.44 | 0.54 |
| (1,1733) | 1:A:99:PHE:HB2 | 1:A:100:VAL:HG11 | 12 | 0.67 | 0.44 | 0.54 |
| (1,1733) | 1:A:99:PHE:HB2 | 1:A:100:VAL:HG12 | 12 | 0.67 | 0.44 | 0.54 |
| (1,1605) | 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:38:LEU:HD11 | 12 | 0.55 | 0.02 | 0.56 |
| (1,1605) | 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:38:LEU:HD12 | 12 | 0.55 | 0.02 | 0.56 |
| (1,1605) | 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:38:LEU:HD13 | 12 | 0.55 | 0.02 | 0.56 |
| (1,2803) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 12 | 0.54 | 0.06 | 0.56 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,984) | 1:A:5:ARG:HA | 1:A:5:ARG:HG2 | 12 | 0.4 | 0.4 | 0.17 |
| (1,996) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:6:GLN:HG2 | 12 | 0.26 | 0.12 | 0.22 |
| (1,574) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HG2 | 12 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (1,574) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HD2 | 12 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (1,206) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:32:LYS:HE3 | 12 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,206) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:32:LYS:HE2 | 12 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1450) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:27:THR:HG21 | 12 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1450) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:27:THR:HG22 | 12 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1450) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:27:THR:HG23 | 12 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1280) | 1:A:95:VAL:HG21 | 1:A:90:PHE:HB2 | 12 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1280) | 1:A:95:VAL:HG22 | 1:A:90:PHE:HB2 | 12 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1280) | 1:A:95:VAL:HG23 | 1:A:90:PHE:HB2 | 12 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1862) | 1:A:51:PRO:HG2 | 1:A:52:GLU:H | 12 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:30:ASP:HB2 | 12 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:30:ASP:HB2 | 12 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:30:ASP:HB2 | 12 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:30:ASP:HB3 | 12 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:30:ASP:HB3 | 12 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:30:ASP:HB3 | 12 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,997) | 1:A:6:GLN:HG2 | 1:A:6:GLN:H | 11 | 1.1 | 0.33 | 1.22 |
| (1,2213) | 1:A:75:ILE:HD11 | 1:A:92:GLU:HG2 | 11 | 1.0 | 0.19 | 1.05 |
| (1,2213) | 1:A:75:ILE:HD12 | 1:A:92:GLU:HG2 | 11 | 1.0 | 0.19 | 1.05 |
| (1,2213) | 1:A:75:ILE:HD13 | 1:A:92:GLU:HG2 | 11 | 1.0 | 0.19 | 1.05 |
| (1,1057) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:6:GLN:HG3 | 11 | 0.93 | 0.52 | 1.06 |
| (1,1057) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:6:GLN:HG3 | 11 | 0.93 | 0.52 | 1.06 |
| (1,1057) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:6:GLN:HG3 | 11 | 0.93 | 0.52 | 1.06 |
| (1,2536) | 1:A:99:PHE:HB3 | 1:A:96:ASN:HA | 11 | 0.5 | 0.08 | 0.52 |
| (1,881) | 1:A:78:LYS:HE3 | 1:A:78:LYS:HG3 | 11 | 0.45 | 0.03 | 0.45 |
| (1,885) | 1:A:3:ASP:HB3 | 1:A:3:ASP:HA | 11 | 0.22 | 0.01 | 0.23 |
| (1,2092) | 1:A:66:ILE:HG21 | 1:A:72:LYS:H | 11 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (1,2092) | 1:A:66:ILE:HG22 | 1:A:72:LYS:H | 11 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (1,2092) | 1:A:66:ILE:HG23 | 1:A:72:LYS:H | 11 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (1,2631) | 1:A:10:SEP:H | 1:A:9:LEU:HB2 | 11 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,2189) | 1:A:73:ARG:HD3 | 1:A:62:ASN:HD22 | 10 | 1.32 | 0.15 | 1.29 |
| (1,1335) | 1:A:20:LEU:HD22 | 1:A:22:LEU:HB2 | 10 | 0.3 | 0.04 | 0.29 |
| (1,1335) | 1:A:20:LEU:HD21 | 1:A:22:LEU:HB2 | 10 | 0.3 | 0.04 | 0.29 |
| (1,1335) | 1:A:20:LEU:HD23 | 1:A:22:LEU:HB2 | 10 | 0.3 | 0.04 | 0.29 |
| (1,1944) | 1:A:56:LYS:HD3 | 1:A:56:LYS:H | 10 | 0.27 | 0.13 | 0.25 |
| (1,2984) | 1:A:73:ARG:H | 1:A:73:ARG:HD3 | 10 | 0.21 | 0.12 | 0.15 |
| (1,1197) | 1:A:67:LEU:HD22 | 1:A:73:ARG:HD3 | 10 | 0.2 | 0.08 | 0.18 |
| (1,1197) | 1:A:67:LEU:HD21 | 1:A:73:ARG:HD3 | 10 | 0.2 | 0.08 | 0.18 |
| (1,1197) | 1:A:67:LEU:HD23 | 1:A:73:ARG:HD3 | 10 | 0.2 | 0.08 | 0.18 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,1368) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:25:ASN:HD22 | 10 | 0.17 | 0.04 | 0.18 |
| (1,1368) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:25:ASN:HD22 | 10 | 0.17 | 0.04 | 0.18 |
| (1,1368) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:25:ASN:HD22 | 10 | 0.17 | 0.04 | 0.18 |
| (1,793) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:44:PRO:HB3 | 10 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (1,793) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:44:PRO:HD3 | 10 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (1,2190) | 1:A:73:ARG:HD3 | 1:A:73:ARG:HB3 | 10 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,1055) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:6:GLN:HB2 | 9 | 1.01 | 0.67 | 0.92 |
| (1,1055) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:6:GLN:HB2 | 9 | 1.01 | 0.67 | 0.92 |
| (1,1055) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:6:GLN:HB2 | 9 | 1.01 | 0.67 | 0.92 |
| (1,1134) | 1:A:12:SER:HB2 | 1:A:14:GLU:HG3 | 9 | 0.73 | 0.23 | 0.68 |
| (1,2733) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 9 | 0.52 | 0.22 | 0.52 |
| (1,2642) | 1:A:8:SER:H | 1:A:8:SER:HB3 | 9 | 0.48 | 0.14 | 0.54 |
| (1,1108) | 1:A:12:SER:H | 1:A:12:SER:HB3 | 9 | 0.32 | 0.02 | 0.33 |
| (1,1112) | 1:A:12:SER:HB2 | 1:A:14:GLU:HG2 | 9 | 0.31 | 0.13 | 0.4 |
| (1,1110) | 1:A:12:SER:HA | 1:A:12:SER:HB2 | 9 | 0.25 | 0.0 | 0.25 |
| (1,1773) | 1:A:47:ASN:HA | 1:A:46:LYS:HB3 | 9 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG22 | 1:A:84:LEU:HB3 | 9 | 0.13 | 0.04 | 0.11 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG21 | 1:A:84:LEU:HB3 | 9 | 0.13 | 0.04 | 0.11 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:84:LEU:HB3 | 9 | 0.13 | 0.04 | 0.11 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG22 | 1:A:72:LYS:HB3 | 9 | 0.13 | 0.04 | 0.11 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG21 | 1:A:72:LYS:HB3 | 9 | 0.13 | 0.04 | 0.11 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:72:LYS:HB3 | 9 | 0.13 | 0.04 | 0.11 |
| (1,2313) | 1:A:83:GLY:HA2 | 1:A:85:TYR:HD2 | 9 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,2313) | 1:A:83:GLY:HA2 | 1:A:85:TYR:HD1 | 9 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,2525) | 1:A:79:TYR:HA | 1:A:83:GLY:HA3 | 9 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1407) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:25:ASN:HA | 8 | 0.88 | 0.36 | 1.0 |
| (1,982) | 1:A:5:ARG:HD3 | 1:A:5:ARG:HA | 8 | 0.76 | 0.29 | 0.58 |
| (1,1113) | 1:A:12:SER:HB3 | 1:A:14:GLU:HG3 | 8 | 0.63 | 0.13 | 0.66 |
| (1,163) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HB2 | 8 | 0.51 | 0.1 | 0.54 |
| (1,163) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HB3 | 8 | 0.51 | 0.1 | 0.54 |
| (1,1009) | 1:A:8:SER:HA | 1:A:8:SER:HB2 | 8 | 0.42 | 0.01 | 0.42 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:38:LEU:HD22 | 8 | 0.33 | 0.02 | 0.34 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:38:LEU:HD21 | 8 | 0.33 | 0.02 | 0.34 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:38:LEU:HD23 | 8 | 0.33 | 0.02 | 0.34 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:39:ALA:HB1 | 8 | 0.33 | 0.02 | 0.34 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:39:ALA:HB2 | 8 | 0.33 | 0.02 | 0.34 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:39:ALA:HB3 | 8 | 0.33 | 0.02 | 0.34 |
| (1,1596) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD11 | 8 | 0.27 | 0.02 | 0.27 |
| (1,1596) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD12 | 8 | 0.27 | 0.02 | 0.27 |
| (1,1596) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD13 | 8 | 0.27 | 0.02 | 0.27 |
| (1,1750) | 1:A:46:LYS:HD3 | 1:A:46:LYS:HB2 | 8 | 0.27 | 0.24 | 0.14 |
| (1,1104) | 1:A:12:SER:HB2 | 1:A:14:GLU:H | 8 | 0.24 | 0.07 | 0.23 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:89:GLN:HE21 | 8 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD12 | 1:A:89:GLN:HE21 | 8 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD13 | 1:A:89:GLN:HE21 | 8 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:89:GLN:HE22 | 8 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD12 | 1:A:89:GLN:HE22 | 8 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD13 | 1:A:89:GLN:HE22 | 8 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD22 | 8 | 0.17 | 0.03 | 0.16 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD21 | 8 | 0.17 | 0.03 | 0.16 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD23 | 8 | 0.17 | 0.03 | 0.16 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:39:ALA:HB1 | 8 | 0.17 | 0.03 | 0.16 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:39:ALA:HB2 | 8 | 0.17 | 0.03 | 0.16 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:39:ALA:HB3 | 8 | 0.17 | 0.03 | 0.16 |
| (1,1266) | 1:A:95:VAL:HG21 | 1:A:94:ASN:HA | 8 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1266) | 1:A:95:VAL:HG22 | 1:A:94:ASN:HA | 8 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1266) | 1:A:95:VAL:HG23 | 1:A:94:ASN:HA | 8 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,2519) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:72:LYS:H | 8 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (1,2519) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:72:LYS:H | 8 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (1,2519) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:72:LYS:H | 8 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (1,2113) | 1:A:67:LEU:HD11 | 1:A:17:TYR:HA | 8 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (1,2113) | 1:A:67:LEU:HD12 | 1:A:17:TYR:HA | 8 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (1,2113) | 1:A:67:LEU:HD13 | 1:A:17:TYR:HA | 8 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (1,2386) | 1:A:94:ASN:HD22 | 1:A:93:GLU:HG2 | 7 | 0.68 | 0.7 | 0.18 |
| (1,882) | 1:A:41:LYS:HE2 | 1:A:41:LYS:HG3 | 7 | 0.48 | 0.15 | 0.55 |
| (1,657) | 1:A:78:LYS:H | 1:A:6:GLN:HG2 | 7 | 0.33 | 0.1 | 0.3 |
| (1,657) | 1:A:78:LYS:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 7 | 0.33 | 0.1 | 0.3 |
| (1,657) | 1:A:78:LYS:H | 1:A:92:GLU:HG2 | 7 | 0.33 | 0.1 | 0.3 |
| (1,739) | 1:A:47:ASN:HD22 | 1:A:46:LYS:HD3 | 7 | 0.24 | 0.07 | 0.23 |
| (1,739) | 1:A:47:ASN:HD22 | 1:A:53:ALA:HB2 | 7 | 0.24 | 0.07 | 0.23 |
| (1,739) | 1:A:47:ASN:HD22 | 1:A:53:ALA:HB1 | 7 | 0.24 | 0.07 | 0.23 |
| (1,739) | 1:A:47:ASN:HD22 | 1:A:53:ALA:HB3 | 7 | 0.24 | 0.07 | 0.23 |
| (1,1501) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:35:TYR:HB2 | 7 | 0.21 | 0.07 | 0.21 |
| (1,566) | 1:A:12:SER:H | 1:A:10:SEP:HB2 | 7 | 0.18 | 0.04 | 0.2 |
| (1,566) | 1:A:12:SER:H | 1:A:10:SEP:HB3 | 7 | 0.18 | 0.04 | 0.2 |
| (1,604) | 1:A:8:SER:H | 1:A:7:ARG:HG2 | 7 | 0.16 | 0.04 | 0.15 |
| (1,604) | 1:A:8:SER:H | 1:A:7:ARG:HG3 | 7 | 0.16 | 0.04 | 0.15 |
| (1,551) | 1:A:77:ASP:H | 1:A:73:ARG:HB2 | 7 | 0.14 | 0.02 | 0.15 |
| (1,551) | 1:A:77:ASP:H | 1:A:73:ARG:HB3 | 7 | 0.14 | 0.02 | 0.15 |
| (1,2145) | 1:A:74:ASN:HB2 | 1:A:70:ALA:HA | 7 | 0.13 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1115) | 1:A:13:GLY:HA2 | 1:A:14:GLU:HA | 7 | 0.11 | 0.01 | 0.11 |
| (1,994) | 1:A:4:GLN:HB3 | 1:A:3:ASP:HA | 6 | 1.15 | 0.03 | 1.15 |
| (1,2837) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:41:LYS:HB2 | 6 | 0.66 | 0.34 | 0.88 |
| (1,2638) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 6 | 0.52 | 0.03 | 0.52 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,879) | 1:A:41:LYS:HD3 | 1:A:41:LYS:HA | 6 | 0.5 | 0.07 | 0.51 |
| (1,471) | 1:A:84:LEU:HB2 | 1:A:85:TYR:HA | 6 | 0.38 | 0.25 | 0.39 |
| (1,471) | 1:A:85:TYR:HA | 1:A:88:GLU:HG3 | 6 | 0.38 | 0.25 | 0.39 |
| (1,3103) | 1:A:80:GLY:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 6 | 0.36 | 0.14 | 0.32 |
| (1,2478) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:62:ASN:HA | 6 | 0.29 | 0.17 | 0.25 |
| (1,2457) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:4:GLN:HA | 6 | 0.28 | 0.01 | 0.29 |
| (1,989) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:82:LEU:HD12 | 6 | 0.26 | 0.05 | 0.27 |
| (1,989) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:82:LEU:HD11 | 6 | 0.26 | 0.05 | 0.27 |
| (1,989) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:82:LEU:HD13 | 6 | 0.26 | 0.05 | 0.27 |
| (1,2006) | 1:A:78:LYS:HD2 | 1:A:75:ILE:HA | 6 | 0.26 | 0.11 | 0.28 |
| (1,1648) | 1:A:41:LYS:HD2 | 1:A:41:LYS:H | 6 | 0.21 | 0.06 | 0.22 |
| (1,1754) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:HB3 | 6 | 0.19 | 0.06 | 0.16 |
| (1,472) | 1:A:85:TYR:HA | 1:A:82:LEU:HD12 | 6 | 0.15 | 0.06 | 0.12 |
| (1,472) | 1:A:85:TYR:HA | 1:A:82:LEU:HD11 | 6 | 0.15 | 0.06 | 0.12 |
| (1,472) | 1:A:85:TYR:HA | 1:A:82:LEU:HD13 | 6 | 0.15 | 0.06 | 0.12 |
| (1,472) | 1:A:85:TYR:HA | 1:A:89:GLN:HB2 | 6 | 0.15 | 0.06 | 0.12 |
| (1,623) | 1:A:91:GLY:H | 1:A:92:GLU:HB2 | 6 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,623) | 1:A:91:GLY:H | 1:A:92:GLU:HB3 | 6 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,138) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:30:ASP:HB3 | 6 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,138) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:30:ASP:HB3 | 6 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,138) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:30:ASP:HB3 | 6 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,138) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:30:ASP:HB2 | 6 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,138) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:30:ASP:HB2 | 6 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,138) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:30:ASP:HB2 | 6 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,494) | 1:A:97:THR:HA | 1:A:96:ASN:HB3 | 6 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,494) | 1:A:97:THR:HA | 1:A:96:ASN:HB2 | 6 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1935) | 1:A:56:LYS:HB2 | 1:A:56:LYS:HE2 | 5 | 0.93 | 0.12 | 0.94 |
| (1,2701) | 1:A:94:ASN:HD22 | 1:A:94:ASN:HB3 | 5 | 0.52 | 0.0 | 0.52 |
| (1,865) | 1:A:94:ASN:HB3 | 1:A:94:ASN:HD21 | 5 | 0.38 | 0.01 | 0.38 |
| (1,2802) | 1:A:6:GLN:H | 1:A:6:GLN:HA | 5 | 0.33 | 0.04 | 0.34 |
| (1,1011) | 1:A:8:SER:HB2 | 1:A:8:SER:H | 5 | 0.3 | 0.02 | 0.29 |
| (1,1659) | 1:A:41:LYS:HD3 | 1:A:38:LEU:HD22 | 5 | 0.29 | 0.1 | 0.29 |
| (1,1659) | 1:A:41:LYS:HD3 | 1:A:38:LEU:HD21 | 5 | 0.29 | 0.1 | 0.29 |
| (1,1659) | 1:A:41:LYS:HD3 | 1:A:38:LEU:HD23 | 5 | 0.29 | 0.1 | 0.29 |
| (1,943) | 1:A:81:SER:HB3 | 1:A:10:SEP:H | 5 | 0.17 | 0.07 | 0.13 |
| (1,1069) | 1:A:42:TYR:HA | 1:A:42:TYR:HD2 | 5 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (1,1069) | 1:A:42:TYR:HA | 1:A:42:TYR:HD1 | 5 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (1,686) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:38:LEU:HD11 | 5 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,686) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:38:LEU:HD12 | 5 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,686) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:38:LEU:HD13 | 5 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,686) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:39:ALA:HB1 | 5 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,686) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:39:ALA:HB2 | 5 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,686) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:39:ALA:HB3 | 5 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,226) | 1:A:36:ARG:HA | 1:A:36:ARG:HD2 | 5 | 0.13 | 0.03 | 0.12 |
| (1,226) | 1:A:36:ARG:HA | 1:A:36:ARG:HD3 | 5 | 0.13 | 0.03 | 0.12 |
| (1,2747) | 1:A:78:LYS:H | 1:A:6:GLN:HE22 | 5 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,3097) | 1:A:80:GLY:H | 1:A:13:GLY:H | 5 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,313) | 1:A:87:ALA:HB2 | 1:A:92:GLU:HG3 | 5 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,313) | 1:A:87:ALA:HB1 | 1:A:92:GLU:HG3 | 5 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,313) | 1:A:87:ALA:HB3 | 1:A:92:GLU:HG3 | 5 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,313) | 1:A:87:ALA:HB2 | 1:A:92:GLU:HG2 | 5 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,313) | 1:A:87:ALA:HB1 | 1:A:92:GLU:HG2 | 5 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,313) | 1:A:87:ALA:HB3 | 1:A:92:GLU:HG2 | 5 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,2378) | 1:A:87:ALA:HB2 | 1:A:91:GLY:HA3 | 5 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,2378) | 1:A:87:ALA:HB1 | 1:A:91:GLY:HA3 | 5 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,2378) | 1:A:87:ALA:HB3 | 1:A:91:GLY:HA3 | 5 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,758) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:44:PRO:HA | 5 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,758) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:51:PRO:HD2 | 5 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,2251) | 1:A:75:ILE:HG22 | 1:A:79:TYR:HA | 5 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,2251) | 1:A:75:ILE:HG21 | 1:A:79:TYR:HA | 5 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,2251) | 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:79:TYR:HA | 5 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1822) | 1:A:99:PHE:HB3 | 1:A:100:VAL:HG13 | 4 | 1.71 | 0.56 | 1.99 |
| (1,1822) | 1:A:99:PHE:HB3 | 1:A:100:VAL:HG11 | 4 | 1.71 | 0.56 | 1.99 |
| (1,1822) | 1:A:99:PHE:HB3 | 1:A:100:VAL:HG12 | 4 | 1.71 | 0.56 | 1.99 |
| (1,1668) | 1:A:99:PHE:HA | 1:A:100:VAL:HG13 | 4 | 1.49 | 0.16 | 1.43 |
| (1,1668) | 1:A:99:PHE:HA | 1:A:100:VAL:HG11 | 4 | 1.49 | 0.16 | 1.43 |
| (1,1668) | 1:A:99:PHE:HA | 1:A:100:VAL:HG12 | 4 | 1.49 | 0.16 | 1.43 |
| (1,2387) | 1:A:94:ASN:HD22 | 1:A:93:GLU:HG3 | 4 | 1.3 | 0.66 | 1.62 |
| (1,2450) | 1:A:100:VAL:HG13 | 1:A:100:VAL:H | 4 | 1.01 | 0.05 | 1.02 |
| (1,2450) | 1:A:100:VAL:HG11 | 1:A:100:VAL:H | 4 | 1.01 | 0.05 | 1.02 |
| (1,2450) | 1:A:100:VAL:HG12 | 1:A:100:VAL:H | 4 | 1.01 | 0.05 | 1.02 |
| (1,880) | 1:A:41:LYS:HA | 1:A:41:LYS:HG2 | 4 | 0.62 | 0.02 | 0.62 |
| (1,1411) | 1:A:23:ASP:HB2 | 1:A:24:LYS:HG3 | 4 | 0.51 | 0.2 | 0.61 |
| (1,2448) | 1:A:100:VAL:HB | 1:A:100:VAL:H | 4 | 0.29 | 0.09 | 0.27 |
| (1,1149) | 1:A:100:VAL:HA | 1:A:100:VAL:HB | 4 | 0.27 | 0.0 | 0.27 |
| (1,2690) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:52:GLU:HG3 | 4 | 0.24 | 0.11 | 0.2 |
| (1,2976) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:40:LEU:HA | 4 | 0.2 | 0.02 | 0.2 |
| (1,968) | 1:A:43:HIS:HB3 | 1:A:42:TYR:H | 4 | 0.19 | 0.02 | 0.2 |
| (1,2539) | 1:A:96:ASN:HD21 | 1:A:96:ASN:HB2 | 4 | 0.19 | 0.02 | 0.19 |
| (1,542) | 1:A:97:THR:HA | 1:A:96:ASN:HB3 | 4 | 0.18 | 0.04 | 0.2 |
| (1,542) | 1:A:97:THR:HB | 1:A:96:ASN:HB3 | 4 | 0.18 | 0.04 | 0.2 |
| (1,542) | 1:A:97:THR:HA | 1:A:96:ASN:HB2 | 4 | 0.18 | 0.04 | 0.2 |
| (1,1745) | 1:A:47:ASN:HD21 | 1:A:46:LYS:HB3 | 4 | 0.18 | 0.03 | 0.18 |
| (1,477) | 1:A:94:ASN:HD22 | 1:A:92:GLU:HB2 | 4 | 0.17 | 0.07 | 0.14 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,477) | 1:A:92:GLU:HB2 | 1:A:96:ASN:HD22 | 4 | 0.17 | 0.07 | 0.14 |
| (1,477) | 1:A:92:GLU:HB3 | 1:A:94:ASN:HD22 | 4 | 0.17 | 0.07 | 0.14 |
| (1,477) | 1:A:92:GLU:HB3 | 1:A:96:ASN:HD22 | 4 | 0.17 | 0.07 | 0.14 |
| (1,477) | 1:A:88:GLU:HB3 | 1:A:61:ASN:HD22 | 4 | 0.17 | 0.07 | 0.14 |
| (1,477) | 1:A:88:GLU:HB3 | 1:A:61:ASN:HD21 | 4 | 0.17 | 0.07 | 0.14 |
| (1,596) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:3:ASP:HB2 | 4 | 0.16 | 0.04 | 0.15 |
| (1,596) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:3:ASP:HB3 | 4 | 0.16 | 0.04 | 0.15 |
| (1,1413) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:25:ASN:HD22 | 4 | 0.16 | 0.04 | 0.15 |
| (1,2068) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:63:ALA:HA | 4 | 0.15 | 0.03 | 0.16 |
| (1,2068) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:63:ALA:HA | 4 | 0.15 | 0.03 | 0.16 |
| (1,2068) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:63:ALA:HA | 4 | 0.15 | 0.03 | 0.16 |
| (1,3023) | 1:A:5:ARG:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 4 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (1,2578) | 1:A:12:SER:H | 1:A:80:GLY:HA2 | 4 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,2530) | 1:A:93:GLU:HA | 1:A:92:GLU:HA | 4 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (1,2491) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:30:ASP:H | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,2740) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:96:ASN:HD22 | 4 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1461) | 1:A:29:ASP:HB3 | 1:A:27:THR:HG21 | 3 | 1.12 | 0.01 | 1.12 |
| (1,1461) | 1:A:29:ASP:HB3 | 1:A:27:THR:HG22 | 3 | 1.12 | 0.01 | 1.12 |
| (1,1461) | 1:A:29:ASP:HB3 | 1:A:27:THR:HG23 | 3 | 1.12 | 0.01 | 1.12 |
| (1,41) | 1:A:29:ASP:HB3 | 1:A:27:THR:H | 3 | 1.0 | 0.01 | 1.0 |
| (1,41) | 1:A:28:SER:H | 1:A:29:ASP:HB3 | 3 | 1.0 | 0.01 | 1.0 |
| (1,153) | 1:A:23:ASP:HB2 | 1:A:24:LYS:HB2 | 3 | 0.91 | 0.04 | 0.9 |
| (1,153) | 1:A:23:ASP:HB2 | 1:A:24:LYS:HB3 | 3 | 0.91 | 0.04 | 0.9 |
| (1,2374) | 1:A:87:ALA:HA | 1:A:92:GLU:HB2 | 3 | 0.86 | 0.04 | 0.84 |
| (1,975) | 1:A:29:ASP:H | 1:A:29:ASP:HB3 | 3 | 0.83 | 0.01 | 0.84 |
| (1,1662) | 1:A:41:LYS:HE3 | 1:A:42:TYR:HD2 | 3 | 0.73 | 0.45 | 0.87 |
| (1,1662) | 1:A:41:LYS:HE3 | 1:A:42:TYR:HD1 | 3 | 0.73 | 0.45 | 0.87 |
| (1,2385) | 1:A:88:GLU:H | 1:A:88:GLU:HG3 | 3 | 0.67 | 0.21 | 0.58 |
| (1,2392) | 1:A:85:TYR:HA | 1:A:88:GLU:HG3 | 3 | 0.65 | 0.02 | 0.65 |
| (1,1475) | 1:A:31:ILE:HA | 1:A:31:ILE:HD13 | 3 | 0.58 | 0.01 | 0.58 |
| (1,1475) | 1:A:31:ILE:HA | 1:A:31:ILE:HD11 | 3 | 0.58 | 0.01 | 0.58 |
| (1,1475) | 1:A:31:ILE:HA | 1:A:31:ILE:HD12 | 3 | 0.58 | 0.01 | 0.58 |
| (1,2413) | 1:A:91:GLY:HA2 | 1:A:94:ASN:HD22 | 3 | 0.46 | 0.11 | 0.38 |
| (1,765) | 1:A:88:GLU:H | 1:A:88:GLU:HB2 | 3 | 0.43 | 0.06 | 0.4 |
| (1,765) | 1:A:88:GLU:H | 1:A:88:GLU:HG3 | 3 | 0.43 | 0.06 | 0.4 |
| (1,434) | 1:A:75:ILE:HG22 | 1:A:84:LEU:HB2 | 3 | 0.36 | 0.06 | 0.4 |
| (1,434) | 1:A:75:ILE:HG21 | 1:A:84:LEU:HB2 | 3 | 0.36 | 0.06 | 0.4 |
| (1,434) | 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:84:LEU:HB2 | 3 | 0.36 | 0.06 | 0.4 |
| (1,434) | 1:A:75:ILE:HG22 | 1:A:92:GLU:HB2 | 3 | 0.36 | 0.06 | 0.4 |
| (1,434) | 1:A:75:ILE:HG21 | 1:A:92:GLU:HB2 | 3 | 0.36 | 0.06 | 0.4 |
| (1,434) | 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:92:GLU:HB2 | 3 | 0.36 | 0.06 | 0.4 |
| (1,2397) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:88:GLU:HB3 | 3 | 0.29 | 0.04 | 0.32 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,484) | 1:A:91:GLY:HA2 | 1:A:92:GLU:HB3 | 3 | 0.25 | 0.02 | 0.24 |
| (1,484) | 1:A:91:GLY:HA2 | 1:A:92:GLU:HB2 | 3 | 0.25 | 0.02 | 0.24 |
| (1,800) | 1:A:5:ARG:H | 1:A:5:ARG:HG2 | 3 | 0.24 | 0.01 | 0.24 |
| (1,800) | 1:A:5:ARG:H | 1:A:5:ARG:HG3 | 3 | 0.24 | 0.01 | 0.24 |
| (1,1974) | 1:A:59:GLU:HA | 1:A:58:LYS:HG3 | 3 | 0.24 | 0.05 | 0.25 |
| (1,952) | 1:A:92:GLU:HB2 | 1:A:92:GLU:H | 3 | 0.24 | 0.04 | 0.24 |
| (1,1980) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:19:VAL:HG12 | 3 | 0.24 | 0.08 | 0.25 |
| (1,1980) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:19:VAL:HG11 | 3 | 0.24 | 0.08 | 0.25 |
| (1,1980) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:19:VAL:HG13 | 3 | 0.24 | 0.08 | 0.25 |
| (1,1886) | 1:A:87:ALA:HB2 | 1:A:92:GLU:HB2 | 3 | 0.22 | 0.04 | 0.21 |
| (1,1886) | 1:A:87:ALA:HB1 | 1:A:92:GLU:HB2 | 3 | 0.22 | 0.04 | 0.21 |
| (1,1886) | 1:A:87:ALA:HB3 | 1:A:92:GLU:HB2 | 3 | 0.22 | 0.04 | 0.21 |
| (1,1386) | 1:A:23:ASP:HA | 1:A:23:ASP:HB3 | 3 | 0.18 | 0.0 | 0.18 |
| (1,884) | 1:A:3:ASP:HB2 | 1:A:3:ASP:HA | 3 | 0.18 | 0.0 | 0.18 |
| (1,458) | 1:A:82:LEU:HD12 | 1:A:6:GLN:HG2 | 3 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (1,458) | 1:A:82:LEU:HD11 | 1:A:6:GLN:HG2 | 3 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (1,458) | 1:A:82:LEU:HD13 | 1:A:6:GLN:HG2 | 3 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (1,458) | 1:A:82:LEU:HD12 | 1:A:6:GLN:HG3 | 3 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (1,458) | 1:A:82:LEU:HD11 | 1:A:6:GLN:HG3 | 3 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (1,458) | 1:A:82:LEU:HD13 | 1:A:6:GLN:HG3 | 3 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (1,2432) | 1:A:94:ASN:HB3 | 1:A:90:PHE:HB2 | 3 | 0.16 | 0.05 | 0.14 |
| (1,1687) | 1:A:74:ASN:HB3 | 1:A:74:ASN:HD22 | 3 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (1,1950) | 1:A:56:LYS:HG2 | 1:A:42:TYR:HE2 | 3 | 0.14 | 0.05 | 0.11 |
| (1,1950) | 1:A:56:LYS:HG2 | 1:A:42:TYR:HE1 | 3 | 0.14 | 0.05 | 0.11 |
| (1,827) | 1:A:31:ILE:H | 1:A:32:LYS:HA | 3 | 0.14 | 0.02 | 0.15 |
| (1,827) | 1:A:31:ILE:H | 1:A:34:SER:HB3 | 3 | 0.14 | 0.02 | 0.15 |
| (1,827) | 1:A:31:ILE:H | 1:A:68:THR:HB | 3 | 0.14 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1655) | 1:A:41:LYS:HD3 | 1:A:41:LYS:HB2 | 3 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (1,225) | 1:A:36:ARG:HA | 1:A:89:GLN:HE21 | 3 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,225) | 1:A:36:ARG:HA | 1:A:89:GLN:HE22 | 3 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1599) | 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:42:TYR:HE2 | 3 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1599) | 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:42:TYR:HE1 | 3 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1599) | 1:A:38:LEU:HD12 | 1:A:42:TYR:HE2 | 3 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1599) | 1:A:38:LEU:HD12 | 1:A:42:TYR:HE1 | 3 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1599) | 1:A:38:LEU:HD13 | 1:A:42:TYR:HE2 | 3 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1599) | 1:A:38:LEU:HD13 | 1:A:42:TYR:HE1 | 3 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,303) | 1:A:97:THR:H | 1:A:95:VAL:HB | 3 | 0.13 | 0.0 | 0.13 |
| (1,303) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:53:ALA:H | 3 | 0.13 | 0.0 | 0.13 |
| (1,303) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:54:ALA:H | 3 | 0.13 | 0.0 | 0.13 |
| (1,114) | 1:A:19:VAL:H | 1:A:19:VAL:HG12 | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.13 |
| (1,114) | 1:A:19:VAL:H | 1:A:19:VAL:HG11 | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.13 |
| (1,114) | 1:A:19:VAL:H | 1:A:19:VAL:HG13 | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.13 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,114) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:19:VAL:HG12 | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.13 |
| (1,114) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:19:VAL:HG11 | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.13 |
| (1,114) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:19:VAL:HG13 | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.13 |
| (1,1332) | 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:67:LEU:HD11 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:67:LEU:HD12 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:67:LEU:HD13 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:67:LEU:HD11 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:67:LEU:HD12 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:67:LEU:HD13 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:67:LEU:HD11 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:67:LEU:HD12 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:67:LEU:HD13 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,2677) | 1:A:82:LEU:H | 1:A:62:ASN:HD22 | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,2761) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:22:LEU:HD22 | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,2761) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:22:LEU:HD21 | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,2761) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:22:LEU:HD23 | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,1631) | 1:A:37:LYS:HA | 1:A:40:LEU:HD11 | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1631) | 1:A:37:LYS:HA | 1:A:40:LEU:HD13 | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1631) | 1:A:37:LYS:HA | 1:A:40:LEU:HD12 | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,2285) | 1:A:86:VAL:H | 1:A:82:LEU:HD12 | 2 | 1.12 | 1.01 | 1.12 |
| (1,2285) | 1:A:86:VAL:H | 1:A:82:LEU:HD11 | 2 | 1.12 | 1.01 | 1.12 |
| (1,2285) | 1:A:86:VAL:H | 1:A:82:LEU:HD13 | 2 | 1.12 | 1.01 | 1.12 |
| (1,919) | 1:A:52:GLU:HG2 | 1:A:52:GLU:HA | 2 | 0.92 | 0.12 | 0.92 |
| (1,1008) | 1:A:8:SER:HA | 1:A:9:LEU:HD11 | 2 | 0.82 | 0.66 | 0.82 |
| (1,1008) | 1:A:8:SER:HA | 1:A:9:LEU:HD13 | 2 | 0.82 | 0.66 | 0.82 |
| (1,1008) | 1:A:8:SER:HA | 1:A:9:LEU:HD12 | 2 | 0.82 | 0.66 | 0.82 |
| (1,2296) | 1:A:82:LEU:HD12 | 1:A:9:LEU:HD11 | 2 | 0.81 | 0.18 | 0.81 |
| (1,2296) | 1:A:82:LEU:HD12 | 1:A:9:LEU:HD13 | 2 | 0.81 | 0.18 | 0.81 |
| (1,2296) | 1:A:82:LEU:HD12 | 1:A:9:LEU:HD12 | 2 | 0.81 | 0.18 | 0.81 |
| (1,2296) | 1:A:82:LEU:HD11 | 1:A:9:LEU:HD11 | 2 | 0.81 | 0.18 | 0.81 |
| (1,2296) | 1:A:82:LEU:HD11 | 1:A:9:LEU:HD13 | 2 | 0.81 | 0.18 | 0.81 |
| (1,2296) | 1:A:82:LEU:HD11 | 1:A:9:LEU:HD12 | 2 | 0.81 | 0.18 | 0.81 |
| (1,2296) | 1:A:82:LEU:HD13 | 1:A:9:LEU:HD11 | 2 | 0.81 | 0.18 | 0.81 |
| (1,2296) | 1:A:82:LEU:HD13 | 1:A:9:LEU:HD13 | 2 | 0.81 | 0.18 | 0.81 |
| (1,2296) | 1:A:82:LEU:HD13 | 1:A:9:LEU:HD12 | 2 | 0.81 | 0.18 | 0.81 |
| (1,1661) | 1:A:41:LYS:HE3 | 1:A:42:TYR:HE2 | 2 | 0.56 | 0.12 | 0.56 |
| (1,1661) | 1:A:41:LYS:HE3 | 1:A:42:TYR:HE1 | 2 | 0.56 | 0.12 | 0.56 |
| (1,727) | 1:A:99:PHE:H | 1:A:95:VAL:HG21 | 2 | 0.46 | 0.12 | 0.46 |
| (1,727) | 1:A:99:PHE:H | 1:A:95:VAL:HG22 | 2 | 0.46 | 0.12 | 0.46 |
| (1,727) | 1:A:99:PHE:H | 1:A:95:VAL:HG23 | 2 | 0.46 | 0.12 | 0.46 |
| (1,727) | 1:A:99:PHE:H | 1:A:100:VAL:HG13 | 2 | 0.46 | 0.12 | 0.46 |
| (1,727) | 1:A:99:PHE:H | 1:A:100:VAL:HG11 | 2 | 0.46 | 0.12 | 0.46 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,727) | 1:A:99:PHE:H | 1:A:100:VAL:HG12 | 2 | 0.46 | 0.12 | 0.46 |
| (1,633) | 1:A:94:ASN:HD22 | 1:A:93:GLU:HG2 | 2 | 0.42 | 0.02 | 0.42 |
| (1,633) | 1:A:94:ASN:HD22 | 1:A:93:GLU:HG3 | 2 | 0.42 | 0.02 | 0.42 |
| (1,966) | 1:A:99:PHE:HB2 | 1:A:99:PHE:H | 2 | 0.28 | 0.02 | 0.28 |
| (1,1664) | 1:A:41:LYS:HE2 | 1:A:38:LEU:HA | 2 | 0.24 | 0.12 | 0.24 |
| (1,607) | 1:A:96:ASN:H | 1:A:95:VAL:HG12 | 2 | 0.22 | 0.1 | 0.22 |
| (1,607) | 1:A:96:ASN:H | 1:A:95:VAL:HG11 | 2 | 0.22 | 0.1 | 0.22 |
| (1,607) | 1:A:96:ASN:H | 1:A:95:VAL:HG13 | 2 | 0.22 | 0.1 | 0.22 |
| (1,607) | 1:A:96:ASN:H | 1:A:97:THR:HG22 | 2 | 0.22 | 0.1 | 0.22 |
| (1,607) | 1:A:96:ASN:H | 1:A:97:THR:HG21 | 2 | 0.22 | 0.1 | 0.22 |
| (1,607) | 1:A:96:ASN:H | 1:A:97:THR:HG23 | 2 | 0.22 | 0.1 | 0.22 |
| (1,307) | 1:A:52:GLU:HG2 | 1:A:52:GLU:HA | 2 | 0.22 | 0.04 | 0.22 |
| (1,307) | 1:A:52:GLU:HG3 | 1:A:52:GLU:HA | 2 | 0.22 | 0.04 | 0.22 |
| (1,251) | 1:A:41:LYS:HG2 | 1:A:42:TYR:HD2 | 2 | 0.19 | 0.04 | 0.19 |
| (1,251) | 1:A:41:LYS:HG2 | 1:A:42:TYR:HD1 | 2 | 0.19 | 0.04 | 0.19 |
| (1,251) | 1:A:41:LYS:HG2 | 1:A:47:ASN:HD22 | 2 | 0.19 | 0.04 | 0.19 |
| (1,311) | 1:A:54:ALA:HB1 | 1:A:58:LYS:HE2 | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (1,311) | 1:A:54:ALA:HB2 | 1:A:58:LYS:HE2 | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (1,311) | 1:A:54:ALA:HB3 | 1:A:58:LYS:HE2 | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (1,311) | 1:A:54:ALA:HB1 | 1:A:58:LYS:HE3 | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (1,311) | 1:A:54:ALA:HB2 | 1:A:58:LYS:HE3 | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (1,311) | 1:A:54:ALA:HB3 | 1:A:58:LYS:HE3 | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (1,2737) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:82:LEU:HD21 | 2 | 0.15 | 0.04 | 0.15 |
| (1,2737) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:82:LEU:HD22 | 2 | 0.15 | 0.04 | 0.15 |
| (1,2737) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:82:LEU:HD23 | 2 | 0.15 | 0.04 | 0.15 |
| (1,655) | 1:A:78:LYS:H | 1:A:76:TYR:HB2 | 2 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,655) | 1:A:78:LYS:H | 1:A:76:TYR:HB3 | 2 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,655) | 1:A:78:LYS:H | 1:A:79:TYR:HB3 | 2 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1609) | 1:A:39:ALA:HA | 1:A:41:LYS:H | 2 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (1,1264) | 1:A:95:VAL:HG21 | 1:A:92:GLU:HA | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1264) | 1:A:95:VAL:HG22 | 1:A:92:GLU:HA | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1264) | 1:A:95:VAL:HG23 | 1:A:92:GLU:HA | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1556) | 1:A:36:ARG:HG3 | 1:A:37:LYS:H | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,2760) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:29:ASP:HB3 | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1262) | 1:A:19:VAL:HG12 | 1:A:59:GLU:HA | 2 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,1262) | 1:A:19:VAL:HG11 | 1:A:59:GLU:HA | 2 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,1262) | 1:A:19:VAL:HG13 | 1:A:59:GLU:HA | 2 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,2204) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HD11 | 2 | 0.13 | 0.0 | 0.13 |
| (1,2204) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HD12 | 2 | 0.13 | 0.0 | 0.13 |
| (1,2204) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HD13 | 2 | 0.13 | 0.0 | 0.13 |
| (1,86) | 1:A:92:GLU:HG3 | 1:A:92:GLU:H | 2 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,86) | 1:A:92:GLU:HG2 | 1:A:92:GLU:H | 2 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

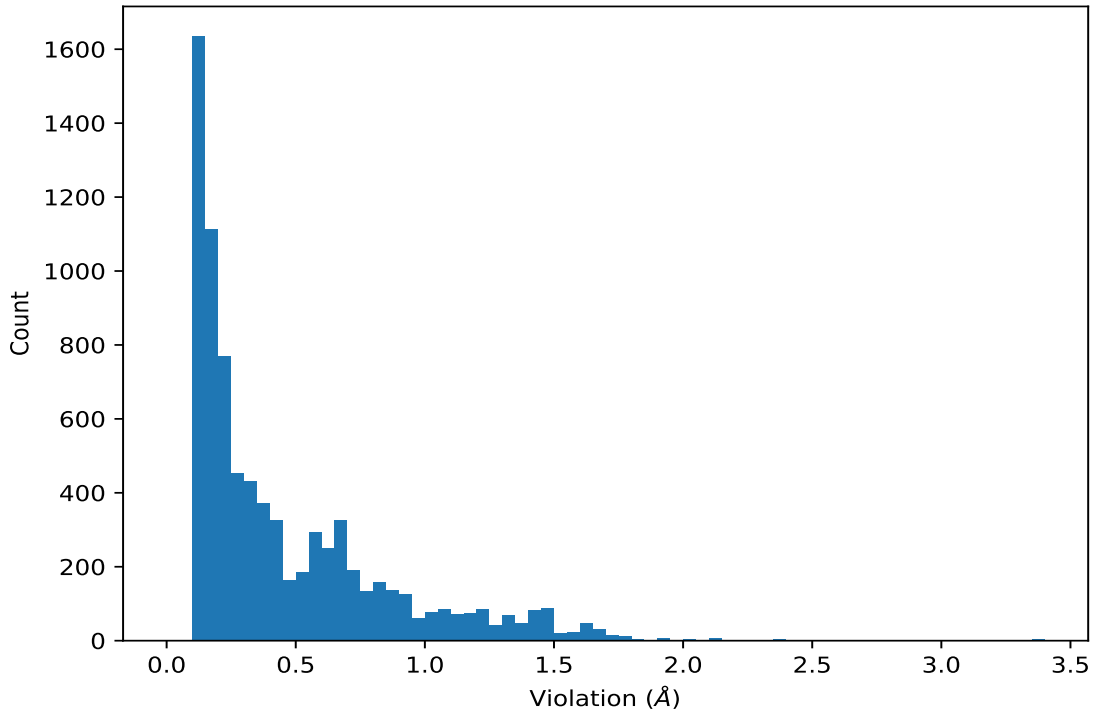
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models[1] | Mean (Å) | SD[1] (Å) | Median (Å) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,435) | 1:A:75:ILE:HG22 | 1:A:92:GLU:HG3 | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,435) | 1:A:75:ILE:HG21 | 1:A:92:GLU:HG3 | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,435) | 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:92:GLU:HG3 | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,435) | 1:A:75:ILE:HG22 | 1:A:92:GLU:HG2 | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,435) | 1:A:75:ILE:HG21 | 1:A:92:GLU:HG2 | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,435) | 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:92:GLU:HG2 | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,439) | 1:A:59:GLU:HA | 1:A:62:ASN:HA | 2 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,439) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HA | 2 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,439) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:57:PHE:HA | 2 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,711) | 1:A:53:ALA:H | 1:A:52:GLU:HG2 | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,711) | 1:A:53:ALA:H | 1:A:52:GLU:HG3 | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1189) | 1:A:16:LEU:HD11 | 1:A:63:ALA:HA | 2 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1189) | 1:A:16:LEU:HD13 | 1:A:63:ALA:HA | 2 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1189) | 1:A:16:LEU:HD12 | 1:A:63:ALA:HA | 2 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1259) | 1:A:95:VAL:HG21 | 1:A:94:ASN:HD22 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1259) | 1:A:95:VAL:HG22 | 1:A:94:ASN:HD22 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1259) | 1:A:95:VAL:HG23 | 1:A:94:ASN:HD22 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,3048) | 1:A:23:ASP:H | 1:A:68:THR:H | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,197) | 1:A:31:ILE:HD13 | 1:A:32:LYS:HE3 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,197) | 1:A:31:ILE:HD11 | 1:A:32:LYS:HE3 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,197) | 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:32:LYS:HE3 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,197) | 1:A:31:ILE:HD13 | 1:A:32:LYS:HE2 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,197) | 1:A:31:ILE:HD11 | 1:A:32:LYS:HE2 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,197) | 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:32:LYS:HE2 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,2128) | 1:A:97:THR:HB | 1:A:94:ASN:HA | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,3083) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:42:TYR:HD2 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,3083) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:42:TYR:HD1 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |

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

## 9.5 All violated distance restraints (i)

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

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




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

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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD12 | 1:A:85:TYR:HB2 | 7 | 3.39 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD11 | 1:A:85:TYR:HB2 | 7 | 3.39 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD13 | 1:A:85:TYR:HB2 | 7 | 3.39 |
| (1,1055) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:6:GLN:HB2 | 15 | 2.39 |
| (1,1055) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:6:GLN:HB2 | 15 | 2.39 |
| (1,1055) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:6:GLN:HB2 | 15 | 2.39 |
| (1,1391) | 1:A:23:ASP:HB3 | 1:A:67:LEU:HB2 | 19 | 2.27 |
| (1,1391) | 1:A:23:ASP:HB3 | 1:A:67:LEU:HB2 | 2 | 2.26 |
| (1,1391) | 1:A:23:ASP:HB3 | 1:A:67:LEU:HB2 | 20 | 2.23 |
| (1,2285) | 1:A:86:VAL:H | 1:A:82:LEU:HD12 | 7 | 2.13 |
| (1,2285) | 1:A:86:VAL:H | 1:A:82:LEU:HD11 | 7 | 2.13 |
| (1,2285) | 1:A:86:VAL:H | 1:A:82:LEU:HD13 | 7 | 2.13 |
| (1,1822) | 1:A:99:PHE:HB3 | 1:A:100:VAL:HG13 | 7 | 2.1 |
| (1,1822) | 1:A:99:PHE:HB3 | 1:A:100:VAL:HG11 | 7 | 2.1 |
| (1,1822) | 1:A:99:PHE:HB3 | 1:A:100:VAL:HG12 | 7 | 2.1 |
| (1,1822) | 1:A:99:PHE:HB3 | 1:A:100:VAL:HG13 | 15 | 2.04 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1822) | 1:A:99:PHE:HB3 | 1:A:100:VAL:HG11 | 15 | 2.04 |
| (1,1822) | 1:A:99:PHE:HB3 | 1:A:100:VAL:HG12 | 15 | 2.04 |
| (1,1822) | 1:A:99:PHE:HB3 | 1:A:100:VAL:HG13 | 19 | 1.94 |
| (1,1822) | 1:A:99:PHE:HB3 | 1:A:100:VAL:HG11 | 19 | 1.94 |
| (1,1822) | 1:A:99:PHE:HB3 | 1:A:100:VAL:HG12 | 19 | 1.94 |
| (1,1057) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:6:GLN:HG3 | 15 | 1.92 |
| (1,1057) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:6:GLN:HG3 | 15 | 1.92 |
| (1,1057) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:6:GLN:HG3 | 15 | 1.92 |
| (1,2358) | 1:A:86:VAL:HB | 1:A:82:LEU:HD12 | 7 | 1.81 |
| (1,2358) | 1:A:86:VAL:HB | 1:A:82:LEU:HD11 | 7 | 1.81 |
| (1,2358) | 1:A:86:VAL:HB | 1:A:82:LEU:HD13 | 7 | 1.81 |
| (1,2387) | 1:A:94:ASN:HD22 | 1:A:93:GLU:HG3 | 2 | 1.79 |
| (1,2386) | 1:A:94:ASN:HD22 | 1:A:93:GLU:HG2 | 3 | 1.76 |
| (1,1668) | 1:A:99:PHE:HA | 1:A:100:VAL:HG13 | 19 | 1.76 |
| (1,1668) | 1:A:99:PHE:HA | 1:A:100:VAL:HG11 | 19 | 1.76 |
| (1,1668) | 1:A:99:PHE:HA | 1:A:100:VAL:HG12 | 19 | 1.76 |
| (1,2386) | 1:A:94:ASN:HD22 | 1:A:93:GLU:HG2 | 17 | 1.75 |
| (1,1044) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:85:TYR:HE2 | 15 | 1.75 |
| (1,1044) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:85:TYR:HE1 | 15 | 1.75 |
| (1,1044) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:85:TYR:HE2 | 15 | 1.75 |
| (1,1044) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:85:TYR:HE1 | 15 | 1.75 |
| (1,1044) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:85:TYR:HE2 | 15 | 1.75 |
| (1,1044) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:85:TYR:HE1 | 15 | 1.75 |
| (1,2549) | 1:A:50:ASN:HD21 | 1:A:52:GLU:HB3 | 14 | 1.74 |
| (1,2288) | 1:A:82:LEU:HD12 | 1:A:85:TYR:HD2 | 7 | 1.73 |
| (1,2288) | 1:A:82:LEU:HD12 | 1:A:85:TYR:HD1 | 7 | 1.73 |
| (1,2288) | 1:A:82:LEU:HD11 | 1:A:85:TYR:HD2 | 7 | 1.73 |
| (1,2288) | 1:A:82:LEU:HD11 | 1:A:85:TYR:HD1 | 7 | 1.73 |
| (1,2288) | 1:A:82:LEU:HD13 | 1:A:85:TYR:HD2 | 7 | 1.73 |
| (1,2288) | 1:A:82:LEU:HD13 | 1:A:85:TYR:HD1 | 7 | 1.73 |
| (1,985) | 1:A:44:PRO:HG2 | 1:A:54:ALA:H | 16 | 1.72 |
| (1,985) | 1:A:44:PRO:HG2 | 1:A:54:ALA:H | 20 | 1.71 |
| (1,57) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:45:ASP:HB2 | 20 | 1.71 |
| (1,57) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:45:ASP:HB3 | 20 | 1.71 |
| (1,2549) | 1:A:50:ASN:HD21 | 1:A:52:GLU:HB3 | 2 | 1.71 |
| (1,2549) | 1:A:50:ASN:HD21 | 1:A:52:GLU:HB3 | 7 | 1.7 |
| (1,2549) | 1:A:50:ASN:HD21 | 1:A:52:GLU:HB3 | 9 | 1.7 |
| (1,985) | 1:A:44:PRO:HG2 | 1:A:54:ALA:H | 5 | 1.69 |
| (1,985) | 1:A:44:PRO:HG2 | 1:A:54:ALA:H | 19 | 1.69 |
| (1,2549) | 1:A:50:ASN:HD21 | 1:A:52:GLU:HB3 | 8 | 1.69 |
| (1,1391) | 1:A:23:ASP:HB3 | 1:A:67:LEU:HB2 | 9 | 1.69 |
| (1,2549) | 1:A:50:ASN:HD21 | 1:A:52:GLU:HB3 | 13 | 1.68 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2549) | 1:A:50:ASN:HD21 | 1:A:52:GLU:HB3 | 15 | 1.68 |
| (1,2549) | 1:A:50:ASN:HD21 | 1:A:52:GLU:HB3 | 20 | 1.68 |
| (1,985) | 1:A:44:PRO:HG2 | 1:A:54:ALA:H | 7 | 1.67 |
| (1,985) | 1:A:44:PRO:HG2 | 1:A:54:ALA:H | 13 | 1.67 |
| (1,57) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:45:ASP:HB2 | 11 | 1.67 |
| (1,57) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:45:ASP:HB3 | 11 | 1.67 |
| (1,57) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:45:ASP:HB2 | 16 | 1.67 |
| (1,57) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:45:ASP:HB3 | 16 | 1.67 |
| (1,2549) | 1:A:50:ASN:HD21 | 1:A:52:GLU:HB3 | 3 | 1.67 |
| (1,2549) | 1:A:50:ASN:HD21 | 1:A:52:GLU:HB3 | 12 | 1.67 |
| (1,2549) | 1:A:50:ASN:HD21 | 1:A:52:GLU:HB3 | 19 | 1.67 |
| (1,1733) | 1:A:99:PHE:HB2 | 1:A:100:VAL:HG13 | 1 | 1.67 |
| (1,1733) | 1:A:99:PHE:HB2 | 1:A:100:VAL:HG11 | 1 | 1.67 |
| (1,1733) | 1:A:99:PHE:HB2 | 1:A:100:VAL:HG12 | 1 | 1.67 |
| (1,985) | 1:A:44:PRO:HG2 | 1:A:54:ALA:H | 2 | 1.66 |
| (1,985) | 1:A:44:PRO:HG2 | 1:A:54:ALA:H | 8 | 1.66 |
| (1,985) | 1:A:44:PRO:HG2 | 1:A:54:ALA:H | 9 | 1.66 |
| (1,985) | 1:A:44:PRO:HG2 | 1:A:54:ALA:H | 10 | 1.66 |
| (1,985) | 1:A:44:PRO:HG2 | 1:A:54:ALA:H | 11 | 1.66 |
| (1,57) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:45:ASP:HB2 | 9 | 1.66 |
| (1,57) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:45:ASP:HB3 | 9 | 1.66 |
| (1,2549) | 1:A:50:ASN:HD21 | 1:A:52:GLU:HB3 | 5 | 1.66 |
| (1,2549) | 1:A:50:ASN:HD21 | 1:A:52:GLU:HB3 | 17 | 1.66 |
| (1,2387) | 1:A:94:ASN:HD22 | 1:A:93:GLU:HG3 | 17 | 1.66 |
| (1,985) | 1:A:44:PRO:HG2 | 1:A:54:ALA:H | 12 | 1.65 |
| (1,2666) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:64:HIS:HB3 | 15 | 1.65 |
| (1,1391) | 1:A:23:ASP:HB3 | 1:A:67:LEU:HB2 | 10 | 1.65 |
| (1,985) | 1:A:44:PRO:HG2 | 1:A:54:ALA:H | 3 | 1.64 |
| (1,985) | 1:A:44:PRO:HG2 | 1:A:54:ALA:H | 14 | 1.64 |
| (1,57) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:45:ASP:HB2 | 1 | 1.64 |
| (1,57) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:45:ASP:HB3 | 1 | 1.64 |
| (1,57) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:45:ASP:HB2 | 3 | 1.64 |
| (1,57) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:45:ASP:HB3 | 3 | 1.64 |
| (1,57) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:45:ASP:HB2 | 12 | 1.64 |
| (1,57) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:45:ASP:HB3 | 12 | 1.64 |
| (1,57) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:45:ASP:HB2 | 13 | 1.64 |
| (1,57) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:45:ASP:HB3 | 13 | 1.64 |
| (1,2666) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:64:HIS:HB3 | 9 | 1.64 |
| (1,2549) | 1:A:50:ASN:HD21 | 1:A:52:GLU:HB3 | 18 | 1.64 |
| (1,1391) | 1:A:23:ASP:HB3 | 1:A:67:LEU:HB2 | 5 | 1.64 |
| (1,985) | 1:A:44:PRO:HG2 | 1:A:54:ALA:H | 4 | 1.63 |
| (1,57) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:45:ASP:HB2 | 2 | 1.63 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,57) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:45:ASP:HB3 | 2 | 1.63 |
| (1,57) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:45:ASP:HB2 | 5 | 1.63 |
| (1,57) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:45:ASP:HB3 | 5 | 1.63 |
| (1,57) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:45:ASP:HB2 | 6 | 1.63 |
| (1,57) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:45:ASP:HB3 | 6 | 1.63 |
| (1,57) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:45:ASP:HB2 | 10 | 1.63 |
| (1,57) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:45:ASP:HB3 | 10 | 1.63 |
| (1,57) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:45:ASP:HB2 | 19 | 1.63 |
| (1,57) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:45:ASP:HB3 | 19 | 1.63 |
| (1,2549) | 1:A:50:ASN:HD21 | 1:A:52:GLU:HB3 | 6 | 1.63 |
| (1,985) | 1:A:44:PRO:HG2 | 1:A:54:ALA:H | 6 | 1.62 |
| (1,985) | 1:A:44:PRO:HG2 | 1:A:54:ALA:H | 15 | 1.62 |
| (1,57) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:45:ASP:HB2 | 7 | 1.62 |
| (1,57) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:45:ASP:HB3 | 7 | 1.62 |
| (1,57) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:45:ASP:HB2 | 8 | 1.62 |
| (1,57) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:45:ASP:HB3 | 8 | 1.62 |
| (1,57) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:45:ASP:HB2 | 14 | 1.62 |
| (1,57) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:45:ASP:HB3 | 14 | 1.62 |
| (1,57) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:45:ASP:HB2 | 18 | 1.62 |
| (1,57) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:45:ASP:HB3 | 18 | 1.62 |
| (1,2666) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:64:HIS:HB3 | 10 | 1.62 |
| (1,2666) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:64:HIS:HB3 | 14 | 1.62 |
| (1,1534) | 1:A:35:TYR:HA | 1:A:38:LEU:HB2 | 11 | 1.62 |
| (1,1534) | 1:A:35:TYR:HA | 1:A:38:LEU:HB2 | 12 | 1.62 |
| (1,1391) | 1:A:23:ASP:HB3 | 1:A:67:LEU:HB2 | 12 | 1.62 |
| (1,57) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:45:ASP:HB2 | 4 | 1.61 |
| (1,57) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:45:ASP:HB3 | 4 | 1.61 |
| (1,1534) | 1:A:35:TYR:HA | 1:A:38:LEU:HB2 | 14 | 1.61 |
| (1,2666) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:64:HIS:HB3 | 2 | 1.6 |
| (1,2666) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:64:HIS:HB3 | 18 | 1.6 |
| (1,1751) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:H | 18 | 1.6 |
| (1,1534) | 1:A:35:TYR:HA | 1:A:38:LEU:HB2 | 15 | 1.6 |
| (1,1391) | 1:A:23:ASP:HB3 | 1:A:67:LEU:HB2 | 14 | 1.6 |
| (1,985) | 1:A:44:PRO:HG2 | 1:A:54:ALA:H | 18 | 1.59 |
| (1,57) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:45:ASP:HB2 | 15 | 1.59 |
| (1,57) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:45:ASP:HB3 | 15 | 1.59 |
| (1,57) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:45:ASP:HB2 | 17 | 1.59 |
| (1,57) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:45:ASP:HB3 | 17 | 1.59 |
| (1,2666) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:64:HIS:HB3 | 5 | 1.59 |
| (1,2666) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:64:HIS:HB3 | 6 | 1.59 |
| (1,2666) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:64:HIS:HB3 | 12 | 1.59 |
| (1,2387) | 1:A:94:ASN:HD22 | 1:A:93:GLU:HG3 | 3 | 1.59 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1534) | 1:A:35:TYR:HA | 1:A:38:LEU:HB2 | 10 | 1.59 |
| (1,1391) | 1:A:23:ASP:HB3 | 1:A:67:LEU:HB2 | 13 | 1.59 |
| (1,2549) | 1:A:50:ASN:HD21 | 1:A:52:GLU:HB3 | 4 | 1.58 |
| (1,1534) | 1:A:35:TYR:HA | 1:A:38:LEU:HB2 | 9 | 1.58 |
| (1,1534) | 1:A:35:TYR:HA | 1:A:38:LEU:HB2 | 17 | 1.58 |
| (1,1391) | 1:A:23:ASP:HB3 | 1:A:67:LEU:HB2 | 6 | 1.58 |
| (1,1391) | 1:A:23:ASP:HB3 | 1:A:67:LEU:HB2 | 3 | 1.57 |
| (1,2666) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:64:HIS:HB3 | 17 | 1.56 |
| (1,2189) | 1:A:73:ARG:HD3 | 1:A:62:ASN:HD22 | 18 | 1.56 |
| (1,1751) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:H | 16 | 1.56 |
| (1,1391) | 1:A:23:ASP:HB3 | 1:A:67:LEU:HB2 | 7 | 1.56 |
| (1,1751) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:H | 3 | 1.55 |
| (1,1391) | 1:A:23:ASP:HB3 | 1:A:67:LEU:HB2 | 16 | 1.55 |
| (1,2666) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:64:HIS:HB3 | 11 | 1.54 |
| (1,1391) | 1:A:23:ASP:HB3 | 1:A:67:LEU:HB2 | 15 | 1.54 |
| (1,2289) | 1:A:82:LEU:HD12 | 1:A:85:TYR:HE2 | 7 | 1.53 |
| (1,2289) | 1:A:82:LEU:HD12 | 1:A:85:TYR:HE1 | 7 | 1.53 |
| (1,2289) | 1:A:82:LEU:HD11 | 1:A:85:TYR:HE2 | 7 | 1.53 |
| (1,2289) | 1:A:82:LEU:HD11 | 1:A:85:TYR:HE1 | 7 | 1.53 |
| (1,2289) | 1:A:82:LEU:HD13 | 1:A:85:TYR:HE2 | 7 | 1.53 |
| (1,2289) | 1:A:82:LEU:HD13 | 1:A:85:TYR:HE1 | 7 | 1.53 |
| (1,1751) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:H | 7 | 1.53 |
| (1,985) | 1:A:44:PRO:HG2 | 1:A:54:ALA:H | 1 | 1.51 |
| (1,2666) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:64:HIS:HB3 | 1 | 1.51 |
| (1,910) | 1:A:45:ASP:HA | 1:A:44:PRO:HB3 | 5 | 1.5 |
| (1,910) | 1:A:45:ASP:HA | 1:A:44:PRO:HB3 | 15 | 1.5 |
| (1,2666) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:64:HIS:HB3 | 3 | 1.5 |
| (1,2666) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:64:HIS:HB3 | 8 | 1.5 |
| (1,2666) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:64:HIS:HB3 | 19 | 1.5 |
| (1,1391) | 1:A:23:ASP:HB3 | 1:A:67:LEU:HB2 | 11 | 1.5 |
| (1,1055) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:6:GLN:HB2 | 12 | 1.5 |
| (1,1055) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:6:GLN:HB2 | 12 | 1.5 |
| (1,1055) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:6:GLN:HB2 | 12 | 1.5 |
| (1,997) | 1:A:6:GLN:HG2 | 1:A:6:GLN:H | 14 | 1.49 |
| (1,985) | 1:A:44:PRO:HG2 | 1:A:54:ALA:H | 17 | 1.49 |
| (1,910) | 1:A:45:ASP:HA | 1:A:44:PRO:HB3 | 13 | 1.49 |
| (1,910) | 1:A:45:ASP:HA | 1:A:44:PRO:HB3 | 14 | 1.49 |
| (1,2549) | 1:A:50:ASN:HD21 | 1:A:52:GLU:HB3 | 1 | 1.49 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:25:ASN:HD22 | 1 | 1.49 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:25:ASN:HD22 | 1 | 1.49 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:25:ASN:HD22 | 1 | 1.49 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:25:ASN:HD22 | 9 | 1.49 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:25:ASN:HD22 | 9 | 1.49 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:25:ASN:HD22 | 9 | 1.49 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:25:ASN:HD22 | 16 | 1.49 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:25:ASN:HD22 | 16 | 1.49 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:25:ASN:HD22 | 16 | 1.49 |
| (1,1391) | 1:A:23:ASP:HB3 | 1:A:67:LEU:HB2 | 8 | 1.49 |
| (1,1391) | 1:A:23:ASP:HB3 | 1:A:67:LEU:HB2 | 18 | 1.49 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:25:ASN:HD22 | 10 | 1.49 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:25:ASN:HD22 | 10 | 1.49 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:25:ASN:HD22 | 10 | 1.49 |
| (1,910) | 1:A:45:ASP:HA | 1:A:44:PRO:HB3 | 3 | 1.48 |
| (1,910) | 1:A:45:ASP:HA | 1:A:44:PRO:HB3 | 4 | 1.48 |
| (1,910) | 1:A:45:ASP:HA | 1:A:44:PRO:HB3 | 8 | 1.48 |
| (1,910) | 1:A:45:ASP:HA | 1:A:44:PRO:HB3 | 9 | 1.48 |
| (1,910) | 1:A:45:ASP:HA | 1:A:44:PRO:HB3 | 10 | 1.48 |
| (1,910) | 1:A:45:ASP:HA | 1:A:44:PRO:HB3 | 11 | 1.48 |
| (1,910) | 1:A:45:ASP:HA | 1:A:44:PRO:HB3 | 18 | 1.48 |
| (1,2666) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:64:HIS:HB3 | 7 | 1.48 |
| (1,1751) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:H | 4 | 1.48 |
| (1,1751) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:H | 13 | 1.48 |
| (1,1668) | 1:A:99:PHE:HA | 1:A:100:VAL:HG13 | 1 | 1.48 |
| (1,1668) | 1:A:99:PHE:HA | 1:A:100:VAL:HG11 | 1 | 1.48 |
| (1,1668) | 1:A:99:PHE:HA | 1:A:100:VAL:HG12 | 1 | 1.48 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:25:ASN:HD22 | 19 | 1.48 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:25:ASN:HD22 | 19 | 1.48 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:25:ASN:HD22 | 19 | 1.48 |
| (1,1391) | 1:A:23:ASP:HB3 | 1:A:67:LEU:HB2 | 1 | 1.48 |
| (1,1391) | 1:A:23:ASP:HB3 | 1:A:67:LEU:HB2 | 4 | 1.48 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:25:ASN:HD22 | 11 | 1.48 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:25:ASN:HD22 | 11 | 1.48 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:25:ASN:HD22 | 11 | 1.48 |
| (1,997) | 1:A:6:GLN:HG2 | 1:A:6:GLN:H | 5 | 1.47 |
| (1,910) | 1:A:45:ASP:HA | 1:A:44:PRO:HB3 | 12 | 1.47 |
| (1,910) | 1:A:45:ASP:HA | 1:A:44:PRO:HB3 | 19 | 1.47 |
| (1,2666) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:64:HIS:HB3 | 20 | 1.47 |
| (1,2549) | 1:A:50:ASN:HD21 | 1:A:52:GLU:HB3 | 11 | 1.47 |
| (1,1751) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:H | 1 | 1.47 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:25:ASN:HD22 | 5 | 1.47 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:25:ASN:HD22 | 5 | 1.47 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:25:ASN:HD22 | 5 | 1.47 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:25:ASN:HD22 | 13 | 1.47 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:25:ASN:HD22 | 13 | 1.47 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:25:ASN:HD22 | 13 | 1.47 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:25:ASN:HD22 | 16 | 1.47 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:25:ASN:HD22 | 16 | 1.47 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:25:ASN:HD22 | 16 | 1.47 |
| (1,1008) | 1:A:8:SER:HA | 1:A:9:LEU:HD11 | 15 | 1.47 |
| (1,1008) | 1:A:8:SER:HA | 1:A:9:LEU:HD13 | 15 | 1.47 |
| (1,1008) | 1:A:8:SER:HA | 1:A:9:LEU:HD12 | 15 | 1.47 |
| (1,910) | 1:A:45:ASP:HA | 1:A:44:PRO:HB3 | 1 | 1.46 |
| (1,910) | 1:A:45:ASP:HA | 1:A:44:PRO:HB3 | 17 | 1.46 |
| (1,910) | 1:A:45:ASP:HA | 1:A:44:PRO:HB3 | 20 | 1.46 |
| (1,2666) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:64:HIS:HB3 | 13 | 1.46 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB1 | 1:A:62:ASN:HB2 | 15 | 1.46 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB2 | 1:A:62:ASN:HB2 | 15 | 1.46 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB3 | 1:A:62:ASN:HB2 | 15 | 1.46 |
| (1,1751) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:H | 5 | 1.46 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:25:ASN:HD22 | 10 | 1.46 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:25:ASN:HD22 | 10 | 1.46 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:25:ASN:HD22 | 10 | 1.46 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:25:ASN:HD22 | 18 | 1.46 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:25:ASN:HD22 | 18 | 1.46 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:25:ASN:HD22 | 18 | 1.46 |
| (1,910) | 1:A:45:ASP:HA | 1:A:44:PRO:HB3 | 6 | 1.45 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB1 | 1:A:62:ASN:HB2 | 16 | 1.45 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB2 | 1:A:62:ASN:HB2 | 16 | 1.45 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB3 | 1:A:62:ASN:HB2 | 16 | 1.45 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:25:ASN:HD22 | 17 | 1.45 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:25:ASN:HD22 | 17 | 1.45 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:25:ASN:HD22 | 17 | 1.45 |
| (1,1391) | 1:A:23:ASP:HB3 | 1:A:67:LEU:HB2 | 17 | 1.45 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:25:ASN:HD22 | 1 | 1.45 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:25:ASN:HD22 | 1 | 1.45 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:25:ASN:HD22 | 1 | 1.45 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:25:ASN:HD22 | 18 | 1.45 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:25:ASN:HD22 | 18 | 1.45 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:25:ASN:HD22 | 18 | 1.45 |
| (1,1055) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:6:GLN:HB2 | 20 | 1.45 |
| (1,1055) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:6:GLN:HB2 | 20 | 1.45 |
| (1,1055) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:6:GLN:HB2 | 20 | 1.45 |
| (1,910) | 1:A:45:ASP:HA | 1:A:44:PRO:HB3 | 16 | 1.44 |
| (1,2666) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:64:HIS:HB3 | 16 | 1.44 |
| (1,2189) | 1:A:73:ARG:HD3 | 1:A:62:ASN:HD22 | 15 | 1.44 |
| (1,2189) | 1:A:73:ARG:HD3 | 1:A:62:ASN:HD22 | 16 | 1.44 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB1 | 1:A:62:ASN:HB2 | 1 | 1.44 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB2 | 1:A:62:ASN:HB2 | 1 | 1.44 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB3 | 1:A:62:ASN:HB2 | 1 | 1.44 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB1 | 1:A:62:ASN:HB2 | 11 | 1.44 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB2 | 1:A:62:ASN:HB2 | 11 | 1.44 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB3 | 1:A:62:ASN:HB2 | 11 | 1.44 |
| (1,1534) | 1:A:35:TYR:HA | 1:A:38:LEU:HB2 | 13 | 1.44 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:25:ASN:HD22 | 12 | 1.44 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:25:ASN:HD22 | 12 | 1.44 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:25:ASN:HD22 | 12 | 1.44 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:25:ASN:HD22 | 12 | 1.44 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:25:ASN:HD22 | 12 | 1.44 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:25:ASN:HD22 | 12 | 1.44 |
| (1,910) | 1:A:45:ASP:HA | 1:A:44:PRO:HB3 | 2 | 1.43 |
| (1,2203) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:73:ARG:HB2 | 12 | 1.43 |
| (1,2189) | 1:A:73:ARG:HD3 | 1:A:62:ASN:HD22 | 8 | 1.43 |
| (1,1751) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:H | 15 | 1.43 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:25:ASN:HD22 | 15 | 1.43 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:25:ASN:HD22 | 15 | 1.43 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:25:ASN:HD22 | 15 | 1.43 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:25:ASN:HD22 | 2 | 1.43 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:25:ASN:HD22 | 2 | 1.43 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:25:ASN:HD22 | 2 | 1.43 |
| (1,997) | 1:A:6:GLN:HG2 | 1:A:6:GLN:H | 13 | 1.42 |
| (1,910) | 1:A:45:ASP:HA | 1:A:44:PRO:HB3 | 7 | 1.42 |
| (1,2203) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:73:ARG:HB2 | 4 | 1.42 |
| (1,2203) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:73:ARG:HB2 | 13 | 1.42 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB1 | 1:A:62:ASN:HB2 | 2 | 1.42 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB2 | 1:A:62:ASN:HB2 | 2 | 1.42 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB3 | 1:A:62:ASN:HB2 | 2 | 1.42 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:25:ASN:HD22 | 6 | 1.42 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:25:ASN:HD22 | 6 | 1.42 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:25:ASN:HD22 | 6 | 1.42 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:25:ASN:HD22 | 8 | 1.42 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:25:ASN:HD22 | 8 | 1.42 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:25:ASN:HD22 | 8 | 1.42 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:25:ASN:HD22 | 14 | 1.42 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:25:ASN:HD22 | 14 | 1.42 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:25:ASN:HD22 | 14 | 1.42 |
| (1,2203) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:73:ARG:HB2 | 5 | 1.41 |
| (1,2203) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:73:ARG:HB2 | 6 | 1.41 |
| (1,2203) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:73:ARG:HB2 | 7 | 1.41 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2203) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:73:ARG:HB2 | 14 | 1.41 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB1 | 1:A:62:ASN:HB2 | 5 | 1.41 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB2 | 1:A:62:ASN:HB2 | 5 | 1.41 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB3 | 1:A:62:ASN:HB2 | 5 | 1.41 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB1 | 1:A:62:ASN:HB2 | 12 | 1.41 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB2 | 1:A:62:ASN:HB2 | 12 | 1.41 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB3 | 1:A:62:ASN:HB2 | 12 | 1.41 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB2 | 1:A:44:PRO:HB2 | 18 | 1.41 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB1 | 1:A:44:PRO:HB2 | 18 | 1.41 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB3 | 1:A:44:PRO:HB2 | 18 | 1.41 |
| (1,1534) | 1:A:35:TYR:HA | 1:A:38:LEU:HB2 | 4 | 1.41 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:25:ASN:HD22 | 7 | 1.41 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:25:ASN:HD22 | 7 | 1.41 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:25:ASN:HD22 | 7 | 1.41 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:25:ASN:HD22 | 20 | 1.41 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:25:ASN:HD22 | 20 | 1.41 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:25:ASN:HD22 | 20 | 1.41 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:25:ASN:HD22 | 5 | 1.41 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:25:ASN:HD22 | 5 | 1.41 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:25:ASN:HD22 | 5 | 1.41 |
| (1,2203) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:73:ARG:HB2 | 9 | 1.4 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB1 | 1:A:62:ASN:HB2 | 18 | 1.4 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB2 | 1:A:62:ASN:HB2 | 18 | 1.4 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB3 | 1:A:62:ASN:HB2 | 18 | 1.4 |
| (1,1751) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:H | 17 | 1.4 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:25:ASN:HD22 | 2 | 1.4 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:25:ASN:HD22 | 2 | 1.4 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:25:ASN:HD22 | 2 | 1.4 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:25:ASN:HD22 | 11 | 1.4 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:25:ASN:HD22 | 11 | 1.4 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:25:ASN:HD22 | 11 | 1.4 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:25:ASN:HD22 | 13 | 1.4 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:25:ASN:HD22 | 13 | 1.4 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:25:ASN:HD22 | 13 | 1.4 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:25:ASN:HD22 | 17 | 1.4 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:25:ASN:HD22 | 17 | 1.4 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:25:ASN:HD22 | 17 | 1.4 |
| (1,2203) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:73:ARG:HB2 | 1 | 1.39 |
| (1,2203) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:73:ARG:HB2 | 10 | 1.39 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB1 | 1:A:62:ASN:HB2 | 14 | 1.39 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB2 | 1:A:62:ASN:HB2 | 14 | 1.39 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB3 | 1:A:62:ASN:HB2 | 14 | 1.39 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB1 | 1:A:62:ASN:HB2 | 17 | 1.39 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB2 | 1:A:62:ASN:HB2 | 17 | 1.39 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB3 | 1:A:62:ASN:HB2 | 17 | 1.39 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB1 | 1:A:62:ASN:HB2 | 20 | 1.39 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB2 | 1:A:62:ASN:HB2 | 20 | 1.39 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB3 | 1:A:62:ASN:HB2 | 20 | 1.39 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:25:ASN:HD22 | 3 | 1.39 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:25:ASN:HD22 | 3 | 1.39 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:25:ASN:HD22 | 3 | 1.39 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:25:ASN:HD22 | 4 | 1.39 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:25:ASN:HD22 | 4 | 1.39 |
| (1,1491) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:25:ASN:HD22 | 4 | 1.39 |
| (1,2203) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:73:ARG:HB2 | 18 | 1.38 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB1 | 1:A:62:ASN:HB2 | 9 | 1.38 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB2 | 1:A:62:ASN:HB2 | 9 | 1.38 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB3 | 1:A:62:ASN:HB2 | 9 | 1.38 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB1 | 1:A:62:ASN:HB2 | 19 | 1.38 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB2 | 1:A:62:ASN:HB2 | 19 | 1.38 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB3 | 1:A:62:ASN:HB2 | 19 | 1.38 |
| (1,1668) | 1:A:99:PHE:HA | 1:A:100:VAL:HG13 | 7 | 1.38 |
| (1,1668) | 1:A:99:PHE:HA | 1:A:100:VAL:HG11 | 7 | 1.38 |
| (1,1668) | 1:A:99:PHE:HA | 1:A:100:VAL:HG12 | 7 | 1.38 |
| (1,927) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:57:PHE:H | 12 | 1.37 |
| (1,2203) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:73:ARG:HB2 | 2 | 1.37 |
| (1,2203) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:73:ARG:HB2 | 3 | 1.37 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB1 | 1:A:62:ASN:HB2 | 10 | 1.37 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB2 | 1:A:62:ASN:HB2 | 10 | 1.37 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB3 | 1:A:62:ASN:HB2 | 10 | 1.37 |
| (1,1751) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:H | 10 | 1.37 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG21 | 14 | 1.37 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG22 | 14 | 1.37 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG23 | 14 | 1.37 |
| (1,997) | 1:A:6:GLN:HG2 | 1:A:6:GLN:H | 11 | 1.36 |
| (1,2203) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:73:ARG:HB2 | 8 | 1.36 |
| (1,2203) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:73:ARG:HB2 | 19 | 1.35 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB1 | 1:A:62:ASN:HB2 | 8 | 1.35 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB2 | 1:A:62:ASN:HB2 | 8 | 1.35 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB3 | 1:A:62:ASN:HB2 | 8 | 1.35 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:25:ASN:HD22 | 7 | 1.35 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:25:ASN:HD22 | 7 | 1.35 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:25:ASN:HD22 | 7 | 1.35 |
| (1,2203) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:73:ARG:HB2 | 16 | 1.34 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2203) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:73:ARG:HB2 | 20 | 1.34 |
| (1,1668) | 1:A:99:PHE:HA | 1:A:100:VAL:HG13 | 15 | 1.34 |
| (1,1668) | 1:A:99:PHE:HA | 1:A:100:VAL:HG11 | 15 | 1.34 |
| (1,1668) | 1:A:99:PHE:HA | 1:A:100:VAL:HG12 | 15 | 1.34 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:25:ASN:HD22 | 8 | 1.34 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:25:ASN:HD22 | 8 | 1.34 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:25:ASN:HD22 | 8 | 1.34 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG21 | 1 | 1.34 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG22 | 1 | 1.34 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG23 | 1 | 1.34 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG21 | 16 | 1.34 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG22 | 16 | 1.34 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG23 | 16 | 1.34 |
| (1,1057) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:6:GLN:HG3 | 1 | 1.34 |
| (1,1057) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:6:GLN:HG3 | 1 | 1.34 |
| (1,1057) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:6:GLN:HG3 | 1 | 1.34 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB1 | 1:A:62:ASN:HB2 | 3 | 1.33 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB2 | 1:A:62:ASN:HB2 | 3 | 1.33 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB3 | 1:A:62:ASN:HB2 | 3 | 1.33 |
| (1,1534) | 1:A:35:TYR:HA | 1:A:38:LEU:HB2 | 2 | 1.33 |
| (1,1454) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:32:LYS:HG3 | 14 | 1.33 |
| (1,1407) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:25:ASN:HA | 8 | 1.33 |
| (1,1076) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:33:LYS:HB3 | 9 | 1.33 |
| (1,1076) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:33:LYS:HB3 | 19 | 1.33 |
| (1,2203) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:73:ARG:HB2 | 15 | 1.32 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB1 | 1:A:62:ASN:HB2 | 13 | 1.32 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB2 | 1:A:62:ASN:HB2 | 13 | 1.32 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB3 | 1:A:62:ASN:HB2 | 13 | 1.32 |
| (1,1534) | 1:A:35:TYR:HA | 1:A:38:LEU:HB2 | 5 | 1.32 |
| (1,1361) | 1:A:86:VAL:HG12 | 1:A:82:LEU:HD12 | 7 | 1.32 |
| (1,1361) | 1:A:86:VAL:HG12 | 1:A:82:LEU:HD11 | 7 | 1.32 |
| (1,1361) | 1:A:86:VAL:HG12 | 1:A:82:LEU:HD13 | 7 | 1.32 |
| (1,1361) | 1:A:86:VAL:HG11 | 1:A:82:LEU:HD12 | 7 | 1.32 |
| (1,1361) | 1:A:86:VAL:HG11 | 1:A:82:LEU:HD11 | 7 | 1.32 |
| (1,1361) | 1:A:86:VAL:HG11 | 1:A:82:LEU:HD13 | 7 | 1.32 |
| (1,1361) | 1:A:86:VAL:HG13 | 1:A:82:LEU:HD12 | 7 | 1.32 |
| (1,1361) | 1:A:86:VAL:HG13 | 1:A:82:LEU:HD11 | 7 | 1.32 |
| (1,1361) | 1:A:86:VAL:HG13 | 1:A:82:LEU:HD13 | 7 | 1.32 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:25:ASN:HD22 | 3 | 1.32 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:25:ASN:HD22 | 3 | 1.32 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:25:ASN:HD22 | 3 | 1.32 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:25:ASN:HD22 | 6 | 1.32 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:25:ASN:HD22 | 6 | 1.32 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:25:ASN:HD22 | 6 | 1.32 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:25:ASN:HD22 | 20 | 1.32 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:25:ASN:HD22 | 20 | 1.32 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:25:ASN:HD22 | 20 | 1.32 |
| (1,927) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:57:PHE:H | 11 | 1.31 |
| (1,886) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:81:SER:HB2 | 15 | 1.31 |
| (1,886) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:81:SER:HB2 | 15 | 1.31 |
| (1,886) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:81:SER:HB2 | 15 | 1.31 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:25:ASN:HD22 | 9 | 1.31 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:25:ASN:HD22 | 9 | 1.31 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:25:ASN:HD22 | 9 | 1.31 |
| (1,997) | 1:A:6:GLN:HG2 | 1:A:6:GLN:H | 7 | 1.3 |
| (1,995) | 1:A:6:GLN:HG3 | 1:A:82:LEU:HD21 | 7 | 1.3 |
| (1,995) | 1:A:6:GLN:HG3 | 1:A:82:LEU:HD22 | 7 | 1.3 |
| (1,995) | 1:A:6:GLN:HG3 | 1:A:82:LEU:HD23 | 7 | 1.3 |
| (1,2203) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:73:ARG:HB2 | 17 | 1.3 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB1 | 1:A:62:ASN:HB2 | 7 | 1.3 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB2 | 1:A:62:ASN:HB2 | 7 | 1.3 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB3 | 1:A:62:ASN:HB2 | 7 | 1.3 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG21 | 20 | 1.3 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG22 | 20 | 1.3 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG23 | 20 | 1.3 |
| (1,1055) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:6:GLN:HB2 | 1 | 1.3 |
| (1,1055) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:6:GLN:HB2 | 1 | 1.3 |
| (1,1055) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:6:GLN:HB2 | 1 | 1.3 |
| (1,2213) | 1:A:75:ILE:HD11 | 1:A:92:GLU:HG2 | 12 | 1.29 |
| (1,2213) | 1:A:75:ILE:HD12 | 1:A:92:GLU:HG2 | 12 | 1.29 |
| (1,2213) | 1:A:75:ILE:HD13 | 1:A:92:GLU:HG2 | 12 | 1.29 |
| (1,2189) | 1:A:73:ARG:HD3 | 1:A:62:ASN:HD22 | 7 | 1.29 |
| (1,2189) | 1:A:73:ARG:HD3 | 1:A:62:ASN:HD22 | 11 | 1.29 |
| (1,2189) | 1:A:73:ARG:HD3 | 1:A:62:ASN:HD22 | 19 | 1.29 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB1 | 1:A:62:ASN:HB2 | 6 | 1.29 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB2 | 1:A:62:ASN:HB2 | 6 | 1.29 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB3 | 1:A:62:ASN:HB2 | 6 | 1.29 |
| (1,1751) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:H | 2 | 1.29 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:25:ASN:HD22 | 4 | 1.29 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:25:ASN:HD22 | 4 | 1.29 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:25:ASN:HD22 | 4 | 1.29 |
| (1,644) | 1:A:84:LEU:H | 1:A:92:GLU:HG3 | 1 | 1.28 |
| (1,644) | 1:A:84:LEU:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 1 | 1.28 |
| (1,1057) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:6:GLN:HG3 | 16 | 1.28 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1057) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:6:GLN:HG3 | 16 | 1.28 |
| (1,1057) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:6:GLN:HG3 | 16 | 1.28 |
| (1,1057) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:6:GLN:HG3 | 20 | 1.28 |
| (1,1057) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:6:GLN:HG3 | 20 | 1.28 |
| (1,1057) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:6:GLN:HG3 | 20 | 1.28 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:25:ASN:HD22 | 19 | 1.27 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:25:ASN:HD22 | 19 | 1.27 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:25:ASN:HD22 | 19 | 1.27 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD12 | 1:A:85:TYR:HB2 | 6 | 1.26 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD11 | 1:A:85:TYR:HB2 | 6 | 1.26 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD13 | 1:A:85:TYR:HB2 | 6 | 1.26 |
| (1,1751) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:H | 19 | 1.26 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG21 | 11 | 1.26 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG22 | 11 | 1.26 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG23 | 11 | 1.26 |
| (1,927) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:57:PHE:H | 19 | 1.25 |
| (1,2729) | 1:A:11:THR:H | 1:A:82:LEU:HD21 | 7 | 1.25 |
| (1,2729) | 1:A:11:THR:H | 1:A:82:LEU:HD22 | 7 | 1.25 |
| (1,2729) | 1:A:11:THR:H | 1:A:82:LEU:HD23 | 7 | 1.25 |
| (1,1357) | 1:A:22:LEU:HB2 | 1:A:68:THR:H | 8 | 1.25 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:25:ASN:HD22 | 14 | 1.25 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:25:ASN:HD22 | 14 | 1.25 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:25:ASN:HD22 | 14 | 1.25 |
| (1,1057) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:6:GLN:HG3 | 12 | 1.25 |
| (1,1057) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:6:GLN:HG3 | 12 | 1.25 |
| (1,1057) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:6:GLN:HG3 | 12 | 1.25 |
| (1,927) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:57:PHE:H | 3 | 1.24 |
| (1,927) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:57:PHE:H | 20 | 1.24 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD12 | 1:A:85:TYR:HB2 | 17 | 1.24 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD11 | 1:A:85:TYR:HB2 | 17 | 1.24 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD13 | 1:A:85:TYR:HB2 | 17 | 1.24 |
| (1,1751) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:H | 8 | 1.24 |
| (1,1454) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:32:LYS:HG3 | 4 | 1.24 |
| (1,927) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:57:PHE:H | 9 | 1.23 |
| (1,2852) | 1:A:61:ASN:H | 1:A:61:ASN:HD22 | 6 | 1.23 |
| (1,2852) | 1:A:61:ASN:H | 1:A:61:ASN:HD22 | 13 | 1.23 |
| (1,2852) | 1:A:61:ASN:H | 1:A:61:ASN:HD22 | 17 | 1.23 |
| (1,2852) | 1:A:61:ASN:H | 1:A:61:ASN:HD22 | 19 | 1.23 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD12 | 1:A:85:TYR:HB2 | 3 | 1.23 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD11 | 1:A:85:TYR:HB2 | 3 | 1.23 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD13 | 1:A:85:TYR:HB2 | 3 | 1.23 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD12 | 1:A:85:TYR:HB2 | 8 | 1.23 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD11 | 1:A:85:TYR:HB2 | 8 | 1.23 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD13 | 1:A:85:TYR:HB2 | 8 | 1.23 |
| (1,2213) | 1:A:75:ILE:HD11 | 1:A:92:GLU:HG2 | 16 | 1.23 |
| (1,2213) | 1:A:75:ILE:HD12 | 1:A:92:GLU:HG2 | 16 | 1.23 |
| (1,2213) | 1:A:75:ILE:HD13 | 1:A:92:GLU:HG2 | 16 | 1.23 |
| (1,1408) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HA | 8 | 1.23 |
| (1,1357) | 1:A:22:LEU:HB2 | 1:A:68:THR:H | 17 | 1.23 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG21 | 12 | 1.23 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG22 | 12 | 1.23 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG23 | 12 | 1.23 |
| (1,997) | 1:A:6:GLN:HG2 | 1:A:6:GLN:H | 19 | 1.22 |
| (1,927) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:57:PHE:H | 18 | 1.22 |
| (1,2852) | 1:A:61:ASN:H | 1:A:61:ASN:HD22 | 3 | 1.22 |
| (1,2852) | 1:A:61:ASN:H | 1:A:61:ASN:HD22 | 4 | 1.22 |
| (1,2852) | 1:A:61:ASN:H | 1:A:61:ASN:HD22 | 12 | 1.22 |
| (1,2852) | 1:A:61:ASN:H | 1:A:61:ASN:HD22 | 14 | 1.22 |
| (1,2852) | 1:A:61:ASN:H | 1:A:61:ASN:HD22 | 15 | 1.22 |
| (1,2852) | 1:A:61:ASN:H | 1:A:61:ASN:HD22 | 18 | 1.22 |
| (1,2852) | 1:A:61:ASN:H | 1:A:61:ASN:HD22 | 20 | 1.22 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD12 | 1:A:85:TYR:HB2 | 12 | 1.22 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD11 | 1:A:85:TYR:HB2 | 12 | 1.22 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD13 | 1:A:85:TYR:HB2 | 12 | 1.22 |
| (1,2189) | 1:A:73:ARG:HD3 | 1:A:62:ASN:HD22 | 17 | 1.22 |
| (1,1916) | 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HG3 | 18 | 1.22 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB2 | 1:A:44:PRO:HB2 | 9 | 1.22 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB1 | 1:A:44:PRO:HB2 | 9 | 1.22 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB3 | 1:A:44:PRO:HB2 | 9 | 1.22 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG21 | 4 | 1.22 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG22 | 4 | 1.22 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG23 | 4 | 1.22 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG21 | 15 | 1.22 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG22 | 15 | 1.22 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG23 | 15 | 1.22 |
| (1,1076) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:33:LYS:HB3 | 10 | 1.22 |
| (1,927) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:57:PHE:H | 5 | 1.21 |
| (1,927) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:57:PHE:H | 6 | 1.21 |
| (1,2585) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:62:ASN:H | 19 | 1.21 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD12 | 1:A:85:TYR:HB2 | 4 | 1.21 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD11 | 1:A:85:TYR:HB2 | 4 | 1.21 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD13 | 1:A:85:TYR:HB2 | 4 | 1.21 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD12 | 1:A:85:TYR:HB2 | 10 | 1.21 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD11 | 1:A:85:TYR:HB2 | 10 | 1.21 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD13 | 1:A:85:TYR:HB2 | 10 | 1.21 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD12 | 1:A:85:TYR:HB2 | 18 | 1.21 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD11 | 1:A:85:TYR:HB2 | 18 | 1.21 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD13 | 1:A:85:TYR:HB2 | 18 | 1.21 |
| (1,2189) | 1:A:73:ARG:HD3 | 1:A:62:ASN:HD22 | 20 | 1.21 |
| (1,1357) | 1:A:22:LEU:HB2 | 1:A:68:THR:H | 1 | 1.21 |
| (1,1050) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:10:SEP:H | 15 | 1.21 |
| (1,1050) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:10:SEP:H | 15 | 1.21 |
| (1,1050) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:10:SEP:H | 15 | 1.21 |
| (1,982) | 1:A:5:ARG:HD3 | 1:A:5:ARG:HA | 5 | 1.2 |
| (1,927) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:57:PHE:H | 8 | 1.2 |
| (1,2852) | 1:A:61:ASN:H | 1:A:61:ASN:HD22 | 5 | 1.2 |
| (1,2852) | 1:A:61:ASN:H | 1:A:61:ASN:HD22 | 16 | 1.2 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD12 | 1:A:85:TYR:HB2 | 20 | 1.2 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD11 | 1:A:85:TYR:HB2 | 20 | 1.2 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD13 | 1:A:85:TYR:HB2 | 20 | 1.2 |
| (1,2290) | 1:A:82:LEU:HA | 1:A:82:LEU:HD12 | 7 | 1.2 |
| (1,2290) | 1:A:82:LEU:HA | 1:A:82:LEU:HD11 | 7 | 1.2 |
| (1,2290) | 1:A:82:LEU:HA | 1:A:82:LEU:HD13 | 7 | 1.2 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB1 | 1:A:62:ASN:HB2 | 4 | 1.2 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB2 | 1:A:62:ASN:HB2 | 4 | 1.2 |
| (1,2030) | 1:A:63:ALA:HB3 | 1:A:62:ASN:HB2 | 4 | 1.2 |
| (1,1916) | 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HG3 | 14 | 1.2 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:25:ASN:HD22 | 15 | 1.2 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:25:ASN:HD22 | 15 | 1.2 |
| (1,1322) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:25:ASN:HD22 | 15 | 1.2 |
| (1,994) | 1:A:4:GLN:HB3 | 1:A:3:ASP:HA | 15 | 1.19 |
| (1,927) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:57:PHE:H | 1 | 1.19 |
| (1,927) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:57:PHE:H | 15 | 1.19 |
| (1,2852) | 1:A:61:ASN:H | 1:A:61:ASN:HD22 | 2 | 1.19 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD12 | 1:A:85:TYR:HB2 | 13 | 1.19 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD11 | 1:A:85:TYR:HB2 | 13 | 1.19 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD13 | 1:A:85:TYR:HB2 | 13 | 1.19 |
| (1,1916) | 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HG3 | 4 | 1.19 |
| (1,1916) | 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HG3 | 5 | 1.19 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB2 | 1:A:44:PRO:HB2 | 3 | 1.19 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB1 | 1:A:44:PRO:HB2 | 3 | 1.19 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB3 | 1:A:44:PRO:HB2 | 3 | 1.19 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB2 | 1:A:44:PRO:HB2 | 19 | 1.19 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB1 | 1:A:44:PRO:HB2 | 19 | 1.19 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB3 | 1:A:44:PRO:HB2 | 19 | 1.19 |
| (1,1662) | 1:A:41:LYS:HE3 | 1:A:42:TYR:HD2 | 11 | 1.19 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1662) | 1:A:41:LYS:HE3 | 1:A:42:TYR:HD1 | 11 | 1.19 |
| (1,1357) | 1:A:22:LEU:HB2 | 1:A:68:THR:H | 9 | 1.19 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD12 | 1:A:85:TYR:HB2 | 11 | 1.18 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD11 | 1:A:85:TYR:HB2 | 11 | 1.18 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD13 | 1:A:85:TYR:HB2 | 11 | 1.18 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB2 | 1:A:44:PRO:HB2 | 13 | 1.18 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB1 | 1:A:44:PRO:HB2 | 13 | 1.18 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB3 | 1:A:44:PRO:HB2 | 13 | 1.18 |
| (1,1839) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:59:GLU:H | 8 | 1.18 |
| (1,1839) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:59:GLU:H | 18 | 1.18 |
| (1,1534) | 1:A:35:TYR:HA | 1:A:38:LEU:HB2 | 6 | 1.18 |
| (1,994) | 1:A:4:GLN:HB3 | 1:A:3:ASP:HA | 20 | 1.17 |
| (1,982) | 1:A:5:ARG:HD3 | 1:A:5:ARG:HA | 9 | 1.17 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD12 | 1:A:85:TYR:HB2 | 9 | 1.17 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD11 | 1:A:85:TYR:HB2 | 9 | 1.17 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD13 | 1:A:85:TYR:HB2 | 9 | 1.17 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB2 | 1:A:44:PRO:HB2 | 5 | 1.17 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB1 | 1:A:44:PRO:HB2 | 5 | 1.17 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB3 | 1:A:44:PRO:HB2 | 5 | 1.17 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB2 | 1:A:44:PRO:HB2 | 7 | 1.17 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB1 | 1:A:44:PRO:HB2 | 7 | 1.17 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB3 | 1:A:44:PRO:HB2 | 7 | 1.17 |
| (1,1839) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:59:GLU:H | 1 | 1.17 |
| (1,1839) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:59:GLU:H | 14 | 1.17 |
| (1,1454) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:32:LYS:HG3 | 16 | 1.17 |
| (1,1357) | 1:A:22:LEU:HB2 | 1:A:68:THR:H | 12 | 1.17 |
| (1,1357) | 1:A:22:LEU:HB2 | 1:A:68:THR:H | 14 | 1.17 |
| (1,1357) | 1:A:22:LEU:HB2 | 1:A:68:THR:H | 18 | 1.17 |
| (1,994) | 1:A:4:GLN:HB3 | 1:A:3:ASP:HA | 18 | 1.16 |
| (1,927) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:57:PHE:H | 17 | 1.16 |
| (1,2852) | 1:A:61:ASN:H | 1:A:61:ASN:HD22 | 7 | 1.16 |
| (1,1916) | 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HG3 | 1 | 1.16 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB2 | 1:A:44:PRO:HB2 | 15 | 1.16 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB1 | 1:A:44:PRO:HB2 | 15 | 1.16 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB3 | 1:A:44:PRO:HB2 | 15 | 1.16 |
| (1,1751) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:H | 6 | 1.16 |
| (1,1454) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:32:LYS:HG3 | 3 | 1.16 |
| (1,1357) | 1:A:22:LEU:HB2 | 1:A:68:THR:H | 4 | 1.16 |
| (1,994) | 1:A:4:GLN:HB3 | 1:A:3:ASP:HA | 7 | 1.15 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD12 | 1:A:85:TYR:HB2 | 5 | 1.15 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD11 | 1:A:85:TYR:HB2 | 5 | 1.15 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD13 | 1:A:85:TYR:HB2 | 5 | 1.15 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD12 | 1:A:85:TYR:HB2 | 14 | 1.15 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD11 | 1:A:85:TYR:HB2 | 14 | 1.15 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD13 | 1:A:85:TYR:HB2 | 14 | 1.15 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD12 | 1:A:85:TYR:HB2 | 15 | 1.15 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD11 | 1:A:85:TYR:HB2 | 15 | 1.15 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD13 | 1:A:85:TYR:HB2 | 15 | 1.15 |
| (1,1916) | 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HG3 | 17 | 1.15 |
| (1,1839) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:59:GLU:H | 3 | 1.15 |
| (1,1839) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:59:GLU:H | 4 | 1.15 |
| (1,1839) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:59:GLU:H | 5 | 1.15 |
| (1,1733) | 1:A:99:PHE:HB2 | 1:A:100:VAL:HG13 | 7 | 1.15 |
| (1,1733) | 1:A:99:PHE:HB2 | 1:A:100:VAL:HG11 | 7 | 1.15 |
| (1,1733) | 1:A:99:PHE:HB2 | 1:A:100:VAL:HG12 | 7 | 1.15 |
| (1,1357) | 1:A:22:LEU:HB2 | 1:A:68:THR:H | 19 | 1.15 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG21 | 17 | 1.15 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG22 | 17 | 1.15 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG23 | 17 | 1.15 |
| (1,2852) | 1:A:61:ASN:H | 1:A:61:ASN:HD22 | 1 | 1.14 |
| (1,2852) | 1:A:61:ASN:H | 1:A:61:ASN:HD22 | 8 | 1.14 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB2 | 1:A:44:PRO:HB2 | 4 | 1.14 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB1 | 1:A:44:PRO:HB2 | 4 | 1.14 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB3 | 1:A:44:PRO:HB2 | 4 | 1.14 |
| (1,1839) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:59:GLU:H | 2 | 1.14 |
| (1,1839) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:59:GLU:H | 11 | 1.14 |
| (1,1839) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:59:GLU:H | 20 | 1.14 |
| (1,1408) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HA | 20 | 1.14 |
| (1,1043) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:85:TYR:HD2 | 15 | 1.14 |
| (1,1043) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:85:TYR:HD1 | 15 | 1.14 |
| (1,1043) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:85:TYR:HD2 | 15 | 1.14 |
| (1,1043) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:85:TYR:HD1 | 15 | 1.14 |
| (1,1043) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:85:TYR:HD2 | 15 | 1.14 |
| (1,1043) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:85:TYR:HD1 | 15 | 1.14 |
| (1,994) | 1:A:4:GLN:HB3 | 1:A:3:ASP:HA | 4 | 1.13 |
| (1,927) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:57:PHE:H | 14 | 1.13 |
| (1,2852) | 1:A:61:ASN:H | 1:A:61:ASN:HD22 | 11 | 1.13 |
| (1,1916) | 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HG3 | 12 | 1.13 |
| (1,1839) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:59:GLU:H | 16 | 1.13 |
| (1,1752) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:47:ASN:HD22 | 14 | 1.13 |
| (1,1751) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:H | 12 | 1.13 |
| (1,1751) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:H | 14 | 1.13 |
| (1,1461) | 1:A:29:ASP:HB3 | 1:A:27:THR:HG21 | 12 | 1.13 |
| (1,1461) | 1:A:29:ASP:HB3 | 1:A:27:THR:HG22 | 12 | 1.13 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1461) | 1:A:29:ASP:HB3 | 1:A:27:THR:HG23 | 12 | 1.13 |
| (1,1360) | 1:A:86:VAL:HG12 | 1:A:82:LEU:HG | 7 | 1.13 |
| (1,1360) | 1:A:86:VAL:HG11 | 1:A:82:LEU:HG | 7 | 1.13 |
| (1,1360) | 1:A:86:VAL:HG13 | 1:A:82:LEU:HG | 7 | 1.13 |
| (1,1076) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:33:LYS:HB3 | 2 | 1.13 |
| (1,1076) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:33:LYS:HB3 | 14 | 1.13 |
| (1,2852) | 1:A:61:ASN:H | 1:A:61:ASN:HD22 | 10 | 1.12 |
| (1,2213) | 1:A:75:ILE:HD11 | 1:A:92:GLU:HG2 | 7 | 1.12 |
| (1,2213) | 1:A:75:ILE:HD12 | 1:A:92:GLU:HG2 | 7 | 1.12 |
| (1,2213) | 1:A:75:ILE:HD13 | 1:A:92:GLU:HG2 | 7 | 1.12 |
| (1,1916) | 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HG3 | 2 | 1.12 |
| (1,1839) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:59:GLU:H | 9 | 1.12 |
| (1,1839) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:59:GLU:H | 12 | 1.12 |
| (1,1752) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:47:ASN:HD22 | 17 | 1.12 |
| (1,1751) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:H | 9 | 1.12 |
| (1,1461) | 1:A:29:ASP:HB3 | 1:A:27:THR:HG21 | 2 | 1.12 |
| (1,1461) | 1:A:29:ASP:HB3 | 1:A:27:THR:HG22 | 2 | 1.12 |
| (1,1461) | 1:A:29:ASP:HB3 | 1:A:27:THR:HG23 | 2 | 1.12 |
| (1,1357) | 1:A:22:LEU:HB2 | 1:A:68:THR:H | 2 | 1.12 |
| (1,1357) | 1:A:22:LEU:HB2 | 1:A:68:THR:H | 3 | 1.12 |
| (1,2852) | 1:A:61:ASN:H | 1:A:61:ASN:HD22 | 9 | 1.11 |
| (1,2213) | 1:A:75:ILE:HD11 | 1:A:92:GLU:HG2 | 3 | 1.11 |
| (1,2213) | 1:A:75:ILE:HD12 | 1:A:92:GLU:HG2 | 3 | 1.11 |
| (1,2213) | 1:A:75:ILE:HD13 | 1:A:92:GLU:HG2 | 3 | 1.11 |
| (1,1752) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:47:ASN:HD22 | 12 | 1.11 |
| (1,1733) | 1:A:99:PHE:HB2 | 1:A:100:VAL:HG13 | 15 | 1.11 |
| (1,1733) | 1:A:99:PHE:HB2 | 1:A:100:VAL:HG11 | 15 | 1.11 |
| (1,1733) | 1:A:99:PHE:HB2 | 1:A:100:VAL:HG12 | 15 | 1.11 |
| (1,1461) | 1:A:29:ASP:HB3 | 1:A:27:THR:HG21 | 6 | 1.11 |
| (1,1461) | 1:A:29:ASP:HB3 | 1:A:27:THR:HG22 | 6 | 1.11 |
| (1,1461) | 1:A:29:ASP:HB3 | 1:A:27:THR:HG23 | 6 | 1.11 |
| (1,1408) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HA | 9 | 1.11 |
| (1,1357) | 1:A:22:LEU:HB2 | 1:A:68:THR:H | 7 | 1.11 |
| (1,994) | 1:A:4:GLN:HB3 | 1:A:3:ASP:HA | 19 | 1.1 |
| (1,984) | 1:A:5:ARG:HA | 1:A:5:ARG:HG2 | 5 | 1.1 |
| (1,984) | 1:A:5:ARG:HA | 1:A:5:ARG:HG2 | 9 | 1.1 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB2 | 1:A:44:PRO:HB2 | 6 | 1.1 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB1 | 1:A:44:PRO:HB2 | 6 | 1.1 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB3 | 1:A:44:PRO:HB2 | 6 | 1.1 |
| (1,1839) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:59:GLU:H | 6 | 1.1 |
| (1,1839) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:59:GLU:H | 13 | 1.1 |
| (1,1454) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:32:LYS:HG3 | 5 | 1.1 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1407) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:25:ASN:HA | 9 | 1.1 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG21 | 7 | 1.1 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG22 | 7 | 1.1 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG23 | 7 | 1.1 |
| (1,1075) | 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HB2 | 18 | 1.1 |
| (1,2585) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:62:ASN:H | 14 | 1.09 |
| (1,2213) | 1:A:75:ILE:HD11 | 1:A:92:GLU:HG2 | 5 | 1.09 |
| (1,2213) | 1:A:75:ILE:HD12 | 1:A:92:GLU:HG2 | 5 | 1.09 |
| (1,2213) | 1:A:75:ILE:HD13 | 1:A:92:GLU:HG2 | 5 | 1.09 |
| (1,1935) | 1:A:56:LYS:HB2 | 1:A:56:LYS:HE2 | 13 | 1.09 |
| (1,1916) | 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HG3 | 6 | 1.09 |
| (1,1916) | 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HG3 | 20 | 1.09 |
| (1,1752) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:47:ASN:HD22 | 9 | 1.09 |
| (1,1454) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:32:LYS:HG3 | 18 | 1.09 |
| (1,1357) | 1:A:22:LEU:HB2 | 1:A:68:THR:H | 6 | 1.09 |
| (1,984) | 1:A:5:ARG:HA | 1:A:5:ARG:HG2 | 16 | 1.08 |
| (1,927) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:57:PHE:H | 4 | 1.08 |
| (1,927) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:57:PHE:H | 16 | 1.08 |
| (1,1985) | 1:A:59:GLU:HG3 | 1:A:58:LYS:H | 9 | 1.08 |
| (1,1916) | 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HG3 | 3 | 1.08 |
| (1,1916) | 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HG3 | 11 | 1.08 |
| (1,1846) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:52:GLU:HA | 10 | 1.08 |
| (1,1839) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:59:GLU:H | 10 | 1.08 |
| (1,1839) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:59:GLU:H | 17 | 1.08 |
| (1,1839) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:59:GLU:H | 19 | 1.08 |
| (1,1454) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:32:LYS:HG3 | 1 | 1.08 |
| (1,1408) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HA | 16 | 1.08 |
| (1,1357) | 1:A:22:LEU:HB2 | 1:A:68:THR:H | 16 | 1.08 |
| (1,1357) | 1:A:22:LEU:HB2 | 1:A:68:THR:H | 20 | 1.08 |
| (1,949) | 1:A:90:PHE:HB2 | 1:A:94:ASN:HD22 | 1 | 1.07 |
| (1,927) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:57:PHE:H | 10 | 1.07 |
| (1,644) | 1:A:84:LEU:H | 1:A:92:GLU:HG3 | 13 | 1.07 |
| (1,644) | 1:A:84:LEU:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 13 | 1.07 |
| (1,2450) | 1:A:100:VAL:HG13 | 1:A:100:VAL:H | 1 | 1.07 |
| (1,2450) | 1:A:100:VAL:HG11 | 1:A:100:VAL:H | 1 | 1.07 |
| (1,2450) | 1:A:100:VAL:HG12 | 1:A:100:VAL:H | 1 | 1.07 |
| (1,1916) | 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HG3 | 9 | 1.07 |
| (1,1916) | 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HG3 | 19 | 1.07 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB2 | 1:A:44:PRO:HB2 | 16 | 1.07 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB1 | 1:A:44:PRO:HB2 | 16 | 1.07 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB3 | 1:A:44:PRO:HB2 | 16 | 1.07 |
| (1,1846) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:52:GLU:HA | 19 | 1.07 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1839) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:59:GLU:H | 7 | 1.07 |
| (1,1839) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:59:GLU:H | 15 | 1.07 |
| (1,1752) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:47:ASN:HD22 | 2 | 1.07 |
| (1,1752) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:47:ASN:HD22 | 15 | 1.07 |
| (1,1752) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:47:ASN:HD22 | 16 | 1.07 |
| (1,1454) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:32:LYS:HG3 | 15 | 1.07 |
| (1,1408) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HA | 5 | 1.07 |
| (1,1357) | 1:A:22:LEU:HB2 | 1:A:68:THR:H | 13 | 1.07 |
| (1,1076) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:33:LYS:HB3 | 4 | 1.07 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:85:TYR:HB2 | 4 | 1.07 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:85:TYR:HB2 | 4 | 1.07 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:85:TYR:HB2 | 4 | 1.07 |
| (1,949) | 1:A:90:PHE:HB2 | 1:A:94:ASN:HD22 | 19 | 1.06 |
| (1,927) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:57:PHE:H | 2 | 1.06 |
| (1,2450) | 1:A:100:VAL:HG13 | 1:A:100:VAL:H | 15 | 1.06 |
| (1,2450) | 1:A:100:VAL:HG11 | 1:A:100:VAL:H | 15 | 1.06 |
| (1,2450) | 1:A:100:VAL:HG12 | 1:A:100:VAL:H | 15 | 1.06 |
| (1,1752) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:47:ASN:HD22 | 4 | 1.06 |
| (1,1407) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:25:ASN:HA | 20 | 1.06 |
| (1,1357) | 1:A:22:LEU:HB2 | 1:A:68:THR:H | 10 | 1.06 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG21 | 1:A:59:GLU:HG2 | 2 | 1.06 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG22 | 1:A:59:GLU:HG2 | 2 | 1.06 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG23 | 1:A:59:GLU:HG2 | 2 | 1.06 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG21 | 2 | 1.06 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG22 | 2 | 1.06 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG23 | 2 | 1.06 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG21 | 10 | 1.06 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG22 | 10 | 1.06 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG23 | 10 | 1.06 |
| (1,1057) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:6:GLN:HG3 | 7 | 1.06 |
| (1,1057) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:6:GLN:HG3 | 7 | 1.06 |
| (1,1057) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:6:GLN:HG3 | 7 | 1.06 |
| (1,919) | 1:A:52:GLU:HG2 | 1:A:52:GLU:HA | 10 | 1.05 |
| (1,2344) | 1:A:82:LEU:HD12 | 1:A:85:TYR:HB3 | 7 | 1.05 |
| (1,2344) | 1:A:82:LEU:HD11 | 1:A:85:TYR:HB3 | 7 | 1.05 |
| (1,2344) | 1:A:82:LEU:HD13 | 1:A:85:TYR:HB3 | 7 | 1.05 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD12 | 1:A:85:TYR:HB2 | 19 | 1.05 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD11 | 1:A:85:TYR:HB2 | 19 | 1.05 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD13 | 1:A:85:TYR:HB2 | 19 | 1.05 |
| (1,2213) | 1:A:75:ILE:HD11 | 1:A:92:GLU:HG2 | 15 | 1.05 |
| (1,2213) | 1:A:75:ILE:HD12 | 1:A:92:GLU:HG2 | 15 | 1.05 |
| (1,2213) | 1:A:75:ILE:HD13 | 1:A:92:GLU:HG2 | 15 | 1.05 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB2 | 1:A:44:PRO:HB2 | 11 | 1.05 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB1 | 1:A:44:PRO:HB2 | 11 | 1.05 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB3 | 1:A:44:PRO:HB2 | 11 | 1.05 |
| (1,1752) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:47:ASN:HD22 | 10 | 1.05 |
| (1,1454) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:32:LYS:HG3 | 6 | 1.05 |
| (1,949) | 1:A:90:PHE:HB2 | 1:A:94:ASN:HD22 | 12 | 1.04 |
| (1,1916) | 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HG3 | 16 | 1.04 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB2 | 1:A:44:PRO:HB2 | 12 | 1.04 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB1 | 1:A:44:PRO:HB2 | 12 | 1.04 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB3 | 1:A:44:PRO:HB2 | 12 | 1.04 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB2 | 1:A:44:PRO:HB2 | 14 | 1.04 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB1 | 1:A:44:PRO:HB2 | 14 | 1.04 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB3 | 1:A:44:PRO:HB2 | 14 | 1.04 |
| (1,1752) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:47:ASN:HD22 | 6 | 1.04 |
| (1,1752) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:47:ASN:HD22 | 8 | 1.04 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG21 | 19 | 1.04 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG22 | 19 | 1.04 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG23 | 19 | 1.04 |
| (1,1076) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:33:LYS:HB3 | 17 | 1.04 |
| (1,927) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:57:PHE:H | 13 | 1.03 |
| (1,2733) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 15 | 1.03 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD12 | 1:A:85:TYR:HB2 | 1 | 1.03 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD11 | 1:A:85:TYR:HB2 | 1 | 1.03 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD13 | 1:A:85:TYR:HB2 | 1 | 1.03 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD12 | 1:A:85:TYR:HB2 | 2 | 1.03 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD11 | 1:A:85:TYR:HB2 | 2 | 1.03 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD13 | 1:A:85:TYR:HB2 | 2 | 1.03 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB2 | 1:A:44:PRO:HB2 | 2 | 1.03 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB1 | 1:A:44:PRO:HB2 | 2 | 1.03 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB3 | 1:A:44:PRO:HB2 | 2 | 1.03 |
| (1,1752) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:47:ASN:HD22 | 1 | 1.03 |
| (1,1076) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:33:LYS:HB3 | 15 | 1.03 |
| (1,982) | 1:A:5:ARG:HD3 | 1:A:5:ARG:HA | 16 | 1.02 |
| (1,2460) | 1:A:33:LYS:HD2 | 1:A:33:LYS:H | 12 | 1.02 |
| (1,1935) | 1:A:56:LYS:HB2 | 1:A:56:LYS:HE2 | 4 | 1.02 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB2 | 1:A:44:PRO:HB2 | 1 | 1.02 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB1 | 1:A:44:PRO:HB2 | 1 | 1.02 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB3 | 1:A:44:PRO:HB2 | 1 | 1.02 |
| (1,1846) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:52:GLU:HA | 18 | 1.02 |
| (1,1752) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:47:ASN:HD22 | 3 | 1.02 |
| (1,1752) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:47:ASN:HD22 | 7 | 1.02 |
| (1,1407) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:25:ASN:HA | 5 | 1.02 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1357) | 1:A:22:LEU:HB2 | 1:A:68:THR:H | 11 | 1.02 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG21 | 3 | 1.02 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG22 | 3 | 1.02 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG23 | 3 | 1.02 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG21 | 6 | 1.02 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG22 | 6 | 1.02 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG23 | 6 | 1.02 |
| (1,1075) | 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HB2 | 12 | 1.02 |
| (1,41) | 1:A:29:ASP:HB3 | 1:A:27:THR:H | 12 | 1.01 |
| (1,41) | 1:A:28:SER:H | 1:A:29:ASP:HB3 | 12 | 1.01 |
| (1,2189) | 1:A:73:ARG:HD3 | 1:A:62:ASN:HD22 | 1 | 1.01 |
| (1,1916) | 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HG3 | 8 | 1.01 |
| (1,1846) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:52:GLU:HA | 5 | 1.01 |
| (1,1846) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:52:GLU:HA | 11 | 1.01 |
| (1,1846) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:52:GLU:HA | 14 | 1.01 |
| (1,1752) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:47:ASN:HD22 | 5 | 1.01 |
| (1,1752) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:47:ASN:HD22 | 18 | 1.01 |
| (1,1752) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:47:ASN:HD22 | 19 | 1.01 |
| (1,1357) | 1:A:22:LEU:HB2 | 1:A:68:THR:H | 15 | 1.01 |
| (1,1076) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:33:LYS:HB3 | 5 | 1.01 |
| (1,644) | 1:A:84:LEU:H | 1:A:92:GLU:HG3 | 20 | 1.0 |
| (1,644) | 1:A:84:LEU:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 20 | 1.0 |
| (1,41) | 1:A:29:ASP:HB3 | 1:A:27:THR:H | 2 | 1.0 |
| (1,41) | 1:A:28:SER:H | 1:A:29:ASP:HB3 | 2 | 1.0 |
| (1,2460) | 1:A:33:LYS:HD2 | 1:A:33:LYS:H | 14 | 1.0 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB2 | 1:A:44:PRO:HB2 | 10 | 1.0 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB1 | 1:A:44:PRO:HB2 | 10 | 1.0 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB3 | 1:A:44:PRO:HB2 | 10 | 1.0 |
| (1,1846) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:52:GLU:HA | 1 | 1.0 |
| (1,1846) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:52:GLU:HA | 2 | 1.0 |
| (1,1846) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:52:GLU:HA | 13 | 1.0 |
| (1,1752) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:47:ASN:HD22 | 13 | 1.0 |
| (1,1408) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HA | 10 | 1.0 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG21 | 1:A:59:GLU:HG2 | 15 | 1.0 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG22 | 1:A:59:GLU:HG2 | 15 | 1.0 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG23 | 1:A:59:GLU:HG2 | 15 | 1.0 |
| (1,1134) | 1:A:12:SER:HB2 | 1:A:14:GLU:HG3 | 3 | 1.0 |
| (1,1134) | 1:A:12:SER:HB2 | 1:A:14:GLU:HG3 | 6 | 1.0 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:85:TYR:HB2 | 6 | 1.0 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:85:TYR:HB2 | 6 | 1.0 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:85:TYR:HB2 | 6 | 1.0 |
| (1,644) | 1:A:84:LEU:H | 1:A:92:GLU:HG3 | 15 | 0.99 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,644) | 1:A:84:LEU:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 15 | 0.99 |
| (1,2460) | 1:A:33:LYS:HD2 | 1:A:33:LYS:H | 20 | 0.99 |
| (1,2450) | 1:A:100:VAL:HG13 | 1:A:100:VAL:H | 19 | 0.99 |
| (1,2450) | 1:A:100:VAL:HG11 | 1:A:100:VAL:H | 19 | 0.99 |
| (1,2450) | 1:A:100:VAL:HG12 | 1:A:100:VAL:H | 19 | 0.99 |
| (1,2296) | 1:A:82:LEU:HD12 | 1:A:9:LEU:HD11 | 7 | 0.99 |
| (1,2296) | 1:A:82:LEU:HD12 | 1:A:9:LEU:HD13 | 7 | 0.99 |
| (1,2296) | 1:A:82:LEU:HD12 | 1:A:9:LEU:HD12 | 7 | 0.99 |
| (1,2296) | 1:A:82:LEU:HD11 | 1:A:9:LEU:HD11 | 7 | 0.99 |
| (1,2296) | 1:A:82:LEU:HD11 | 1:A:9:LEU:HD13 | 7 | 0.99 |
| (1,2296) | 1:A:82:LEU:HD11 | 1:A:9:LEU:HD12 | 7 | 0.99 |
| (1,2296) | 1:A:82:LEU:HD13 | 1:A:9:LEU:HD11 | 7 | 0.99 |
| (1,2296) | 1:A:82:LEU:HD13 | 1:A:9:LEU:HD13 | 7 | 0.99 |
| (1,2296) | 1:A:82:LEU:HD13 | 1:A:9:LEU:HD12 | 7 | 0.99 |
| (1,1846) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:52:GLU:HA | 8 | 0.99 |
| (1,1407) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:25:ASN:HA | 16 | 0.99 |
| (1,1076) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:33:LYS:HB3 | 13 | 0.99 |
| (1,1075) | 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HB2 | 5 | 0.99 |
| (1,965) | 1:A:94:ASN:HD21 | 1:A:90:PHE:HB2 | 1 | 0.98 |
| (1,41) | 1:A:29:ASP:HB3 | 1:A:27:THR:H | 6 | 0.98 |
| (1,41) | 1:A:28:SER:H | 1:A:29:ASP:HB3 | 6 | 0.98 |
| (1,2585) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:62:ASN:H | 20 | 0.98 |
| (1,2460) | 1:A:33:LYS:HD2 | 1:A:33:LYS:H | 16 | 0.98 |
| (1,1846) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:52:GLU:HA | 3 | 0.98 |
| (1,1846) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:52:GLU:HA | 9 | 0.98 |
| (1,1846) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:52:GLU:HA | 17 | 0.98 |
| (1,1846) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:52:GLU:HA | 20 | 0.98 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG21 | 1:A:59:GLU:HG2 | 5 | 0.98 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG22 | 1:A:59:GLU:HG2 | 5 | 0.98 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG23 | 1:A:59:GLU:HG2 | 5 | 0.98 |
| (1,1076) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:33:LYS:HB3 | 6 | 0.98 |
| (1,1075) | 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HB2 | 11 | 0.98 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:85:TYR:HB2 | 9 | 0.98 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:85:TYR:HB2 | 9 | 0.98 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:85:TYR:HB2 | 9 | 0.98 |
| (1,2385) | 1:A:88:GLU:H | 1:A:88:GLU:HG3 | 4 | 0.97 |
| (1,1846) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:52:GLU:HA | 7 | 0.97 |
| (1,1698) | 1:A:44:PRO:HA | 1:A:47:ASN:HB3 | 5 | 0.97 |
| (1,1076) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:33:LYS:HB3 | 8 | 0.97 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:85:TYR:HB2 | 18 | 0.97 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:85:TYR:HB2 | 18 | 0.97 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:85:TYR:HB2 | 18 | 0.97 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,927) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:57:PHE:H | 7 | 0.96 |
| (1,2460) | 1:A:33:LYS:HD2 | 1:A:33:LYS:H | 13 | 0.96 |
| (1,221) | 1:A:34:SER:HB3 | 1:A:37:LYS:HE2 | 2 | 0.96 |
| (1,221) | 1:A:34:SER:HB3 | 1:A:37:LYS:HE3 | 2 | 0.96 |
| (1,221) | 1:A:34:SER:HB3 | 1:A:37:LYS:HE2 | 11 | 0.96 |
| (1,221) | 1:A:34:SER:HB3 | 1:A:37:LYS:HE3 | 11 | 0.96 |
| (1,1846) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:52:GLU:HA | 4 | 0.96 |
| (1,1846) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:52:GLU:HA | 6 | 0.96 |
| (1,153) | 1:A:23:ASP:HB2 | 1:A:24:LYS:HB2 | 19 | 0.96 |
| (1,153) | 1:A:23:ASP:HB2 | 1:A:24:LYS:HB3 | 19 | 0.96 |
| (1,1357) | 1:A:22:LEU:HB2 | 1:A:68:THR:H | 5 | 0.96 |
| (1,1134) | 1:A:12:SER:HB2 | 1:A:14:GLU:HG3 | 8 | 0.96 |
| (1,1134) | 1:A:12:SER:HB2 | 1:A:14:GLU:HG3 | 14 | 0.96 |
| (1,1075) | 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HB2 | 4 | 0.96 |
| (1,965) | 1:A:94:ASN:HD21 | 1:A:90:PHE:HB2 | 12 | 0.95 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG21 | 3 | 0.95 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG23 | 3 | 0.95 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG22 | 3 | 0.95 |
| (1,1846) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:52:GLU:HA | 12 | 0.95 |
| (1,2837) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:41:LYS:HB2 | 3 | 0.94 |
| (1,2585) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:62:ASN:H | 17 | 0.94 |
| (1,2450) | 1:A:100:VAL:HG13 | 1:A:100:VAL:H | 7 | 0.94 |
| (1,2450) | 1:A:100:VAL:HG11 | 1:A:100:VAL:H | 7 | 0.94 |
| (1,2450) | 1:A:100:VAL:HG12 | 1:A:100:VAL:H | 7 | 0.94 |
| (1,1985) | 1:A:59:GLU:HG3 | 1:A:58:LYS:H | 12 | 0.94 |
| (1,1935) | 1:A:56:LYS:HB2 | 1:A:56:LYS:HE2 | 7 | 0.94 |
| (1,1846) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:52:GLU:HA | 16 | 0.94 |
| (1,1384) | 1:A:23:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HB2 | 15 | 0.94 |
| (1,1384) | 1:A:23:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HB2 | 17 | 0.94 |
| (1,1384) | 1:A:23:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HB2 | 19 | 0.94 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG21 | 1:A:59:GLU:HG2 | 17 | 0.94 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG22 | 1:A:59:GLU:HG2 | 17 | 0.94 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG23 | 1:A:59:GLU:HG2 | 17 | 0.94 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:85:TYR:HB2 | 14 | 0.94 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:85:TYR:HB2 | 14 | 0.94 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:85:TYR:HB2 | 14 | 0.94 |
| (1,997) | 1:A:6:GLN:HG2 | 1:A:6:GLN:H | 16 | 0.93 |
| (1,949) | 1:A:90:PHE:HB2 | 1:A:94:ASN:HD22 | 8 | 0.93 |
| (1,2585) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:62:ASN:H | 16 | 0.93 |
| (1,2585) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:62:ASN:H | 18 | 0.93 |
| (1,2460) | 1:A:33:LYS:HD2 | 1:A:33:LYS:H | 1 | 0.93 |
| (1,2460) | 1:A:33:LYS:HD2 | 1:A:33:LYS:H | 2 | 0.93 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2460) | 1:A:33:LYS:HD2 | 1:A:33:LYS:H | 6 | 0.93 |
| (1,2460) | 1:A:33:LYS:HD2 | 1:A:33:LYS:H | 7 | 0.93 |
| (1,2213) | 1:A:75:ILE:HD11 | 1:A:92:GLU:HG2 | 20 | 0.93 |
| (1,2213) | 1:A:75:ILE:HD12 | 1:A:92:GLU:HG2 | 20 | 0.93 |
| (1,2213) | 1:A:75:ILE:HD13 | 1:A:92:GLU:HG2 | 20 | 0.93 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG21 | 4 | 0.93 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG23 | 4 | 0.93 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG22 | 4 | 0.93 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG21 | 5 | 0.93 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG23 | 5 | 0.93 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG22 | 5 | 0.93 |
| (1,1985) | 1:A:59:GLU:HG3 | 1:A:58:LYS:H | 1 | 0.93 |
| (1,1985) | 1:A:59:GLU:HG3 | 1:A:58:LYS:H | 14 | 0.93 |
| (1,1846) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:52:GLU:HA | 15 | 0.93 |
| (1,1698) | 1:A:44:PRO:HA | 1:A:47:ASN:HB3 | 6 | 0.93 |
| (1,1675) | 1:A:62:ASN:HD21 | 1:A:62:ASN:HB2 | 20 | 0.93 |
| (1,1407) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:25:ASN:HA | 10 | 0.93 |
| (1,1075) | 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HB2 | 3 | 0.93 |
| (1,1075) | 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HB2 | 14 | 0.93 |
| (1,949) | 1:A:90:PHE:HB2 | 1:A:94:ASN:HD22 | 9 | 0.92 |
| (1,644) | 1:A:84:LEU:H | 1:A:92:GLU:HG3 | 14 | 0.92 |
| (1,644) | 1:A:84:LEU:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 14 | 0.92 |
| (1,2876) | 1:A:39:ALA:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 11 | 0.92 |
| (1,2374) | 1:A:87:ALA:HA | 1:A:92:GLU:HB2 | 9 | 0.92 |
| (1,1985) | 1:A:59:GLU:HG3 | 1:A:58:LYS:H | 10 | 0.92 |
| (1,1733) | 1:A:99:PHE:HB2 | 1:A:100:VAL:HG13 | 19 | 0.92 |
| (1,1733) | 1:A:99:PHE:HB2 | 1:A:100:VAL:HG11 | 19 | 0.92 |
| (1,1733) | 1:A:99:PHE:HB2 | 1:A:100:VAL:HG12 | 19 | 0.92 |
| (1,1675) | 1:A:62:ASN:HD21 | 1:A:62:ASN:HB2 | 1 | 0.92 |
| (1,1675) | 1:A:62:ASN:HD21 | 1:A:62:ASN:HB2 | 2 | 0.92 |
| (1,1675) | 1:A:62:ASN:HD21 | 1:A:62:ASN:HB2 | 3 | 0.92 |
| (1,1675) | 1:A:62:ASN:HD21 | 1:A:62:ASN:HB2 | 5 | 0.92 |
| (1,1675) | 1:A:62:ASN:HD21 | 1:A:62:ASN:HB2 | 9 | 0.92 |
| (1,1675) | 1:A:62:ASN:HD21 | 1:A:62:ASN:HB2 | 10 | 0.92 |
| (1,1675) | 1:A:62:ASN:HD21 | 1:A:62:ASN:HB2 | 12 | 0.92 |
| (1,1675) | 1:A:62:ASN:HD21 | 1:A:62:ASN:HB2 | 14 | 0.92 |
| (1,1675) | 1:A:62:ASN:HD21 | 1:A:62:ASN:HB2 | 15 | 0.92 |
| (1,1675) | 1:A:62:ASN:HD21 | 1:A:62:ASN:HB2 | 16 | 0.92 |
| (1,1675) | 1:A:62:ASN:HD21 | 1:A:62:ASN:HB2 | 17 | 0.92 |
| (1,1384) | 1:A:23:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HB2 | 1 | 0.92 |
| (1,1384) | 1:A:23:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HB2 | 5 | 0.92 |
| (1,1076) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:33:LYS:HB3 | 11 | 0.92 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1075) | 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HB2 | 1 | 0.92 |
| (1,1075) | 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HB2 | 6 | 0.92 |
| (1,1055) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:6:GLN:HB2 | 16 | 0.92 |
| (1,1055) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:6:GLN:HB2 | 16 | 0.92 |
| (1,1055) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:6:GLN:HB2 | 16 | 0.92 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:85:TYR:HB2 | 17 | 0.92 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:85:TYR:HB2 | 17 | 0.92 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:85:TYR:HB2 | 17 | 0.92 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:85:TYR:HB2 | 20 | 0.92 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:85:TYR:HB2 | 20 | 0.92 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:85:TYR:HB2 | 20 | 0.92 |
| (1,949) | 1:A:90:PHE:HB2 | 1:A:94:ASN:HD22 | 7 | 0.91 |
| (1,2876) | 1:A:39:ALA:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 10 | 0.91 |
| (1,2876) | 1:A:39:ALA:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 17 | 0.91 |
| (1,2756) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:25:ASN:HD22 | 9 | 0.91 |
| (1,2460) | 1:A:33:LYS:HD2 | 1:A:33:LYS:H | 9 | 0.91 |
| (1,2213) | 1:A:75:ILE:HD11 | 1:A:92:GLU:HG2 | 14 | 0.91 |
| (1,2213) | 1:A:75:ILE:HD12 | 1:A:92:GLU:HG2 | 14 | 0.91 |
| (1,2213) | 1:A:75:ILE:HD13 | 1:A:92:GLU:HG2 | 14 | 0.91 |
| (1,221) | 1:A:34:SER:HB3 | 1:A:37:LYS:HE2 | 4 | 0.91 |
| (1,221) | 1:A:34:SER:HB3 | 1:A:37:LYS:HE3 | 4 | 0.91 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB1 | 1:A:55:ASP:HB3 | 9 | 0.91 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB2 | 1:A:55:ASP:HB3 | 9 | 0.91 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB3 | 1:A:55:ASP:HB3 | 9 | 0.91 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB1 | 1:A:55:ASP:HB3 | 13 | 0.91 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB2 | 1:A:55:ASP:HB3 | 13 | 0.91 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB3 | 1:A:55:ASP:HB3 | 13 | 0.91 |
| (1,1698) | 1:A:44:PRO:HA | 1:A:47:ASN:HB3 | 19 | 0.91 |
| (1,1675) | 1:A:62:ASN:HD21 | 1:A:62:ASN:HB2 | 7 | 0.91 |
| (1,1675) | 1:A:62:ASN:HD21 | 1:A:62:ASN:HB2 | 8 | 0.91 |
| (1,1675) | 1:A:62:ASN:HD21 | 1:A:62:ASN:HB2 | 11 | 0.91 |
| (1,1675) | 1:A:62:ASN:HD21 | 1:A:62:ASN:HB2 | 18 | 0.91 |
| (1,1675) | 1:A:62:ASN:HD21 | 1:A:62:ASN:HB2 | 19 | 0.91 |
| (1,1384) | 1:A:23:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HB2 | 7 | 0.91 |
| (1,1384) | 1:A:23:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HB2 | 14 | 0.91 |
| (1,997) | 1:A:6:GLN:HG2 | 1:A:6:GLN:H | 15 | 0.9 |
| (1,949) | 1:A:90:PHE:HB2 | 1:A:94:ASN:HD22 | 13 | 0.9 |
| (1,949) | 1:A:90:PHE:HB2 | 1:A:94:ASN:HD22 | 16 | 0.9 |
| (1,2876) | 1:A:39:ALA:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 4 | 0.9 |
| (1,2876) | 1:A:39:ALA:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 13 | 0.9 |
| (1,2876) | 1:A:39:ALA:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 15 | 0.9 |
| (1,2460) | 1:A:33:LYS:HD2 | 1:A:33:LYS:H | 19 | 0.9 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG21 | 2 | 0.9 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG23 | 2 | 0.9 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG22 | 2 | 0.9 |
| (1,1985) | 1:A:59:GLU:HG3 | 1:A:58:LYS:H | 16 | 0.9 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB1 | 1:A:55:ASP:HB3 | 15 | 0.9 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB2 | 1:A:55:ASP:HB3 | 15 | 0.9 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB3 | 1:A:55:ASP:HB3 | 15 | 0.9 |
| (1,1698) | 1:A:44:PRO:HA | 1:A:47:ASN:HB3 | 2 | 0.9 |
| (1,1698) | 1:A:44:PRO:HA | 1:A:47:ASN:HB3 | 7 | 0.9 |
| (1,1698) | 1:A:44:PRO:HA | 1:A:47:ASN:HB3 | 18 | 0.9 |
| (1,153) | 1:A:23:ASP:HB2 | 1:A:24:LYS:HB2 | 20 | 0.9 |
| (1,153) | 1:A:23:ASP:HB2 | 1:A:24:LYS:HB3 | 20 | 0.9 |
| (1,1454) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:32:LYS:HG3 | 12 | 0.9 |
| (1,1384) | 1:A:23:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HB2 | 3 | 0.9 |
| (1,1384) | 1:A:23:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HB2 | 8 | 0.9 |
| (1,1384) | 1:A:23:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HB2 | 10 | 0.9 |
| (1,1384) | 1:A:23:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HB2 | 12 | 0.9 |
| (1,1113) | 1:A:12:SER:HB3 | 1:A:14:GLU:HG3 | 4 | 0.9 |
| (1,625) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 19 | 0.89 |
| (1,625) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 19 | 0.89 |
| (1,3024) | 1:A:5:ARG:H | 1:A:5:ARG:HB3 | 12 | 0.89 |
| (1,2837) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:41:LYS:HB2 | 5 | 0.89 |
| (1,2837) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:41:LYS:HB2 | 6 | 0.89 |
| (1,2460) | 1:A:33:LYS:HD2 | 1:A:33:LYS:H | 5 | 0.89 |
| (1,2460) | 1:A:33:LYS:HD2 | 1:A:33:LYS:H | 8 | 0.89 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG21 | 20 | 0.89 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG23 | 20 | 0.89 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG22 | 20 | 0.89 |
| (1,1985) | 1:A:59:GLU:HG3 | 1:A:58:LYS:H | 11 | 0.89 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB2 | 1:A:44:PRO:HB2 | 8 | 0.89 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB1 | 1:A:44:PRO:HB2 | 8 | 0.89 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB3 | 1:A:44:PRO:HB2 | 8 | 0.89 |
| (1,1075) | 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HB2 | 19 | 0.89 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:85:TYR:HB2 | 10 | 0.89 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:85:TYR:HB2 | 10 | 0.89 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:85:TYR:HB2 | 10 | 0.89 |
| (1,3024) | 1:A:5:ARG:H | 1:A:5:ARG:HB3 | 2 | 0.88 |
| (1,2876) | 1:A:39:ALA:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 9 | 0.88 |
| (1,2876) | 1:A:39:ALA:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 12 | 0.88 |
| (1,2876) | 1:A:39:ALA:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 14 | 0.88 |
| (1,2585) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:62:ASN:H | 12 | 0.88 |
| (1,2213) | 1:A:75:ILE:HD11 | 1:A:92:GLU:HG2 | 19 | 0.88 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2213) | 1:A:75:ILE:HD12 | 1:A:92:GLU:HG2 | 19 | 0.88 |
| (1,2213) | 1:A:75:ILE:HD13 | 1:A:92:GLU:HG2 | 19 | 0.88 |
| (1,1916) | 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HG3 | 13 | 0.88 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB2 | 1:A:47:ASN:HB3 | 17 | 0.88 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB1 | 1:A:47:ASN:HB3 | 17 | 0.88 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB3 | 1:A:47:ASN:HB3 | 17 | 0.88 |
| (1,1675) | 1:A:62:ASN:HD21 | 1:A:62:ASN:HB2 | 4 | 0.88 |
| (1,1675) | 1:A:62:ASN:HD21 | 1:A:62:ASN:HB2 | 6 | 0.88 |
| (1,1675) | 1:A:62:ASN:HD21 | 1:A:62:ASN:HB2 | 13 | 0.88 |
| (1,1384) | 1:A:23:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HB2 | 13 | 0.88 |
| (1,1384) | 1:A:23:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HB2 | 16 | 0.88 |
| (1,1075) | 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HB2 | 17 | 0.88 |
| (1,965) | 1:A:94:ASN:HD21 | 1:A:90:PHE:HB2 | 7 | 0.87 |
| (1,644) | 1:A:84:LEU:H | 1:A:92:GLU:HG3 | 19 | 0.87 |
| (1,644) | 1:A:84:LEU:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 19 | 0.87 |
| (1,3046) | 1:A:23:ASP:H | 1:A:22:LEU:HB2 | 2 | 0.87 |
| (1,3024) | 1:A:5:ARG:H | 1:A:5:ARG:HB3 | 4 | 0.87 |
| (1,3024) | 1:A:5:ARG:H | 1:A:5:ARG:HB3 | 20 | 0.87 |
| (1,2460) | 1:A:33:LYS:HD2 | 1:A:33:LYS:H | 3 | 0.87 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG21 | 13 | 0.87 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG23 | 13 | 0.87 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG22 | 13 | 0.87 |
| (1,1985) | 1:A:59:GLU:HG3 | 1:A:58:LYS:H | 3 | 0.87 |
| (1,1985) | 1:A:59:GLU:HG3 | 1:A:58:LYS:H | 7 | 0.87 |
| (1,1985) | 1:A:59:GLU:HG3 | 1:A:58:LYS:H | 8 | 0.87 |
| (1,1935) | 1:A:56:LYS:HB2 | 1:A:56:LYS:HE2 | 11 | 0.87 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB1 | 1:A:55:ASP:HB3 | 8 | 0.87 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB2 | 1:A:55:ASP:HB3 | 8 | 0.87 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB3 | 1:A:55:ASP:HB3 | 8 | 0.87 |
| (1,1698) | 1:A:44:PRO:HA | 1:A:47:ASN:HB3 | 1 | 0.87 |
| (1,1698) | 1:A:44:PRO:HA | 1:A:47:ASN:HB3 | 10 | 0.87 |
| (1,1662) | 1:A:41:LYS:HE3 | 1:A:42:TYR:HD2 | 18 | 0.87 |
| (1,1662) | 1:A:41:LYS:HE3 | 1:A:42:TYR:HD1 | 18 | 0.87 |
| (1,1075) | 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HB2 | 9 | 0.87 |
| (1,625) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 1 | 0.86 |
| (1,625) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 1 | 0.86 |
| (1,625) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 5 | 0.86 |
| (1,625) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 5 | 0.86 |
| (1,625) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 9 | 0.86 |
| (1,625) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 9 | 0.86 |
| (1,625) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 11 | 0.86 |
| (1,625) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 11 | 0.86 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,625) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 17 | 0.86 |
| (1,625) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 17 | 0.86 |
| (1,3046) | 1:A:23:ASP:H | 1:A:22:LEU:HB2 | 18 | 0.86 |
| (1,3024) | 1:A:5:ARG:H | 1:A:5:ARG:HB3 | 5 | 0.86 |
| (1,3024) | 1:A:5:ARG:H | 1:A:5:ARG:HB3 | 16 | 0.86 |
| (1,2858) | 1:A:53:ALA:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 16 | 0.86 |
| (1,2837) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:41:LYS:HB2 | 2 | 0.86 |
| (1,2756) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:25:ASN:HD22 | 13 | 0.86 |
| (1,2666) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:64:HIS:HB3 | 4 | 0.86 |
| (1,2550) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:6:GLN:HB2 | 13 | 0.86 |
| (1,2460) | 1:A:33:LYS:HD2 | 1:A:33:LYS:H | 15 | 0.86 |
| (1,1698) | 1:A:44:PRO:HA | 1:A:47:ASN:HB3 | 14 | 0.86 |
| (1,153) | 1:A:23:ASP:HB2 | 1:A:24:LYS:HB2 | 2 | 0.86 |
| (1,153) | 1:A:23:ASP:HB2 | 1:A:24:LYS:HB3 | 2 | 0.86 |
| (1,1384) | 1:A:23:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HB2 | 11 | 0.86 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG21 | 1:A:59:GLU:HG2 | 13 | 0.86 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG22 | 1:A:59:GLU:HG2 | 13 | 0.86 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG23 | 1:A:59:GLU:HG2 | 13 | 0.86 |
| (1,625) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 2 | 0.85 |
| (1,625) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 2 | 0.85 |
| (1,625) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 3 | 0.85 |
| (1,625) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 3 | 0.85 |
| (1,625) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 6 | 0.85 |
| (1,625) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 6 | 0.85 |
| (1,625) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 7 | 0.85 |
| (1,625) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 7 | 0.85 |
| (1,625) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 12 | 0.85 |
| (1,625) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 12 | 0.85 |
| (1,625) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 13 | 0.85 |
| (1,625) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 13 | 0.85 |
| (1,625) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 14 | 0.85 |
| (1,625) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 14 | 0.85 |
| (1,625) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 18 | 0.85 |
| (1,625) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 18 | 0.85 |
| (1,625) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 20 | 0.85 |
| (1,625) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 20 | 0.85 |
| (1,3046) | 1:A:23:ASP:H | 1:A:22:LEU:HB2 | 9 | 0.85 |
| (1,3046) | 1:A:23:ASP:H | 1:A:22:LEU:HB2 | 19 | 0.85 |
| (1,3024) | 1:A:5:ARG:H | 1:A:5:ARG:HB3 | 9 | 0.85 |
| (1,2551) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:7:ARG:HG2 | 12 | 0.85 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG21 | 1 | 0.85 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG23 | 1 | 0.85 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG22 | 1 | 0.85 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG21 | 6 | 0.85 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG23 | 6 | 0.85 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG22 | 6 | 0.85 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG21 | 17 | 0.85 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG23 | 17 | 0.85 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG22 | 17 | 0.85 |
| (1,1985) | 1:A:59:GLU:HG3 | 1:A:58:LYS:H | 5 | 0.85 |
| (1,1916) | 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HG3 | 7 | 0.85 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB1 | 1:A:55:ASP:HB3 | 5 | 0.85 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB2 | 1:A:55:ASP:HB3 | 5 | 0.85 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB3 | 1:A:55:ASP:HB3 | 5 | 0.85 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB1 | 1:A:55:ASP:HB3 | 14 | 0.85 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB2 | 1:A:55:ASP:HB3 | 14 | 0.85 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB3 | 1:A:55:ASP:HB3 | 14 | 0.85 |
| (1,1698) | 1:A:44:PRO:HA | 1:A:47:ASN:HB3 | 12 | 0.85 |
| (1,1698) | 1:A:44:PRO:HA | 1:A:47:ASN:HB3 | 13 | 0.85 |
| (1,1384) | 1:A:23:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HB2 | 2 | 0.85 |
| (1,1384) | 1:A:23:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HB2 | 6 | 0.85 |
| (1,1384) | 1:A:23:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HB2 | 20 | 0.85 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG21 | 9 | 0.85 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG22 | 9 | 0.85 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG23 | 9 | 0.85 |
| (1,1076) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:33:LYS:HB3 | 18 | 0.85 |
| (1,1075) | 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HB2 | 20 | 0.85 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:85:TYR:HB2 | 13 | 0.85 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:85:TYR:HB2 | 13 | 0.85 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:85:TYR:HB2 | 13 | 0.85 |
| (1,975) | 1:A:29:ASP:H | 1:A:29:ASP:HB3 | 2 | 0.84 |
| (1,975) | 1:A:29:ASP:H | 1:A:29:ASP:HB3 | 12 | 0.84 |
| (1,965) | 1:A:94:ASN:HD21 | 1:A:90:PHE:HB2 | 16 | 0.84 |
| (1,949) | 1:A:90:PHE:HB2 | 1:A:94:ASN:HD22 | 18 | 0.84 |
| (1,625) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 15 | 0.84 |
| (1,625) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 15 | 0.84 |
| (1,3046) | 1:A:23:ASP:H | 1:A:22:LEU:HB2 | 7 | 0.84 |
| (1,3046) | 1:A:23:ASP:H | 1:A:22:LEU:HB2 | 10 | 0.84 |
| (1,3046) | 1:A:23:ASP:H | 1:A:22:LEU:HB2 | 11 | 0.84 |
| (1,3046) | 1:A:23:ASP:H | 1:A:22:LEU:HB2 | 16 | 0.84 |
| (1,2858) | 1:A:53:ALA:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 20 | 0.84 |
| (1,2460) | 1:A:33:LYS:HD2 | 1:A:33:LYS:H | 4 | 0.84 |
| (1,2374) | 1:A:87:ALA:HA | 1:A:92:GLU:HB2 | 11 | 0.84 |
| (1,221) | 1:A:34:SER:HB3 | 1:A:37:LYS:HE2 | 17 | 0.84 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,221) | 1:A:34:SER:HB3 | 1:A:37:LYS:HE3 | 17 | 0.84 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG21 | 7 | 0.84 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG23 | 7 | 0.84 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG22 | 7 | 0.84 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG21 | 8 | 0.84 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG23 | 8 | 0.84 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG22 | 8 | 0.84 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG21 | 11 | 0.84 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG23 | 11 | 0.84 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG22 | 11 | 0.84 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG21 | 18 | 0.84 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG23 | 18 | 0.84 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG22 | 18 | 0.84 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB2 | 1:A:44:PRO:HB2 | 20 | 0.84 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB1 | 1:A:44:PRO:HB2 | 20 | 0.84 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB3 | 1:A:44:PRO:HB2 | 20 | 0.84 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB2 | 1:A:47:ASN:HB3 | 5 | 0.84 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB1 | 1:A:47:ASN:HB3 | 5 | 0.84 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB3 | 1:A:47:ASN:HB3 | 5 | 0.84 |
| (1,1698) | 1:A:44:PRO:HA | 1:A:47:ASN:HB3 | 3 | 0.84 |
| (1,1454) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:32:LYS:HG3 | 13 | 0.84 |
| (1,1384) | 1:A:23:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HB2 | 18 | 0.84 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG21 | 1:A:59:GLU:HG2 | 12 | 0.84 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG22 | 1:A:59:GLU:HG2 | 12 | 0.84 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG23 | 1:A:59:GLU:HG2 | 12 | 0.84 |
| (1,838) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:58:LYS:HB2 | 12 | 0.83 |
| (1,838) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 12 | 0.83 |
| (1,644) | 1:A:84:LEU:H | 1:A:92:GLU:HG3 | 5 | 0.83 |
| (1,644) | 1:A:84:LEU:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 5 | 0.83 |
| (1,3046) | 1:A:23:ASP:H | 1:A:22:LEU:HB2 | 1 | 0.83 |
| (1,3046) | 1:A:23:ASP:H | 1:A:22:LEU:HB2 | 5 | 0.83 |
| (1,3046) | 1:A:23:ASP:H | 1:A:22:LEU:HB2 | 8 | 0.83 |
| (1,3046) | 1:A:23:ASP:H | 1:A:22:LEU:HB2 | 12 | 0.83 |
| (1,3046) | 1:A:23:ASP:H | 1:A:22:LEU:HB2 | 20 | 0.83 |
| (1,3024) | 1:A:5:ARG:H | 1:A:5:ARG:HB3 | 8 | 0.83 |
| (1,2550) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:6:GLN:HB2 | 5 | 0.83 |
| (1,1985) | 1:A:59:GLU:HG3 | 1:A:58:LYS:H | 15 | 0.83 |
| (1,1985) | 1:A:59:GLU:HG3 | 1:A:58:LYS:H | 18 | 0.83 |
| (1,1985) | 1:A:59:GLU:HG3 | 1:A:58:LYS:H | 20 | 0.83 |
| (1,1384) | 1:A:23:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HB2 | 4 | 0.83 |
| (1,1076) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:33:LYS:HB3 | 12 | 0.83 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:85:TYR:HB2 | 19 | 0.83 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:85:TYR:HB2 | 19 | 0.83 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:85:TYR:HB2 | 19 | 0.83 |
| (1,1039) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:85:TYR:HB2 | 15 | 0.83 |
| (1,1039) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:85:TYR:HB2 | 15 | 0.83 |
| (1,1039) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:85:TYR:HB2 | 15 | 0.83 |
| (1,949) | 1:A:90:PHE:HB2 | 1:A:94:ASN:HD22 | 15 | 0.82 |
| (1,912) | 1:A:46:LYS:HB3 | 1:A:43:HIS:HB3 | 20 | 0.82 |
| (1,625) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 8 | 0.82 |
| (1,625) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 8 | 0.82 |
| (1,3046) | 1:A:23:ASP:H | 1:A:22:LEU:HB2 | 6 | 0.82 |
| (1,3024) | 1:A:5:ARG:H | 1:A:5:ARG:HB3 | 14 | 0.82 |
| (1,2858) | 1:A:53:ALA:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 13 | 0.82 |
| (1,264) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:60:ILE:HA | 1 | 0.82 |
| (1,264) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:63:ALA:HA | 1 | 0.82 |
| (1,2439) | 1:A:97:THR:H | 1:A:97:THR:HG22 | 8 | 0.82 |
| (1,2439) | 1:A:97:THR:H | 1:A:97:THR:HG21 | 8 | 0.82 |
| (1,2439) | 1:A:97:THR:H | 1:A:97:THR:HG23 | 8 | 0.82 |
| (1,2374) | 1:A:87:ALA:HA | 1:A:92:GLU:HB2 | 6 | 0.82 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG21 | 9 | 0.82 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG23 | 9 | 0.82 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG22 | 9 | 0.82 |
| (1,1985) | 1:A:59:GLU:HG3 | 1:A:58:LYS:H | 17 | 0.82 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB1 | 1:A:55:ASP:HB3 | 20 | 0.82 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB2 | 1:A:55:ASP:HB3 | 20 | 0.82 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB3 | 1:A:55:ASP:HB3 | 20 | 0.82 |
| (1,1384) | 1:A:23:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HB2 | 9 | 0.82 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:85:TYR:HB2 | 2 | 0.82 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:85:TYR:HB2 | 2 | 0.82 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:85:TYR:HB2 | 2 | 0.82 |
| (1,975) | 1:A:29:ASP:H | 1:A:29:ASP:HB3 | 6 | 0.81 |
| (1,949) | 1:A:90:PHE:HB2 | 1:A:94:ASN:HD22 | 6 | 0.81 |
| (1,625) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 4 | 0.81 |
| (1,625) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 4 | 0.81 |
| (1,3046) | 1:A:23:ASP:H | 1:A:22:LEU:HB2 | 4 | 0.81 |
| (1,3046) | 1:A:23:ASP:H | 1:A:22:LEU:HB2 | 13 | 0.81 |
| (1,2858) | 1:A:53:ALA:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 8 | 0.81 |
| (1,2550) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:6:GLN:HB2 | 1 | 0.81 |
| (1,2550) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:6:GLN:HB2 | 14 | 0.81 |
| (1,2550) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:6:GLN:HB2 | 16 | 0.81 |
| (1,2460) | 1:A:33:LYS:HD2 | 1:A:33:LYS:H | 17 | 0.81 |
| (1,221) | 1:A:34:SER:HB3 | 1:A:37:LYS:HE2 | 18 | 0.81 |
| (1,221) | 1:A:34:SER:HB3 | 1:A:37:LYS:HE3 | 18 | 0.81 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG21 | 16 | 0.81 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG23 | 16 | 0.81 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG22 | 16 | 0.81 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB2 | 1:A:47:ASN:HB3 | 7 | 0.81 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB1 | 1:A:47:ASN:HB3 | 7 | 0.81 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB3 | 1:A:47:ASN:HB3 | 7 | 0.81 |
| (1,1753) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:HB2 | 3 | 0.81 |
| (1,1698) | 1:A:44:PRO:HA | 1:A:47:ASN:HB3 | 17 | 0.81 |
| (1,1454) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:32:LYS:HG3 | 20 | 0.81 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG21 | 1:A:59:GLU:HG2 | 6 | 0.81 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG22 | 1:A:59:GLU:HG2 | 6 | 0.81 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG23 | 1:A:59:GLU:HG2 | 6 | 0.81 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:85:TYR:HB2 | 3 | 0.81 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:85:TYR:HB2 | 3 | 0.81 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:85:TYR:HB2 | 3 | 0.81 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:85:TYR:HB2 | 5 | 0.81 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:85:TYR:HB2 | 5 | 0.81 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:85:TYR:HB2 | 5 | 0.81 |
| (1,1049) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:81:SER:H | 15 | 0.81 |
| (1,1049) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:81:SER:H | 15 | 0.81 |
| (1,1049) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:81:SER:H | 15 | 0.81 |
| (1,965) | 1:A:94:ASN:HD21 | 1:A:90:PHE:HB2 | 6 | 0.8 |
| (1,949) | 1:A:90:PHE:HB2 | 1:A:94:ASN:HD22 | 14 | 0.8 |
| (1,919) | 1:A:52:GLU:HG2 | 1:A:52:GLU:HA | 16 | 0.8 |
| (1,644) | 1:A:84:LEU:H | 1:A:92:GLU:HG3 | 7 | 0.8 |
| (1,644) | 1:A:84:LEU:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 7 | 0.8 |
| (1,3046) | 1:A:23:ASP:H | 1:A:22:LEU:HB2 | 3 | 0.8 |
| (1,3046) | 1:A:23:ASP:H | 1:A:22:LEU:HB2 | 15 | 0.8 |
| (1,3046) | 1:A:23:ASP:H | 1:A:22:LEU:HB2 | 17 | 0.8 |
| (1,3024) | 1:A:5:ARG:H | 1:A:5:ARG:HB3 | 1 | 0.8 |
| (1,3024) | 1:A:5:ARG:H | 1:A:5:ARG:HB3 | 10 | 0.8 |
| (1,3024) | 1:A:5:ARG:H | 1:A:5:ARG:HB3 | 11 | 0.8 |
| (1,2858) | 1:A:53:ALA:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 3 | 0.8 |
| (1,2756) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:25:ASN:HD22 | 6 | 0.8 |
| (1,264) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:60:ILE:HA | 15 | 0.8 |
| (1,264) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:63:ALA:HA | 15 | 0.8 |
| (1,264) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:60:ILE:HA | 16 | 0.8 |
| (1,264) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:63:ALA:HA | 16 | 0.8 |
| (1,221) | 1:A:34:SER:HB3 | 1:A:37:LYS:HE2 | 14 | 0.8 |
| (1,221) | 1:A:34:SER:HB3 | 1:A:37:LYS:HE3 | 14 | 0.8 |
| (1,2021) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:63:ALA:HA | 16 | 0.8 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG21 | 15 | 0.8 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG23 | 15 | 0.8 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG22 | 15 | 0.8 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB1 | 1:A:55:ASP:HB3 | 2 | 0.8 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB2 | 1:A:55:ASP:HB3 | 2 | 0.8 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB3 | 1:A:55:ASP:HB3 | 2 | 0.8 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB1 | 1:A:55:ASP:HB3 | 7 | 0.8 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB2 | 1:A:55:ASP:HB3 | 7 | 0.8 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB3 | 1:A:55:ASP:HB3 | 7 | 0.8 |
| (1,1751) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:H | 20 | 0.8 |
| (1,1698) | 1:A:44:PRO:HA | 1:A:47:ASN:HB3 | 8 | 0.8 |
| (1,1698) | 1:A:44:PRO:HA | 1:A:47:ASN:HB3 | 15 | 0.8 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG21 | 1:A:59:GLU:HG2 | 4 | 0.8 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG22 | 1:A:59:GLU:HG2 | 4 | 0.8 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG23 | 1:A:59:GLU:HG2 | 4 | 0.8 |
| (1,1075) | 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HB2 | 2 | 0.8 |
| (1,1075) | 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HB2 | 8 | 0.8 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:85:TYR:HB2 | 8 | 0.8 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:85:TYR:HB2 | 8 | 0.8 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:85:TYR:HB2 | 8 | 0.8 |
| (1,949) | 1:A:90:PHE:HB2 | 1:A:94:ASN:HD22 | 4 | 0.79 |
| (1,912) | 1:A:46:LYS:HB3 | 1:A:43:HIS:HB3 | 11 | 0.79 |
| (1,3046) | 1:A:23:ASP:H | 1:A:22:LEU:HB2 | 14 | 0.79 |
| (1,2858) | 1:A:53:ALA:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 5 | 0.79 |
| (1,264) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:60:ILE:HA | 11 | 0.79 |
| (1,264) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:63:ALA:HA | 11 | 0.79 |
| (1,264) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:60:ILE:HA | 17 | 0.79 |
| (1,264) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:63:ALA:HA | 17 | 0.79 |
| (1,264) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:60:ILE:HA | 19 | 0.79 |
| (1,264) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:63:ALA:HA | 19 | 0.79 |
| (1,264) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:60:ILE:HA | 20 | 0.79 |
| (1,264) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:63:ALA:HA | 20 | 0.79 |
| (1,2550) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:6:GLN:HB2 | 7 | 0.79 |
| (1,2550) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:6:GLN:HB2 | 12 | 0.79 |
| (1,2550) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:6:GLN:HB2 | 15 | 0.79 |
| (1,2550) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:6:GLN:HB2 | 20 | 0.79 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD13 | 6 | 0.79 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD11 | 6 | 0.79 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD12 | 6 | 0.79 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG21 | 10 | 0.79 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG23 | 10 | 0.79 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG22 | 10 | 0.79 |
| (1,1985) | 1:A:59:GLU:HG3 | 1:A:58:LYS:H | 13 | 0.79 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB1 | 1:A:55:ASP:HB3 | 1 | 0.79 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB2 | 1:A:55:ASP:HB3 | 1 | 0.79 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB3 | 1:A:55:ASP:HB3 | 1 | 0.79 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB2 | 1:A:47:ASN:HB3 | 19 | 0.79 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB1 | 1:A:47:ASN:HB3 | 19 | 0.79 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB3 | 1:A:47:ASN:HB3 | 19 | 0.79 |
| (1,1076) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:33:LYS:HB3 | 3 | 0.79 |
| (1,986) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:43:HIS:HD2 | 16 | 0.78 |
| (1,965) | 1:A:94:ASN:HD21 | 1:A:90:PHE:HB2 | 8 | 0.78 |
| (1,965) | 1:A:94:ASN:HD21 | 1:A:90:PHE:HB2 | 18 | 0.78 |
| (1,2858) | 1:A:53:ALA:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 2 | 0.78 |
| (1,264) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:60:ILE:HA | 12 | 0.78 |
| (1,264) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:63:ALA:HA | 12 | 0.78 |
| (1,2551) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:7:ARG:HG2 | 11 | 0.78 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG21 | 19 | 0.78 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG23 | 19 | 0.78 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG22 | 19 | 0.78 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB1 | 1:A:55:ASP:HB3 | 17 | 0.78 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB2 | 1:A:55:ASP:HB3 | 17 | 0.78 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB3 | 1:A:55:ASP:HB3 | 17 | 0.78 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB2 | 1:A:44:PRO:HB2 | 17 | 0.78 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB1 | 1:A:44:PRO:HB2 | 17 | 0.78 |
| (1,1873) | 1:A:53:ALA:HB3 | 1:A:44:PRO:HB2 | 17 | 0.78 |
| (1,1612) | 1:A:39:ALA:HA | 1:A:42:TYR:HB3 | 11 | 0.78 |
| (1,949) | 1:A:90:PHE:HB2 | 1:A:94:ASN:HD22 | 11 | 0.77 |
| (1,55) | 1:A:5:ARG:HD2 | 1:A:5:ARG:HB2 | 14 | 0.77 |
| (1,55) | 1:A:5:ARG:HD3 | 1:A:5:ARG:HB2 | 14 | 0.77 |
| (1,55) | 1:A:7:ARG:HD3 | 1:A:7:ARG:HB3 | 14 | 0.77 |
| (1,55) | 1:A:7:ARG:HD2 | 1:A:7:ARG:HB3 | 14 | 0.77 |
| (1,2858) | 1:A:53:ALA:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 17 | 0.77 |
| (1,2756) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:25:ASN:HD22 | 20 | 0.77 |
| (1,264) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:60:ILE:HA | 2 | 0.77 |
| (1,264) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:63:ALA:HA | 2 | 0.77 |
| (1,264) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:60:ILE:HA | 18 | 0.77 |
| (1,264) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:63:ALA:HA | 18 | 0.77 |
| (1,2551) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:7:ARG:HG2 | 1 | 0.77 |
| (1,2550) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:6:GLN:HB2 | 19 | 0.77 |
| (1,2021) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:63:ALA:HA | 1 | 0.77 |
| (1,2021) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:63:ALA:HA | 15 | 0.77 |
| (1,1985) | 1:A:59:GLU:HG3 | 1:A:58:LYS:H | 19 | 0.77 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB1 | 1:A:55:ASP:HB3 | 18 | 0.77 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB2 | 1:A:55:ASP:HB3 | 18 | 0.77 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB3 | 1:A:55:ASP:HB3 | 18 | 0.77 |
| (1,1454) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:32:LYS:HG3 | 7 | 0.77 |
| (1,1454) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:32:LYS:HG3 | 11 | 0.77 |
| (1,55) | 1:A:5:ARG:HD2 | 1:A:5:ARG:HB2 | 7 | 0.76 |
| (1,55) | 1:A:5:ARG:HD3 | 1:A:5:ARG:HB2 | 7 | 0.76 |
| (1,55) | 1:A:7:ARG:HD3 | 1:A:7:ARG:HB3 | 7 | 0.76 |
| (1,55) | 1:A:7:ARG:HD2 | 1:A:7:ARG:HB3 | 7 | 0.76 |
| (1,55) | 1:A:5:ARG:HD2 | 1:A:5:ARG:HB2 | 17 | 0.76 |
| (1,55) | 1:A:5:ARG:HD3 | 1:A:5:ARG:HB2 | 17 | 0.76 |
| (1,55) | 1:A:7:ARG:HD3 | 1:A:7:ARG:HB3 | 17 | 0.76 |
| (1,55) | 1:A:7:ARG:HD2 | 1:A:7:ARG:HB3 | 17 | 0.76 |
| (1,264) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:60:ILE:HA | 9 | 0.76 |
| (1,264) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:63:ALA:HA | 9 | 0.76 |
| (1,264) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:60:ILE:HA | 14 | 0.76 |
| (1,264) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:63:ALA:HA | 14 | 0.76 |
| (1,2585) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:62:ASN:H | 5 | 0.76 |
| (1,2551) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:7:ARG:HG2 | 15 | 0.76 |
| (1,2551) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:7:ARG:HG2 | 20 | 0.76 |
| (1,2460) | 1:A:33:LYS:HD2 | 1:A:33:LYS:H | 10 | 0.76 |
| (1,2021) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:63:ALA:HA | 11 | 0.76 |
| (1,2021) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:63:ALA:HA | 14 | 0.76 |
| (1,2021) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:63:ALA:HA | 17 | 0.76 |
| (1,2021) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:63:ALA:HA | 18 | 0.76 |
| (1,2021) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:63:ALA:HA | 19 | 0.76 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD13 | 18 | 0.76 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD11 | 18 | 0.76 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD12 | 18 | 0.76 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG21 | 14 | 0.76 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG23 | 14 | 0.76 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG22 | 14 | 0.76 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB1 | 1:A:55:ASP:HB3 | 10 | 0.76 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB2 | 1:A:55:ASP:HB3 | 10 | 0.76 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB3 | 1:A:55:ASP:HB3 | 10 | 0.76 |
| (1,1698) | 1:A:44:PRO:HA | 1:A:47:ASN:HB3 | 9 | 0.76 |
| (1,1454) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:32:LYS:HG3 | 8 | 0.76 |
| (1,997) | 1:A:6:GLN:HG2 | 1:A:6:GLN:H | 20 | 0.75 |
| (1,965) | 1:A:94:ASN:HD21 | 1:A:90:PHE:HB2 | 4 | 0.75 |
| (1,965) | 1:A:94:ASN:HD21 | 1:A:90:PHE:HB2 | 15 | 0.75 |
| (1,949) | 1:A:90:PHE:HB2 | 1:A:94:ASN:HD22 | 20 | 0.75 |
| (1,3024) | 1:A:5:ARG:H | 1:A:5:ARG:HB3 | 6 | 0.75 |
| (1,3024) | 1:A:5:ARG:H | 1:A:5:ARG:HB3 | 18 | 0.75 |
| (1,2858) | 1:A:53:ALA:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 15 | 0.75 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2756) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:25:ASN:HD22 | 3 | 0.75 |
| (1,2756) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:25:ASN:HD22 | 15 | 0.75 |
| (1,2592) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HB3 | 10 | 0.75 |
| (1,2460) | 1:A:33:LYS:HD2 | 1:A:33:LYS:H | 11 | 0.75 |
| (1,2021) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:63:ALA:HA | 12 | 0.75 |
| (1,2021) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:63:ALA:HA | 20 | 0.75 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD13 | 4 | 0.75 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD11 | 4 | 0.75 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD12 | 4 | 0.75 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD13 | 8 | 0.75 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD11 | 8 | 0.75 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD12 | 8 | 0.75 |
| (1,1985) | 1:A:59:GLU:HG3 | 1:A:58:LYS:H | 6 | 0.75 |
| (1,1935) | 1:A:56:LYS:HB2 | 1:A:56:LYS:HE2 | 1 | 0.75 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB1 | 1:A:55:ASP:HB3 | 3 | 0.75 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB2 | 1:A:55:ASP:HB3 | 3 | 0.75 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB3 | 1:A:55:ASP:HB3 | 3 | 0.75 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB2 | 1:A:47:ASN:HB3 | 14 | 0.75 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB1 | 1:A:47:ASN:HB3 | 14 | 0.75 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB3 | 1:A:47:ASN:HB3 | 14 | 0.75 |
| (1,1822) | 1:A:99:PHE:HB3 | 1:A:100:VAL:HG13 | 1 | 0.75 |
| (1,1822) | 1:A:99:PHE:HB3 | 1:A:100:VAL:HG11 | 1 | 0.75 |
| (1,1822) | 1:A:99:PHE:HB3 | 1:A:100:VAL:HG12 | 1 | 0.75 |
| (1,1790) | 1:A:48:PRO:HB3 | 1:A:49:ASP:HB3 | 2 | 0.75 |
| (1,1698) | 1:A:44:PRO:HA | 1:A:47:ASN:HB3 | 4 | 0.75 |
| (1,1408) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HA | 1 | 0.75 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:72:LYS:HB3 | 14 | 0.74 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:72:LYS:HD2 | 14 | 0.74 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:73:ARG:HB3 | 14 | 0.74 |
| (1,55) | 1:A:5:ARG:HD2 | 1:A:5:ARG:HB2 | 15 | 0.74 |
| (1,55) | 1:A:5:ARG:HD3 | 1:A:5:ARG:HB2 | 15 | 0.74 |
| (1,55) | 1:A:7:ARG:HD3 | 1:A:7:ARG:HB3 | 15 | 0.74 |
| (1,55) | 1:A:7:ARG:HD2 | 1:A:7:ARG:HB3 | 15 | 0.74 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG22 | 12 | 0.74 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG21 | 12 | 0.74 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG23 | 12 | 0.74 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:78:LYS:HG2 | 12 | 0.74 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:78:LYS:HG2 | 12 | 0.74 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD13 | 12 | 0.74 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD11 | 12 | 0.74 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD12 | 12 | 0.74 |
| (1,3024) | 1:A:5:ARG:H | 1:A:5:ARG:HB3 | 19 | 0.74 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2858) | 1:A:53:ALA:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 1 | 0.74 |
| (1,2858) | 1:A:53:ALA:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 9 | 0.74 |
| (1,2858) | 1:A:53:ALA:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 11 | 0.74 |
| (1,2756) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:25:ASN:HD22 | 17 | 0.74 |
| (1,264) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:60:ILE:HA | 5 | 0.74 |
| (1,264) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:63:ALA:HA | 5 | 0.74 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD13 | 13 | 0.74 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD11 | 13 | 0.74 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD12 | 13 | 0.74 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG21 | 12 | 0.74 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG23 | 12 | 0.74 |
| (1,2008) | 1:A:59:GLU:HB3 | 1:A:60:ILE:HG22 | 12 | 0.74 |
| (1,1763) | 1:A:58:LYS:HG3 | 1:A:58:LYS:H | 10 | 0.74 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG21 | 1:A:59:GLU:HG2 | 19 | 0.74 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG22 | 1:A:59:GLU:HG2 | 19 | 0.74 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG23 | 1:A:59:GLU:HG2 | 19 | 0.74 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG21 | 1:A:59:GLU:HG2 | 20 | 0.74 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG22 | 1:A:59:GLU:HG2 | 20 | 0.74 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG23 | 1:A:59:GLU:HG2 | 20 | 0.74 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:85:TYR:HB2 | 12 | 0.74 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:85:TYR:HB2 | 12 | 0.74 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:85:TYR:HB2 | 12 | 0.74 |
| (1,3024) | 1:A:5:ARG:H | 1:A:5:ARG:HB3 | 17 | 0.73 |
| (1,2828) | 1:A:59:GLU:H | 1:A:59:GLU:HB2 | 8 | 0.73 |
| (1,2756) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:25:ASN:HD22 | 1 | 0.73 |
| (1,264) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:60:ILE:HA | 3 | 0.73 |
| (1,264) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:63:ALA:HA | 3 | 0.73 |
| (1,2021) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:63:ALA:HA | 2 | 0.73 |
| (1,2021) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:63:ALA:HA | 5 | 0.73 |
| (1,2021) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:63:ALA:HA | 8 | 0.73 |
| (1,2021) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:63:ALA:HA | 10 | 0.73 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD13 | 19 | 0.73 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD11 | 19 | 0.73 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD12 | 19 | 0.73 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB1 | 1:A:55:ASP:HB3 | 12 | 0.73 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB2 | 1:A:55:ASP:HB3 | 12 | 0.73 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB3 | 1:A:55:ASP:HB3 | 12 | 0.73 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB2 | 1:A:47:ASN:HB3 | 2 | 0.73 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB1 | 1:A:47:ASN:HB3 | 2 | 0.73 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB3 | 1:A:47:ASN:HB3 | 2 | 0.73 |
| (1,1763) | 1:A:58:LYS:HG3 | 1:A:58:LYS:H | 15 | 0.73 |
| (1,1408) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HA | 11 | 0.73 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG21 | 1:A:59:GLU:HG2 | 3 | 0.73 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG22 | 1:A:59:GLU:HG2 | 3 | 0.73 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG23 | 1:A:59:GLU:HG2 | 3 | 0.73 |
| (1,774) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:41:LYS:HB2 | 4 | 0.72 |
| (1,774) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:41:LYS:HD2 | 4 | 0.72 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG22 | 16 | 0.72 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG21 | 16 | 0.72 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG23 | 16 | 0.72 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:78:LYS:HG2 | 16 | 0.72 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:78:LYS:HG2 | 16 | 0.72 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD13 | 16 | 0.72 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD11 | 16 | 0.72 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD12 | 16 | 0.72 |
| (1,2858) | 1:A:53:ALA:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 14 | 0.72 |
| (1,2828) | 1:A:59:GLU:H | 1:A:59:GLU:HB2 | 9 | 0.72 |
| (1,2828) | 1:A:59:GLU:H | 1:A:59:GLU:HB2 | 14 | 0.72 |
| (1,2756) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:25:ASN:HD22 | 16 | 0.72 |
| (1,2756) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:25:ASN:HD22 | 19 | 0.72 |
| (1,264) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:60:ILE:HA | 8 | 0.72 |
| (1,264) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:63:ALA:HA | 8 | 0.72 |
| (1,2021) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:63:ALA:HA | 3 | 0.72 |
| (1,2021) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:63:ALA:HA | 9 | 0.72 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD13 | 5 | 0.72 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD11 | 5 | 0.72 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD12 | 5 | 0.72 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD13 | 7 | 0.72 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD11 | 7 | 0.72 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD12 | 7 | 0.72 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB1 | 1:A:55:ASP:HB3 | 4 | 0.72 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB2 | 1:A:55:ASP:HB3 | 4 | 0.72 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB3 | 1:A:55:ASP:HB3 | 4 | 0.72 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB1 | 1:A:55:ASP:HB3 | 6 | 0.72 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB2 | 1:A:55:ASP:HB3 | 6 | 0.72 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB3 | 1:A:55:ASP:HB3 | 6 | 0.72 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB1 | 1:A:55:ASP:HB3 | 19 | 0.72 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB2 | 1:A:55:ASP:HB3 | 19 | 0.72 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB3 | 1:A:55:ASP:HB3 | 19 | 0.72 |
| (1,1790) | 1:A:48:PRO:HB3 | 1:A:49:ASP:HB3 | 12 | 0.72 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG21 | 1:A:59:GLU:HG2 | 11 | 0.72 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG22 | 1:A:59:GLU:HG2 | 11 | 0.72 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG23 | 1:A:59:GLU:HG2 | 11 | 0.72 |
| (1,986) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:43:HIS:HD2 | 20 | 0.71 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,965) | 1:A:94:ASN:HD21 | 1:A:90:PHE:HB2 | 11 | 0.71 |
| (1,949) | 1:A:90:PHE:HB2 | 1:A:94:ASN:HD22 | 5 | 0.71 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:72:LYS:HB3 | 8 | 0.71 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:72:LYS:HD2 | 8 | 0.71 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:73:ARG:HB3 | 8 | 0.71 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG22 | 1 | 0.71 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG21 | 1 | 0.71 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG23 | 1 | 0.71 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:78:LYS:HG2 | 1 | 0.71 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:78:LYS:HG2 | 1 | 0.71 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD13 | 1 | 0.71 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD11 | 1 | 0.71 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD12 | 1 | 0.71 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG22 | 4 | 0.71 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG21 | 4 | 0.71 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG23 | 4 | 0.71 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:78:LYS:HG2 | 4 | 0.71 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:78:LYS:HG2 | 4 | 0.71 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD13 | 4 | 0.71 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD11 | 4 | 0.71 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD12 | 4 | 0.71 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG22 | 6 | 0.71 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG21 | 6 | 0.71 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG23 | 6 | 0.71 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:78:LYS:HG2 | 6 | 0.71 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:78:LYS:HG2 | 6 | 0.71 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD13 | 6 | 0.71 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD11 | 6 | 0.71 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD12 | 6 | 0.71 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG22 | 13 | 0.71 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG21 | 13 | 0.71 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG23 | 13 | 0.71 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:78:LYS:HG2 | 13 | 0.71 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:78:LYS:HG2 | 13 | 0.71 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD13 | 13 | 0.71 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD11 | 13 | 0.71 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD12 | 13 | 0.71 |
| (1,3024) | 1:A:5:ARG:H | 1:A:5:ARG:HB3 | 3 | 0.71 |
| (1,3024) | 1:A:5:ARG:H | 1:A:5:ARG:HB3 | 7 | 0.71 |
| (1,3024) | 1:A:5:ARG:H | 1:A:5:ARG:HB3 | 13 | 0.71 |
| (1,2858) | 1:A:53:ALA:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 12 | 0.71 |
| (1,2828) | 1:A:59:GLU:H | 1:A:59:GLU:HB2 | 6 | 0.71 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2828) | 1:A:59:GLU:H | 1:A:59:GLU:HB2 | 10 | 0.71 |
| (1,2828) | 1:A:59:GLU:H | 1:A:59:GLU:HB2 | 16 | 0.71 |
| (1,2828) | 1:A:59:GLU:H | 1:A:59:GLU:HB2 | 18 | 0.71 |
| (1,264) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:60:ILE:HA | 10 | 0.71 |
| (1,264) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:63:ALA:HA | 10 | 0.71 |
| (1,2585) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:62:ASN:H | 15 | 0.71 |
| (1,2460) | 1:A:33:LYS:HD2 | 1:A:33:LYS:H | 18 | 0.71 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD13 | 1 | 0.71 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD11 | 1 | 0.71 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD12 | 1 | 0.71 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD13 | 20 | 0.71 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD11 | 20 | 0.71 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD12 | 20 | 0.71 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB1 | 1:A:55:ASP:HB3 | 16 | 0.71 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB2 | 1:A:55:ASP:HB3 | 16 | 0.71 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB3 | 1:A:55:ASP:HB3 | 16 | 0.71 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB2 | 1:A:47:ASN:HB3 | 10 | 0.71 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB1 | 1:A:47:ASN:HB3 | 10 | 0.71 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB3 | 1:A:47:ASN:HB3 | 10 | 0.71 |
| (1,1790) | 1:A:48:PRO:HB3 | 1:A:49:ASP:HB3 | 10 | 0.71 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG21 | 1:A:59:GLU:HG2 | 16 | 0.71 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG22 | 1:A:59:GLU:HG2 | 16 | 0.71 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG23 | 1:A:59:GLU:HG2 | 16 | 0.71 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG21 | 8 | 0.71 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG22 | 8 | 0.71 |
| (1,1133) | 1:A:14:GLU:HG3 | 1:A:11:THR:HG23 | 8 | 0.71 |
| (1,838) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:58:LYS:HB2 | 3 | 0.7 |
| (1,838) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 3 | 0.7 |
| (1,2971) | 1:A:65:ALA:H | 1:A:64:HIS:HB2 | 6 | 0.7 |
| (1,2828) | 1:A:59:GLU:H | 1:A:59:GLU:HB2 | 1 | 0.7 |
| (1,2828) | 1:A:59:GLU:H | 1:A:59:GLU:HB2 | 11 | 0.7 |
| (1,2828) | 1:A:59:GLU:H | 1:A:59:GLU:HB2 | 12 | 0.7 |
| (1,2828) | 1:A:59:GLU:H | 1:A:59:GLU:HB2 | 13 | 0.7 |
| (1,2828) | 1:A:59:GLU:H | 1:A:59:GLU:HB2 | 19 | 0.7 |
| (1,2828) | 1:A:59:GLU:H | 1:A:59:GLU:HB2 | 20 | 0.7 |
| (1,2756) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:25:ASN:HD22 | 11 | 0.7 |
| (1,264) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:60:ILE:HA | 7 | 0.7 |
| (1,264) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:63:ALA:HA | 7 | 0.7 |
| (1,2592) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HB3 | 15 | 0.7 |
| (1,2510) | 1:A:49:ASP:HB2 | 1:A:48:PRO:HB3 | 13 | 0.7 |
| (1,2213) | 1:A:75:ILE:HD11 | 1:A:92:GLU:HG2 | 2 | 0.7 |
| (1,2213) | 1:A:75:ILE:HD12 | 1:A:92:GLU:HG2 | 2 | 0.7 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2213) | 1:A:75:ILE:HD13 | 1:A:92:GLU:HG2 | 2 | 0.7 |
| (1,2021) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:63:ALA:HA | 7 | 0.7 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB2 | 1:A:47:ASN:HB3 | 13 | 0.7 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB1 | 1:A:47:ASN:HB3 | 13 | 0.7 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB3 | 1:A:47:ASN:HB3 | 13 | 0.7 |
| (1,1790) | 1:A:48:PRO:HB3 | 1:A:49:ASP:HB3 | 1 | 0.7 |
| (1,1763) | 1:A:58:LYS:HG3 | 1:A:58:LYS:H | 13 | 0.7 |
| (1,1075) | 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HB2 | 16 | 0.7 |
| (1,838) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:58:LYS:HB2 | 14 | 0.69 |
| (1,838) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 14 | 0.69 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:72:LYS:HB3 | 16 | 0.69 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:72:LYS:HD2 | 16 | 0.69 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:73:ARG:HB3 | 16 | 0.69 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:72:LYS:HB3 | 18 | 0.69 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:72:LYS:HD2 | 18 | 0.69 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:73:ARG:HB3 | 18 | 0.69 |
| (1,55) | 1:A:5:ARG:HD2 | 1:A:5:ARG:HB2 | 12 | 0.69 |
| (1,55) | 1:A:5:ARG:HD3 | 1:A:5:ARG:HB2 | 12 | 0.69 |
| (1,55) | 1:A:7:ARG:HD3 | 1:A:7:ARG:HB3 | 12 | 0.69 |
| (1,55) | 1:A:7:ARG:HD2 | 1:A:7:ARG:HB3 | 12 | 0.69 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG22 | 15 | 0.69 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG21 | 15 | 0.69 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG23 | 15 | 0.69 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:78:LYS:HG2 | 15 | 0.69 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:78:LYS:HG2 | 15 | 0.69 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD13 | 15 | 0.69 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD11 | 15 | 0.69 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD12 | 15 | 0.69 |
| (1,2858) | 1:A:53:ALA:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 7 | 0.69 |
| (1,2828) | 1:A:59:GLU:H | 1:A:59:GLU:HB2 | 2 | 0.69 |
| (1,2828) | 1:A:59:GLU:H | 1:A:59:GLU:HB2 | 3 | 0.69 |
| (1,2828) | 1:A:59:GLU:H | 1:A:59:GLU:HB2 | 4 | 0.69 |
| (1,2828) | 1:A:59:GLU:H | 1:A:59:GLU:HB2 | 7 | 0.69 |
| (1,2828) | 1:A:59:GLU:H | 1:A:59:GLU:HB2 | 15 | 0.69 |
| (1,2828) | 1:A:59:GLU:H | 1:A:59:GLU:HB2 | 17 | 0.69 |
| (1,2756) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:25:ASN:HD22 | 18 | 0.69 |
| (1,2592) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HB3 | 2 | 0.69 |
| (1,2592) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HB3 | 17 | 0.69 |
| (1,2585) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:62:ASN:H | 3 | 0.69 |
| (1,2510) | 1:A:49:ASP:HB2 | 1:A:48:PRO:HB3 | 20 | 0.69 |
| (1,2271) | 1:A:81:SER:HB3 | 1:A:9:LEU:HB3 | 15 | 0.69 |
| (1,2213) | 1:A:75:ILE:HD11 | 1:A:92:GLU:HG2 | 4 | 0.69 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2213) | 1:A:75:ILE:HD12 | 1:A:92:GLU:HG2 | 4 | 0.69 |
| (1,2213) | 1:A:75:ILE:HD13 | 1:A:92:GLU:HG2 | 4 | 0.69 |
| (1,2021) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:63:ALA:HA | 13 | 0.69 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD13 | 2 | 0.69 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD11 | 2 | 0.69 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD12 | 2 | 0.69 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD13 | 17 | 0.69 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD11 | 17 | 0.69 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD12 | 17 | 0.69 |
| (1,1985) | 1:A:59:GLU:HG3 | 1:A:58:LYS:H | 4 | 0.69 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB1 | 1:A:55:ASP:HB3 | 11 | 0.69 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB2 | 1:A:55:ASP:HB3 | 11 | 0.69 |
| (1,1884) | 1:A:54:ALA:HB3 | 1:A:55:ASP:HB3 | 11 | 0.69 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB2 | 1 | 0.69 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB1 | 1 | 0.69 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB3 | 1 | 0.69 |
| (1,1790) | 1:A:48:PRO:HB3 | 1:A:49:ASP:HB3 | 14 | 0.69 |
| (1,1750) | 1:A:46:LYS:HD3 | 1:A:46:LYS:HB2 | 11 | 0.69 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD11 | 1:A:36:ARG:HB2 | 10 | 0.69 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD13 | 1:A:36:ARG:HB2 | 10 | 0.69 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD12 | 1:A:36:ARG:HB2 | 10 | 0.69 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD11 | 1:A:36:ARG:HB2 | 15 | 0.69 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD13 | 1:A:36:ARG:HB2 | 15 | 0.69 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD12 | 1:A:36:ARG:HB2 | 15 | 0.69 |
| (1,1612) | 1:A:39:ALA:HA | 1:A:42:TYR:HB3 | 7 | 0.69 |
| (1,1113) | 1:A:12:SER:HB3 | 1:A:14:GLU:HG3 | 11 | 0.69 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:85:TYR:HB2 | 11 | 0.69 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:85:TYR:HB2 | 11 | 0.69 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:85:TYR:HB2 | 11 | 0.69 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:72:LYS:HB3 | 9 | 0.68 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:72:LYS:HD2 | 9 | 0.68 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:73:ARG:HB3 | 9 | 0.68 |
| (1,55) | 1:A:5:ARG:HD2 | 1:A:5:ARG:HB2 | 13 | 0.68 |
| (1,55) | 1:A:5:ARG:HD3 | 1:A:5:ARG:HB2 | 13 | 0.68 |
| (1,55) | 1:A:7:ARG:HD3 | 1:A:7:ARG:HB3 | 13 | 0.68 |
| (1,55) | 1:A:7:ARG:HD2 | 1:A:7:ARG:HB3 | 13 | 0.68 |
| (1,55) | 1:A:5:ARG:HD2 | 1:A:5:ARG:HB2 | 19 | 0.68 |
| (1,55) | 1:A:5:ARG:HD3 | 1:A:5:ARG:HB2 | 19 | 0.68 |
| (1,55) | 1:A:7:ARG:HD3 | 1:A:7:ARG:HB3 | 19 | 0.68 |
| (1,55) | 1:A:7:ARG:HD2 | 1:A:7:ARG:HB3 | 19 | 0.68 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG22 | 8 | 0.68 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG21 | 8 | 0.68 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG23 | 8 | 0.68 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:78:LYS:HG2 | 8 | 0.68 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:78:LYS:HG2 | 8 | 0.68 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD13 | 8 | 0.68 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD11 | 8 | 0.68 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD12 | 8 | 0.68 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG22 | 9 | 0.68 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG21 | 9 | 0.68 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG23 | 9 | 0.68 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:78:LYS:HG2 | 9 | 0.68 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:78:LYS:HG2 | 9 | 0.68 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD13 | 9 | 0.68 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD11 | 9 | 0.68 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD12 | 9 | 0.68 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG22 | 17 | 0.68 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG21 | 17 | 0.68 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG23 | 17 | 0.68 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:78:LYS:HG2 | 17 | 0.68 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:78:LYS:HG2 | 17 | 0.68 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD13 | 17 | 0.68 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD11 | 17 | 0.68 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD12 | 17 | 0.68 |
| (1,2971) | 1:A:65:ALA:H | 1:A:64:HIS:HB2 | 13 | 0.68 |
| (1,2971) | 1:A:65:ALA:H | 1:A:64:HIS:HB2 | 15 | 0.68 |
| (1,2858) | 1:A:53:ALA:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 6 | 0.68 |
| (1,2828) | 1:A:59:GLU:H | 1:A:59:GLU:HB2 | 5 | 0.68 |
| (1,2756) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:25:ASN:HD22 | 7 | 0.68 |
| (1,2756) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:25:ASN:HD22 | 12 | 0.68 |
| (1,2611) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:67:LEU:HB3 | 12 | 0.68 |
| (1,2592) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HB3 | 9 | 0.68 |
| (1,2592) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HB3 | 11 | 0.68 |
| (1,2585) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:62:ASN:H | 7 | 0.68 |
| (1,2392) | 1:A:85:TYR:HA | 1:A:88:GLU:HG3 | 6 | 0.68 |
| (1,2386) | 1:A:94:ASN:HD22 | 1:A:93:GLU:HG2 | 2 | 0.68 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD13 | 9 | 0.68 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD11 | 9 | 0.68 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD12 | 9 | 0.68 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD13 | 11 | 0.68 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD11 | 11 | 0.68 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD12 | 11 | 0.68 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD13 | 12 | 0.68 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD11 | 12 | 0.68 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD12 | 12 | 0.68 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB2 | 8 | 0.68 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB1 | 8 | 0.68 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB3 | 8 | 0.68 |
| (1,1790) | 1:A:48:PRO:HB3 | 1:A:49:ASP:HB3 | 9 | 0.68 |
| (1,1763) | 1:A:58:LYS:HG3 | 1:A:58:LYS:H | 7 | 0.68 |
| (1,1612) | 1:A:39:ALA:HA | 1:A:42:TYR:HB3 | 15 | 0.68 |
| (1,1612) | 1:A:39:ALA:HA | 1:A:42:TYR:HB3 | 16 | 0.68 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG21 | 1:A:59:GLU:HG2 | 14 | 0.68 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG22 | 1:A:59:GLU:HG2 | 14 | 0.68 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG23 | 1:A:59:GLU:HG2 | 14 | 0.68 |
| (1,1134) | 1:A:12:SER:HB2 | 1:A:14:GLU:HG3 | 12 | 0.68 |
| (1,1076) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:33:LYS:HB3 | 20 | 0.68 |
| (1,986) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:43:HIS:HD2 | 2 | 0.67 |
| (1,644) | 1:A:84:LEU:H | 1:A:92:GLU:HG3 | 12 | 0.67 |
| (1,644) | 1:A:84:LEU:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 12 | 0.67 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:72:LYS:HB3 | 15 | 0.67 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:72:LYS:HD2 | 15 | 0.67 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:73:ARG:HB3 | 15 | 0.67 |
| (1,55) | 1:A:5:ARG:HD2 | 1:A:5:ARG:HB2 | 3 | 0.67 |
| (1,55) | 1:A:5:ARG:HD3 | 1:A:5:ARG:HB2 | 3 | 0.67 |
| (1,55) | 1:A:7:ARG:HD3 | 1:A:7:ARG:HB3 | 3 | 0.67 |
| (1,55) | 1:A:7:ARG:HD2 | 1:A:7:ARG:HB3 | 3 | 0.67 |
| (1,55) | 1:A:5:ARG:HD2 | 1:A:5:ARG:HB2 | 4 | 0.67 |
| (1,55) | 1:A:5:ARG:HD3 | 1:A:5:ARG:HB2 | 4 | 0.67 |
| (1,55) | 1:A:7:ARG:HD3 | 1:A:7:ARG:HB3 | 4 | 0.67 |
| (1,55) | 1:A:7:ARG:HD2 | 1:A:7:ARG:HB3 | 4 | 0.67 |
| (1,55) | 1:A:5:ARG:HD2 | 1:A:5:ARG:HB2 | 6 | 0.67 |
| (1,55) | 1:A:5:ARG:HD3 | 1:A:5:ARG:HB2 | 6 | 0.67 |
| (1,55) | 1:A:7:ARG:HD3 | 1:A:7:ARG:HB3 | 6 | 0.67 |
| (1,55) | 1:A:7:ARG:HD2 | 1:A:7:ARG:HB3 | 6 | 0.67 |
| (1,55) | 1:A:5:ARG:HD2 | 1:A:5:ARG:HB2 | 8 | 0.67 |
| (1,55) | 1:A:5:ARG:HD3 | 1:A:5:ARG:HB2 | 8 | 0.67 |
| (1,55) | 1:A:7:ARG:HD3 | 1:A:7:ARG:HB3 | 8 | 0.67 |
| (1,55) | 1:A:7:ARG:HD2 | 1:A:7:ARG:HB3 | 8 | 0.67 |
| (1,55) | 1:A:5:ARG:HD2 | 1:A:5:ARG:HB2 | 10 | 0.67 |
| (1,55) | 1:A:5:ARG:HD3 | 1:A:5:ARG:HB2 | 10 | 0.67 |
| (1,55) | 1:A:7:ARG:HD3 | 1:A:7:ARG:HB3 | 10 | 0.67 |
| (1,55) | 1:A:7:ARG:HD2 | 1:A:7:ARG:HB3 | 10 | 0.67 |
| (1,55) | 1:A:5:ARG:HD2 | 1:A:5:ARG:HB2 | 11 | 0.67 |
| (1,55) | 1:A:5:ARG:HD3 | 1:A:5:ARG:HB2 | 11 | 0.67 |
| (1,55) | 1:A:7:ARG:HD3 | 1:A:7:ARG:HB3 | 11 | 0.67 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,55) | 1:A:7:ARG:HD2 | 1:A:7:ARG:HB3 | 11 | 0.67 |
| (1,55) | 1:A:5:ARG:HD2 | 1:A:5:ARG:HB2 | 18 | 0.67 |
| (1,55) | 1:A:5:ARG:HD3 | 1:A:5:ARG:HB2 | 18 | 0.67 |
| (1,55) | 1:A:7:ARG:HD3 | 1:A:7:ARG:HB3 | 18 | 0.67 |
| (1,55) | 1:A:7:ARG:HD2 | 1:A:7:ARG:HB3 | 18 | 0.67 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG22 | 3 | 0.67 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG21 | 3 | 0.67 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG23 | 3 | 0.67 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:78:LYS:HG2 | 3 | 0.67 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:78:LYS:HG2 | 3 | 0.67 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD13 | 3 | 0.67 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD11 | 3 | 0.67 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD12 | 3 | 0.67 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG22 | 10 | 0.67 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG21 | 10 | 0.67 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG23 | 10 | 0.67 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:78:LYS:HG2 | 10 | 0.67 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:78:LYS:HG2 | 10 | 0.67 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD13 | 10 | 0.67 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD11 | 10 | 0.67 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD12 | 10 | 0.67 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG22 | 18 | 0.67 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG21 | 18 | 0.67 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG23 | 18 | 0.67 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:78:LYS:HG2 | 18 | 0.67 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:78:LYS:HG2 | 18 | 0.67 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD13 | 18 | 0.67 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD11 | 18 | 0.67 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD12 | 18 | 0.67 |
| (1,2971) | 1:A:65:ALA:H | 1:A:64:HIS:HB2 | 16 | 0.67 |
| (1,2733) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 16 | 0.67 |
| (1,2592) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HB3 | 4 | 0.67 |
| (1,2592) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HB3 | 19 | 0.67 |
| (1,2551) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:7:ARG:HG2 | 16 | 0.67 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD13 | 16 | 0.67 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD11 | 16 | 0.67 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD12 | 16 | 0.67 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB2 | 1:A:47:ASN:HB3 | 3 | 0.67 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB1 | 1:A:47:ASN:HB3 | 3 | 0.67 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB3 | 1:A:47:ASN:HB3 | 3 | 0.67 |
| (1,1841) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 10 | 0.67 |
| (1,1791) | 1:A:47:ASN:HB2 | 1:A:48:PRO:HD2 | 1 | 0.67 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1791) | 1:A:47:ASN:HB2 | 1:A:48:PRO:HD2 | 9 | 0.67 |
| (1,1791) | 1:A:47:ASN:HB2 | 1:A:48:PRO:HD2 | 16 | 0.67 |
| (1,1791) | 1:A:47:ASN:HB2 | 1:A:48:PRO:HD2 | 20 | 0.67 |
| (1,1790) | 1:A:48:PRO:HB3 | 1:A:49:ASP:HB3 | 8 | 0.67 |
| (1,1790) | 1:A:48:PRO:HB3 | 1:A:49:ASP:HB3 | 16 | 0.67 |
| (1,1751) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:H | 11 | 0.67 |
| (1,1750) | 1:A:46:LYS:HD3 | 1:A:46:LYS:HB2 | 20 | 0.67 |
| (1,1661) | 1:A:41:LYS:HE3 | 1:A:42:TYR:HE2 | 11 | 0.67 |
| (1,1661) | 1:A:41:LYS:HE3 | 1:A:42:TYR:HE1 | 11 | 0.67 |
| (1,1454) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:32:LYS:HG3 | 17 | 0.67 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:85:TYR:HB2 | 7 | 0.67 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:85:TYR:HB2 | 7 | 0.67 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:85:TYR:HB2 | 7 | 0.67 |
| (1,949) | 1:A:90:PHE:HB2 | 1:A:94:ASN:HD22 | 10 | 0.66 |
| (1,838) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:58:LYS:HB2 | 17 | 0.66 |
| (1,838) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 17 | 0.66 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:72:LYS:HB3 | 10 | 0.66 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:72:LYS:HD2 | 10 | 0.66 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:73:ARG:HB3 | 10 | 0.66 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:72:LYS:HB3 | 12 | 0.66 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:72:LYS:HD2 | 12 | 0.66 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:73:ARG:HB3 | 12 | 0.66 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG22 | 14 | 0.66 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG21 | 14 | 0.66 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG23 | 14 | 0.66 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:78:LYS:HG2 | 14 | 0.66 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:78:LYS:HG2 | 14 | 0.66 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD13 | 14 | 0.66 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD11 | 14 | 0.66 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD12 | 14 | 0.66 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG22 | 19 | 0.66 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG21 | 19 | 0.66 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG23 | 19 | 0.66 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:78:LYS:HG2 | 19 | 0.66 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:78:LYS:HG2 | 19 | 0.66 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD13 | 19 | 0.66 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD11 | 19 | 0.66 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD12 | 19 | 0.66 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:69:ASP:HB2 | 8 | 0.66 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:69:ASP:HB2 | 8 | 0.66 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:69:ASP:HB2 | 8 | 0.66 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:73:ARG:HD3 | 8 | 0.66 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:73:ARG:HD3 | 8 | 0.66 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:73:ARG:HD3 | 8 | 0.66 |
| (1,3001) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:45:ASP:HB2 | 19 | 0.66 |
| (1,2971) | 1:A:65:ALA:H | 1:A:64:HIS:HB2 | 4 | 0.66 |
| (1,2971) | 1:A:65:ALA:H | 1:A:64:HIS:HB2 | 10 | 0.66 |
| (1,2876) | 1:A:39:ALA:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 5 | 0.66 |
| (1,2876) | 1:A:39:ALA:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 6 | 0.66 |
| (1,2858) | 1:A:53:ALA:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 4 | 0.66 |
| (1,2756) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:25:ASN:HD22 | 8 | 0.66 |
| (1,2585) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:62:ASN:H | 2 | 0.66 |
| (1,2021) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:63:ALA:HA | 6 | 0.66 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD13 | 3 | 0.66 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD11 | 3 | 0.66 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD12 | 3 | 0.66 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD13 | 14 | 0.66 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD11 | 14 | 0.66 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD12 | 14 | 0.66 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD13 | 15 | 0.66 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD11 | 15 | 0.66 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD12 | 15 | 0.66 |
| (1,1791) | 1:A:47:ASN:HB2 | 1:A:48:PRO:HD2 | 12 | 0.66 |
| (1,1790) | 1:A:48:PRO:HB3 | 1:A:49:ASP:HB3 | 17 | 0.66 |
| (1,1763) | 1:A:58:LYS:HG3 | 1:A:58:LYS:H | 3 | 0.66 |
| (1,1763) | 1:A:58:LYS:HG3 | 1:A:58:LYS:H | 8 | 0.66 |
| (1,1763) | 1:A:58:LYS:HG3 | 1:A:58:LYS:H | 9 | 0.66 |
| (1,1411) | 1:A:23:ASP:HB2 | 1:A:24:LYS:HG3 | 19 | 0.66 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG21 | 1:A:59:GLU:HG2 | 9 | 0.66 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG22 | 1:A:59:GLU:HG2 | 9 | 0.66 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG23 | 1:A:59:GLU:HG2 | 9 | 0.66 |
| (1,1113) | 1:A:12:SER:HB3 | 1:A:14:GLU:HG3 | 16 | 0.66 |
| (1,1113) | 1:A:12:SER:HB3 | 1:A:14:GLU:HG3 | 17 | 0.66 |
| (1,1076) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:33:LYS:HB3 | 7 | 0.66 |
| (1,1057) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:6:GLN:HG3 | 5 | 0.66 |
| (1,1057) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:6:GLN:HG3 | 5 | 0.66 |
| (1,1057) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:6:GLN:HG3 | 5 | 0.66 |
| (1,986) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:43:HIS:HD2 | 3 | 0.65 |
| (1,965) | 1:A:94:ASN:HD21 | 1:A:90:PHE:HB2 | 5 | 0.65 |
| (1,838) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:58:LYS:HB2 | 5 | 0.65 |
| (1,838) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 5 | 0.65 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG22 | 11 | 0.65 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG21 | 11 | 0.65 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG23 | 11 | 0.65 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:78:LYS:HG2 | 11 | 0.65 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:78:LYS:HG2 | 11 | 0.65 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD13 | 11 | 0.65 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD11 | 11 | 0.65 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD12 | 11 | 0.65 |
| (1,3024) | 1:A:5:ARG:H | 1:A:5:ARG:HB3 | 15 | 0.65 |
| (1,3001) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:45:ASP:HB2 | 20 | 0.65 |
| (1,2971) | 1:A:65:ALA:H | 1:A:64:HIS:HB2 | 18 | 0.65 |
| (1,2947) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:44:PRO:HB2 | 16 | 0.65 |
| (1,2876) | 1:A:39:ALA:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 2 | 0.65 |
| (1,2858) | 1:A:53:ALA:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 18 | 0.65 |
| (1,2551) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:7:ARG:HG2 | 19 | 0.65 |
| (1,2392) | 1:A:85:TYR:HA | 1:A:88:GLU:HG3 | 4 | 0.65 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD13 | 10 | 0.65 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD11 | 10 | 0.65 |
| (1,2015) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:66:ILE:HD12 | 10 | 0.65 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB2 | 20 | 0.65 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB1 | 20 | 0.65 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB3 | 20 | 0.65 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB2 | 1:A:47:ASN:HB3 | 15 | 0.65 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB1 | 1:A:47:ASN:HB3 | 15 | 0.65 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB3 | 1:A:47:ASN:HB3 | 15 | 0.65 |
| (1,1791) | 1:A:47:ASN:HB2 | 1:A:48:PRO:HD2 | 4 | 0.65 |
| (1,1791) | 1:A:47:ASN:HB2 | 1:A:48:PRO:HD2 | 11 | 0.65 |
| (1,1791) | 1:A:47:ASN:HB2 | 1:A:48:PRO:HD2 | 13 | 0.65 |
| (1,1791) | 1:A:47:ASN:HB2 | 1:A:48:PRO:HD2 | 14 | 0.65 |
| (1,1791) | 1:A:47:ASN:HB2 | 1:A:48:PRO:HD2 | 18 | 0.65 |
| (1,1790) | 1:A:48:PRO:HB3 | 1:A:49:ASP:HB3 | 7 | 0.65 |
| (1,1763) | 1:A:58:LYS:HG3 | 1:A:58:LYS:H | 4 | 0.65 |
| (1,1763) | 1:A:58:LYS:HG3 | 1:A:58:LYS:H | 6 | 0.65 |
| (1,1753) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:HB2 | 13 | 0.65 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD11 | 1:A:36:ARG:HB2 | 9 | 0.65 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD13 | 1:A:36:ARG:HB2 | 9 | 0.65 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD12 | 1:A:36:ARG:HB2 | 9 | 0.65 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG21 | 1:A:59:GLU:HG2 | 7 | 0.65 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG22 | 1:A:59:GLU:HG2 | 7 | 0.65 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG23 | 1:A:59:GLU:HG2 | 7 | 0.65 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG21 | 1:A:59:GLU:HG2 | 10 | 0.65 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG22 | 1:A:59:GLU:HG2 | 10 | 0.65 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG23 | 1:A:59:GLU:HG2 | 10 | 0.65 |
| (1,1113) | 1:A:12:SER:HB3 | 1:A:14:GLU:HG3 | 10 | 0.65 |
| (1,912) | 1:A:46:LYS:HB3 | 1:A:43:HIS:HB3 | 10 | 0.64 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,880) | 1:A:41:LYS:HA | 1:A:41:LYS:HG2 | 5 | 0.64 |
| (1,880) | 1:A:41:LYS:HA | 1:A:41:LYS:HG2 | 6 | 0.64 |
| (1,838) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:58:LYS:HB2 | 20 | 0.64 |
| (1,838) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 20 | 0.64 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:72:LYS:HB3 | 5 | 0.64 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:72:LYS:HD2 | 5 | 0.64 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:73:ARG:HB3 | 5 | 0.64 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:72:LYS:HB3 | 13 | 0.64 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:72:LYS:HD2 | 13 | 0.64 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:73:ARG:HB3 | 13 | 0.64 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG22 | 5 | 0.64 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG21 | 5 | 0.64 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG23 | 5 | 0.64 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:78:LYS:HG2 | 5 | 0.64 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:78:LYS:HG2 | 5 | 0.64 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD13 | 5 | 0.64 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD11 | 5 | 0.64 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD12 | 5 | 0.64 |
| (1,3001) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:45:ASP:HB2 | 17 | 0.64 |
| (1,2971) | 1:A:65:ALA:H | 1:A:64:HIS:HB2 | 9 | 0.64 |
| (1,264) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:60:ILE:HA | 13 | 0.64 |
| (1,264) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:63:ALA:HA | 13 | 0.64 |
| (1,2592) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HB3 | 3 | 0.64 |
| (1,2592) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HB3 | 8 | 0.64 |
| (1,221) | 1:A:34:SER:HB3 | 1:A:37:LYS:HE2 | 6 | 0.64 |
| (1,221) | 1:A:34:SER:HB3 | 1:A:37:LYS:HE3 | 6 | 0.64 |
| (1,221) | 1:A:34:SER:HB3 | 1:A:37:LYS:HE2 | 15 | 0.64 |
| (1,221) | 1:A:34:SER:HB3 | 1:A:37:LYS:HE3 | 15 | 0.64 |
| (1,221) | 1:A:34:SER:HB3 | 1:A:37:LYS:HE2 | 16 | 0.64 |
| (1,221) | 1:A:34:SER:HB3 | 1:A:37:LYS:HE3 | 16 | 0.64 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB2 | 1:A:47:ASN:HB3 | 6 | 0.64 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB1 | 1:A:47:ASN:HB3 | 6 | 0.64 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB3 | 1:A:47:ASN:HB3 | 6 | 0.64 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB2 | 1:A:47:ASN:HB3 | 8 | 0.64 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB1 | 1:A:47:ASN:HB3 | 8 | 0.64 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB3 | 1:A:47:ASN:HB3 | 8 | 0.64 |
| (1,1791) | 1:A:47:ASN:HB2 | 1:A:48:PRO:HD2 | 2 | 0.64 |
| (1,1791) | 1:A:47:ASN:HB2 | 1:A:48:PRO:HD2 | 3 | 0.64 |
| (1,1791) | 1:A:47:ASN:HB2 | 1:A:48:PRO:HD2 | 6 | 0.64 |
| (1,1791) | 1:A:47:ASN:HB2 | 1:A:48:PRO:HD2 | 7 | 0.64 |
| (1,1791) | 1:A:47:ASN:HB2 | 1:A:48:PRO:HD2 | 8 | 0.64 |
| (1,1791) | 1:A:47:ASN:HB2 | 1:A:48:PRO:HD2 | 15 | 0.64 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1791) | 1:A:47:ASN:HB2 | 1:A:48:PRO:HD2 | 19 | 0.64 |
| (1,1790) | 1:A:48:PRO:HB3 | 1:A:49:ASP:HB3 | 4 | 0.64 |
| (1,1763) | 1:A:58:LYS:HG3 | 1:A:58:LYS:H | 2 | 0.64 |
| (1,1763) | 1:A:58:LYS:HG3 | 1:A:58:LYS:H | 11 | 0.64 |
| (1,1763) | 1:A:58:LYS:HG3 | 1:A:58:LYS:H | 19 | 0.64 |
| (1,1698) | 1:A:44:PRO:HA | 1:A:47:ASN:HB3 | 11 | 0.64 |
| (1,1698) | 1:A:44:PRO:HA | 1:A:47:ASN:HB3 | 16 | 0.64 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD11 | 1:A:36:ARG:HB2 | 12 | 0.64 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD13 | 1:A:36:ARG:HB2 | 12 | 0.64 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD12 | 1:A:36:ARG:HB2 | 12 | 0.64 |
| (1,1612) | 1:A:39:ALA:HA | 1:A:42:TYR:HB3 | 1 | 0.64 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG21 | 1:A:59:GLU:HG2 | 1 | 0.64 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG22 | 1:A:59:GLU:HG2 | 1 | 0.64 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG23 | 1:A:59:GLU:HG2 | 1 | 0.64 |
| (1,1135) | 1:A:92:GLU:HG3 | 1:A:92:GLU:HA | 14 | 0.64 |
| (1,1135) | 1:A:92:GLU:HG3 | 1:A:92:GLU:HA | 15 | 0.64 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:85:TYR:HB2 | 1 | 0.64 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:85:TYR:HB2 | 1 | 0.64 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:85:TYR:HB2 | 1 | 0.64 |
| (1,997) | 1:A:6:GLN:HG2 | 1:A:6:GLN:H | 12 | 0.63 |
| (1,986) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:43:HIS:HD2 | 17 | 0.63 |
| (1,977) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 19 | 0.63 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:72:LYS:HB3 | 1 | 0.63 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:72:LYS:HD2 | 1 | 0.63 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:73:ARG:HB3 | 1 | 0.63 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:72:LYS:HB3 | 7 | 0.63 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:72:LYS:HD2 | 7 | 0.63 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:73:ARG:HB3 | 7 | 0.63 |
| (1,471) | 1:A:84:LEU:HB2 | 1:A:85:TYR:HA | 6 | 0.63 |
| (1,471) | 1:A:85:TYR:HA | 1:A:88:GLU:HG3 | 6 | 0.63 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG22 | 20 | 0.63 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG21 | 20 | 0.63 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG23 | 20 | 0.63 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:78:LYS:HG2 | 20 | 0.63 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:78:LYS:HG2 | 20 | 0.63 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD13 | 20 | 0.63 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD11 | 20 | 0.63 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD12 | 20 | 0.63 |
| (1,3103) | 1:A:80:GLY:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 16 | 0.63 |
| (1,3001) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:45:ASP:HB2 | 2 | 0.63 |
| (1,3001) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:45:ASP:HB2 | 4 | 0.63 |
| (1,2971) | 1:A:65:ALA:H | 1:A:64:HIS:HB2 | 1 | 0.63 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2928) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HG3 | 13 | 0.63 |
| (1,2756) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:25:ASN:HD22 | 5 | 0.63 |
| (1,264) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:60:ILE:HA | 6 | 0.63 |
| (1,264) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:63:ALA:HA | 6 | 0.63 |
| (1,2611) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:67:LEU:HB3 | 6 | 0.63 |
| (1,2611) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:67:LEU:HB3 | 14 | 0.63 |
| (1,2592) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HB3 | 6 | 0.63 |
| (1,2585) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:62:ASN:H | 8 | 0.63 |
| (1,2550) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:6:GLN:HB2 | 4 | 0.63 |
| (1,2296) | 1:A:82:LEU:HD12 | 1:A:9:LEU:HD11 | 15 | 0.63 |
| (1,2296) | 1:A:82:LEU:HD12 | 1:A:9:LEU:HD13 | 15 | 0.63 |
| (1,2296) | 1:A:82:LEU:HD12 | 1:A:9:LEU:HD12 | 15 | 0.63 |
| (1,2296) | 1:A:82:LEU:HD11 | 1:A:9:LEU:HD11 | 15 | 0.63 |
| (1,2296) | 1:A:82:LEU:HD11 | 1:A:9:LEU:HD13 | 15 | 0.63 |
| (1,2296) | 1:A:82:LEU:HD11 | 1:A:9:LEU:HD12 | 15 | 0.63 |
| (1,2296) | 1:A:82:LEU:HD13 | 1:A:9:LEU:HD11 | 15 | 0.63 |
| (1,2296) | 1:A:82:LEU:HD13 | 1:A:9:LEU:HD13 | 15 | 0.63 |
| (1,2296) | 1:A:82:LEU:HD13 | 1:A:9:LEU:HD12 | 15 | 0.63 |
| (1,2021) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:63:ALA:HA | 4 | 0.63 |
| (1,1985) | 1:A:59:GLU:HG3 | 1:A:58:LYS:H | 2 | 0.63 |
| (1,1843) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:51:PRO:HD2 | 6 | 0.63 |
| (1,1843) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:51:PRO:HD2 | 20 | 0.63 |
| (1,1791) | 1:A:47:ASN:HB2 | 1:A:48:PRO:HD2 | 5 | 0.63 |
| (1,1791) | 1:A:47:ASN:HB2 | 1:A:48:PRO:HD2 | 10 | 0.63 |
| (1,1791) | 1:A:47:ASN:HB2 | 1:A:48:PRO:HD2 | 17 | 0.63 |
| (1,1763) | 1:A:58:LYS:HG3 | 1:A:58:LYS:H | 16 | 0.63 |
| (1,1763) | 1:A:58:LYS:HG3 | 1:A:58:LYS:H | 17 | 0.63 |
| (1,1763) | 1:A:58:LYS:HG3 | 1:A:58:LYS:H | 20 | 0.63 |
| (1,1733) | 1:A:99:PHE:HB2 | 1:A:100:VAL:HG13 | 5 | 0.63 |
| (1,1733) | 1:A:99:PHE:HB2 | 1:A:100:VAL:HG11 | 5 | 0.63 |
| (1,1733) | 1:A:99:PHE:HB2 | 1:A:100:VAL:HG12 | 5 | 0.63 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD11 | 1:A:36:ARG:HB2 | 11 | 0.63 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD13 | 1:A:36:ARG:HB2 | 11 | 0.63 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD12 | 1:A:36:ARG:HB2 | 11 | 0.63 |
| (1,1612) | 1:A:39:ALA:HA | 1:A:42:TYR:HB3 | 2 | 0.63 |
| (1,1135) | 1:A:92:GLU:HG3 | 1:A:92:GLU:HA | 3 | 0.63 |
| (1,838) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:58:LYS:HB2 | 9 | 0.62 |
| (1,838) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 9 | 0.62 |
| (1,644) | 1:A:84:LEU:H | 1:A:92:GLU:HG3 | 16 | 0.62 |
| (1,644) | 1:A:84:LEU:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 16 | 0.62 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:72:LYS:HB3 | 4 | 0.62 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:72:LYS:HD2 | 4 | 0.62 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:73:ARG:HB3 | 4 | 0.62 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:72:LYS:HB3 | 20 | 0.62 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:72:LYS:HD2 | 20 | 0.62 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:73:ARG:HB3 | 20 | 0.62 |
| (1,471) | 1:A:84:LEU:HB2 | 1:A:85:TYR:HA | 4 | 0.62 |
| (1,471) | 1:A:85:TYR:HA | 1:A:88:GLU:HG3 | 4 | 0.62 |
| (1,471) | 1:A:84:LEU:HB2 | 1:A:85:TYR:HA | 13 | 0.62 |
| (1,471) | 1:A:85:TYR:HA | 1:A:88:GLU:HG3 | 13 | 0.62 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:55:ASP:HB2 | 11 | 0.62 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:56:LYS:HE2 | 11 | 0.62 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:56:LYS:HE3 | 11 | 0.62 |
| (1,3052) | 1:A:56:LYS:H | 1:A:55:ASP:HB2 | 10 | 0.62 |
| (1,2971) | 1:A:65:ALA:H | 1:A:64:HIS:HB2 | 8 | 0.62 |
| (1,2611) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:67:LEU:HB3 | 17 | 0.62 |
| (1,2592) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HB3 | 14 | 0.62 |
| (1,2584) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:58:LYS:HA | 13 | 0.62 |
| (1,2551) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:7:ARG:HG2 | 9 | 0.62 |
| (1,2510) | 1:A:49:ASP:HB2 | 1:A:48:PRO:HB3 | 6 | 0.62 |
| (1,2392) | 1:A:85:TYR:HA | 1:A:88:GLU:HG3 | 13 | 0.62 |
| (1,221) | 1:A:34:SER:HB3 | 1:A:37:LYS:HE2 | 3 | 0.62 |
| (1,221) | 1:A:34:SER:HB3 | 1:A:37:LYS:HE3 | 3 | 0.62 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB2 | 1:A:47:ASN:HB3 | 12 | 0.62 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB1 | 1:A:47:ASN:HB3 | 12 | 0.62 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB3 | 1:A:47:ASN:HB3 | 12 | 0.62 |
| (1,1843) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:51:PRO:HD2 | 16 | 0.62 |
| (1,1790) | 1:A:48:PRO:HB3 | 1:A:49:ASP:HB3 | 11 | 0.62 |
| (1,1763) | 1:A:58:LYS:HG3 | 1:A:58:LYS:H | 1 | 0.62 |
| (1,1763) | 1:A:58:LYS:HG3 | 1:A:58:LYS:H | 5 | 0.62 |
| (1,1763) | 1:A:58:LYS:HG3 | 1:A:58:LYS:H | 18 | 0.62 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD11 | 1:A:36:ARG:HB2 | 14 | 0.62 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD13 | 1:A:36:ARG:HB2 | 14 | 0.62 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD12 | 1:A:36:ARG:HB2 | 14 | 0.62 |
| (1,163) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HB2 | 8 | 0.62 |
| (1,163) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HB3 | 8 | 0.62 |
| (1,1411) | 1:A:23:ASP:HB2 | 1:A:24:LYS:HG3 | 2 | 0.62 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD11 | 1:A:62:ASN:HB2 | 14 | 0.62 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD13 | 1:A:62:ASN:HB2 | 14 | 0.62 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD12 | 1:A:62:ASN:HB2 | 14 | 0.62 |
| (1,1135) | 1:A:92:GLU:HG3 | 1:A:92:GLU:HA | 20 | 0.62 |
| (1,1076) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:33:LYS:HB3 | 16 | 0.62 |
| (1,986) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:43:HIS:HD2 | 6 | 0.61 |
| (1,986) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:43:HIS:HD2 | 8 | 0.61 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,986) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:43:HIS:HD2 | 13 | 0.61 |
| (1,982) | 1:A:5:ARG:HD3 | 1:A:5:ARG:HA | 14 | 0.61 |
| (1,977) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 11 | 0.61 |
| (1,880) | 1:A:41:LYS:HA | 1:A:41:LYS:HG2 | 2 | 0.61 |
| (1,880) | 1:A:41:LYS:HA | 1:A:41:LYS:HG2 | 3 | 0.61 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:72:LYS:HB3 | 3 | 0.61 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:72:LYS:HD2 | 3 | 0.61 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:73:ARG:HB3 | 3 | 0.61 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:69:ASP:HB2 | 20 | 0.61 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:69:ASP:HB2 | 20 | 0.61 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:69:ASP:HB2 | 20 | 0.61 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:73:ARG:HD3 | 20 | 0.61 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:73:ARG:HD3 | 20 | 0.61 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:73:ARG:HD3 | 20 | 0.61 |
| (1,2971) | 1:A:65:ALA:H | 1:A:64:HIS:HB2 | 12 | 0.61 |
| (1,2803) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 10 | 0.61 |
| (1,2611) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:67:LEU:HB3 | 2 | 0.61 |
| (1,2611) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:67:LEU:HB3 | 7 | 0.61 |
| (1,2611) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:67:LEU:HB3 | 9 | 0.61 |
| (1,2611) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:67:LEU:HB3 | 16 | 0.61 |
| (1,2592) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HB3 | 13 | 0.61 |
| (1,2510) | 1:A:49:ASP:HB2 | 1:A:48:PRO:HB3 | 16 | 0.61 |
| (1,2478) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:62:ASN:HA | 19 | 0.61 |
| (1,2413) | 1:A:91:GLY:HA2 | 1:A:94:ASN:HD22 | 3 | 0.61 |
| (1,2356) | 1:A:86:VAL:HA | 1:A:89:GLN:HG2 | 20 | 0.61 |
| (1,1978) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:56:LYS:HB2 | 5 | 0.61 |
| (1,1843) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:51:PRO:HD2 | 13 | 0.61 |
| (1,1790) | 1:A:48:PRO:HB3 | 1:A:49:ASP:HB3 | 6 | 0.61 |
| (1,1763) | 1:A:58:LYS:HG3 | 1:A:58:LYS:H | 14 | 0.61 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD11 | 1:A:36:ARG:HB2 | 4 | 0.61 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD13 | 1:A:36:ARG:HB2 | 4 | 0.61 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD12 | 1:A:36:ARG:HB2 | 4 | 0.61 |
| (1,163) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HB2 | 20 | 0.61 |
| (1,163) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HB3 | 20 | 0.61 |
| (1,986) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:43:HIS:HD2 | 10 | 0.6 |
| (1,977) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 1 | 0.6 |
| (1,977) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 3 | 0.6 |
| (1,977) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 9 | 0.6 |
| (1,977) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 12 | 0.6 |
| (1,977) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 17 | 0.6 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:72:LYS:HB3 | 2 | 0.6 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:72:LYS:HD2 | 2 | 0.6 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:73:ARG:HB3 | 2 | 0.6 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:72:LYS:HB3 | 11 | 0.6 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:72:LYS:HD2 | 11 | 0.6 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:73:ARG:HB3 | 11 | 0.6 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:72:LYS:HB3 | 19 | 0.6 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:72:LYS:HD2 | 19 | 0.6 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:73:ARG:HB3 | 19 | 0.6 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG22 | 7 | 0.6 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG21 | 7 | 0.6 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG23 | 7 | 0.6 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:78:LYS:HG2 | 7 | 0.6 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:78:LYS:HG2 | 7 | 0.6 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD13 | 7 | 0.6 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD11 | 7 | 0.6 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD12 | 7 | 0.6 |
| (1,3001) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:45:ASP:HB2 | 6 | 0.6 |
| (1,3001) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:45:ASP:HB2 | 7 | 0.6 |
| (1,3001) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:45:ASP:HB2 | 9 | 0.6 |
| (1,2971) | 1:A:65:ALA:H | 1:A:64:HIS:HB2 | 5 | 0.6 |
| (1,2971) | 1:A:65:ALA:H | 1:A:64:HIS:HB2 | 14 | 0.6 |
| (1,2814) | 1:A:89:GLN:H | 1:A:88:GLU:HG3 | 4 | 0.6 |
| (1,2803) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 15 | 0.6 |
| (1,2756) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:25:ASN:HD22 | 10 | 0.6 |
| (1,2611) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:67:LEU:HB3 | 8 | 0.6 |
| (1,2611) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:67:LEU:HB3 | 19 | 0.6 |
| (1,2592) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HB3 | 18 | 0.6 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB2 | 2 | 0.6 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB1 | 2 | 0.6 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB3 | 2 | 0.6 |
| (1,1843) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:51:PRO:HD2 | 1 | 0.6 |
| (1,1843) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:51:PRO:HD2 | 11 | 0.6 |
| (1,1841) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 19 | 0.6 |
| (1,1790) | 1:A:48:PRO:HB3 | 1:A:49:ASP:HB3 | 18 | 0.6 |
| (1,1612) | 1:A:39:ALA:HA | 1:A:42:TYR:HB3 | 5 | 0.6 |
| (1,1411) | 1:A:23:ASP:HB2 | 1:A:24:LYS:HG3 | 20 | 0.6 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD11 | 1:A:62:ASN:HB2 | 17 | 0.6 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD13 | 1:A:62:ASN:HB2 | 17 | 0.6 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD12 | 1:A:62:ASN:HB2 | 17 | 0.6 |
| (1,997) | 1:A:6:GLN:HG2 | 1:A:6:GLN:H | 1 | 0.59 |
| (1,986) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:43:HIS:HD2 | 15 | 0.59 |
| (1,978) | 1:A:50:ASN:HD22 | 1:A:52:GLU:HB3 | 14 | 0.59 |
| (1,977) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 2 | 0.59 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,977) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 5 | 0.59 |
| (1,977) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 6 | 0.59 |
| (1,977) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 7 | 0.59 |
| (1,977) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 13 | 0.59 |
| (1,977) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 14 | 0.59 |
| (1,977) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 18 | 0.59 |
| (1,977) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 20 | 0.59 |
| (1,888) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:81:SER:HB3 | 15 | 0.59 |
| (1,888) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:81:SER:HB3 | 15 | 0.59 |
| (1,888) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:81:SER:HB3 | 15 | 0.59 |
| (1,882) | 1:A:41:LYS:HE2 | 1:A:41:LYS:HG3 | 4 | 0.59 |
| (1,838) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:58:LYS:HB2 | 18 | 0.59 |
| (1,838) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 18 | 0.59 |
| (1,55) | 1:A:5:ARG:HD2 | 1:A:5:ARG:HB2 | 1 | 0.59 |
| (1,55) | 1:A:5:ARG:HD3 | 1:A:5:ARG:HB2 | 1 | 0.59 |
| (1,55) | 1:A:7:ARG:HD3 | 1:A:7:ARG:HB3 | 1 | 0.59 |
| (1,55) | 1:A:7:ARG:HD2 | 1:A:7:ARG:HB3 | 1 | 0.59 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG22 | 2 | 0.59 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG21 | 2 | 0.59 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HG23 | 2 | 0.59 |
| (1,427) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:78:LYS:HG2 | 2 | 0.59 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:78:LYS:HG2 | 2 | 0.59 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD13 | 2 | 0.59 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD11 | 2 | 0.59 |
| (1,427) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:84:LEU:HD12 | 2 | 0.59 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:69:ASP:HB2 | 18 | 0.59 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:69:ASP:HB2 | 18 | 0.59 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:69:ASP:HB2 | 18 | 0.59 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:73:ARG:HD3 | 18 | 0.59 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:73:ARG:HD3 | 18 | 0.59 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:73:ARG:HD3 | 18 | 0.59 |
| (1,3052) | 1:A:56:LYS:H | 1:A:55:ASP:HB2 | 3 | 0.59 |
| (1,3001) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:45:ASP:HB2 | 10 | 0.59 |
| (1,3001) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:45:ASP:HB2 | 12 | 0.59 |
| (1,2971) | 1:A:65:ALA:H | 1:A:64:HIS:HB2 | 17 | 0.59 |
| (1,2803) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 12 | 0.59 |
| (1,2756) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:25:ASN:HD22 | 14 | 0.59 |
| (1,2611) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:67:LEU:HB3 | 13 | 0.59 |
| (1,2592) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HB3 | 5 | 0.59 |
| (1,2592) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HB3 | 20 | 0.59 |
| (1,2585) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:62:ASN:H | 11 | 0.59 |
| (1,2510) | 1:A:49:ASP:HB2 | 1:A:48:PRO:HB3 | 8 | 0.59 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2510) | 1:A:49:ASP:HB2 | 1:A:48:PRO:HB3 | 15 | 0.59 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB2 | 6 | 0.59 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB1 | 6 | 0.59 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB3 | 6 | 0.59 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB2 | 16 | 0.59 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB1 | 16 | 0.59 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB3 | 16 | 0.59 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB2 | 1:A:47:ASN:HB3 | 4 | 0.59 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB1 | 1:A:47:ASN:HB3 | 4 | 0.59 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB3 | 1:A:47:ASN:HB3 | 4 | 0.59 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB2 | 1:A:47:ASN:HB3 | 9 | 0.59 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB1 | 1:A:47:ASN:HB3 | 9 | 0.59 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB3 | 1:A:47:ASN:HB3 | 9 | 0.59 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB2 | 1:A:47:ASN:HB3 | 18 | 0.59 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB1 | 1:A:47:ASN:HB3 | 18 | 0.59 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB3 | 1:A:47:ASN:HB3 | 18 | 0.59 |
| (1,1843) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:51:PRO:HD2 | 2 | 0.59 |
| (1,1843) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:51:PRO:HD2 | 4 | 0.59 |
| (1,1843) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:51:PRO:HD2 | 5 | 0.59 |
| (1,1843) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:51:PRO:HD2 | 7 | 0.59 |
| (1,1841) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 5 | 0.59 |
| (1,1841) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 16 | 0.59 |
| (1,1790) | 1:A:48:PRO:HB3 | 1:A:49:ASP:HB3 | 5 | 0.59 |
| (1,1763) | 1:A:58:LYS:HG3 | 1:A:58:LYS:H | 12 | 0.59 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD11 | 1:A:36:ARG:HB2 | 5 | 0.59 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD13 | 1:A:36:ARG:HB2 | 5 | 0.59 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD12 | 1:A:36:ARG:HB2 | 5 | 0.59 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD11 | 1:A:36:ARG:HB2 | 6 | 0.59 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD13 | 1:A:36:ARG:HB2 | 6 | 0.59 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD12 | 1:A:36:ARG:HB2 | 6 | 0.59 |
| (1,1475) | 1:A:31:ILE:HA | 1:A:31:ILE:HD13 | 14 | 0.59 |
| (1,1475) | 1:A:31:ILE:HA | 1:A:31:ILE:HD11 | 14 | 0.59 |
| (1,1475) | 1:A:31:ILE:HA | 1:A:31:ILE:HD12 | 14 | 0.59 |
| (1,986) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:43:HIS:HD2 | 9 | 0.58 |
| (1,977) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 15 | 0.58 |
| (1,879) | 1:A:41:LYS:HD3 | 1:A:41:LYS:HA | 11 | 0.58 |
| (1,838) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:58:LYS:HB2 | 6 | 0.58 |
| (1,838) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 6 | 0.58 |
| (1,727) | 1:A:99:PHE:H | 1:A:95:VAL:HG21 | 7 | 0.58 |
| (1,727) | 1:A:99:PHE:H | 1:A:95:VAL:HG22 | 7 | 0.58 |
| (1,727) | 1:A:99:PHE:H | 1:A:95:VAL:HG23 | 7 | 0.58 |
| (1,727) | 1:A:99:PHE:H | 1:A:100:VAL:HG13 | 7 | 0.58 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,727) | 1:A:99:PHE:H | 1:A:100:VAL:HG11 | 7 | 0.58 |
| (1,727) | 1:A:99:PHE:H | 1:A:100:VAL:HG12 | 7 | 0.58 |
| (1,55) | 1:A:5:ARG:HD2 | 1:A:5:ARG:HB2 | 2 | 0.58 |
| (1,55) | 1:A:5:ARG:HD3 | 1:A:5:ARG:HB2 | 2 | 0.58 |
| (1,55) | 1:A:7:ARG:HD3 | 1:A:7:ARG:HB3 | 2 | 0.58 |
| (1,55) | 1:A:7:ARG:HD2 | 1:A:7:ARG:HB3 | 2 | 0.58 |
| (1,55) | 1:A:5:ARG:HD2 | 1:A:5:ARG:HB2 | 20 | 0.58 |
| (1,55) | 1:A:5:ARG:HD3 | 1:A:5:ARG:HB2 | 20 | 0.58 |
| (1,55) | 1:A:7:ARG:HD3 | 1:A:7:ARG:HB3 | 20 | 0.58 |
| (1,55) | 1:A:7:ARG:HD2 | 1:A:7:ARG:HB3 | 20 | 0.58 |
| (1,3052) | 1:A:56:LYS:H | 1:A:55:ASP:HB2 | 6 | 0.58 |
| (1,3052) | 1:A:56:LYS:H | 1:A:55:ASP:HB2 | 12 | 0.58 |
| (1,3001) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:45:ASP:HB2 | 8 | 0.58 |
| (1,3001) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:45:ASP:HB2 | 16 | 0.58 |
| (1,2971) | 1:A:65:ALA:H | 1:A:64:HIS:HB2 | 2 | 0.58 |
| (1,2928) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HG3 | 5 | 0.58 |
| (1,2803) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 9 | 0.58 |
| (1,264) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:60:ILE:HA | 4 | 0.58 |
| (1,264) | 1:A:62:ASN:HB2 | 1:A:63:ALA:HA | 4 | 0.58 |
| (1,2536) | 1:A:99:PHE:HB3 | 1:A:96:ASN:HA | 11 | 0.58 |
| (1,2385) | 1:A:88:GLU:H | 1:A:88:GLU:HG3 | 13 | 0.58 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB2 | 4 | 0.58 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB1 | 4 | 0.58 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB3 | 4 | 0.58 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB2 | 13 | 0.58 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB1 | 13 | 0.58 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB3 | 13 | 0.58 |
| (1,1843) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:51:PRO:HD2 | 8 | 0.58 |
| (1,1843) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:51:PRO:HD2 | 10 | 0.58 |
| (1,1843) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:51:PRO:HD2 | 12 | 0.58 |
| (1,1843) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:51:PRO:HD2 | 14 | 0.58 |
| (1,1843) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:51:PRO:HD2 | 15 | 0.58 |
| (1,1843) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:51:PRO:HD2 | 18 | 0.58 |
| (1,1841) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 9 | 0.58 |
| (1,1841) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 20 | 0.58 |
| (1,1790) | 1:A:48:PRO:HB3 | 1:A:49:ASP:HB3 | 15 | 0.58 |
| (1,1753) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:HB2 | 5 | 0.58 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD11 | 1:A:36:ARG:HB2 | 2 | 0.58 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD13 | 1:A:36:ARG:HB2 | 2 | 0.58 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD12 | 1:A:36:ARG:HB2 | 2 | 0.58 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD11 | 1:A:36:ARG:HB2 | 13 | 0.58 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD13 | 1:A:36:ARG:HB2 | 13 | 0.58 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD12 | 1:A:36:ARG:HB2 | 13 | 0.58 |
| (1,163) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HB2 | 9 | 0.58 |
| (1,163) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HB3 | 9 | 0.58 |
| (1,1612) | 1:A:39:ALA:HA | 1:A:42:TYR:HB3 | 6 | 0.58 |
| (1,1475) | 1:A:31:ILE:HA | 1:A:31:ILE:HD13 | 13 | 0.58 |
| (1,1475) | 1:A:31:ILE:HA | 1:A:31:ILE:HD11 | 13 | 0.58 |
| (1,1475) | 1:A:31:ILE:HA | 1:A:31:ILE:HD12 | 13 | 0.58 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD11 | 1:A:62:ASN:HB2 | 19 | 0.58 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD13 | 1:A:62:ASN:HB2 | 19 | 0.58 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD12 | 1:A:62:ASN:HB2 | 19 | 0.58 |
| (1,1135) | 1:A:92:GLU:HG3 | 1:A:92:GLU:HA | 12 | 0.58 |
| (1,986) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:43:HIS:HD2 | 5 | 0.57 |
| (1,986) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:43:HIS:HD2 | 12 | 0.57 |
| (1,978) | 1:A:50:ASN:HD22 | 1:A:52:GLU:HB3 | 2 | 0.57 |
| (1,978) | 1:A:50:ASN:HD22 | 1:A:52:GLU:HB3 | 20 | 0.57 |
| (1,838) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:58:LYS:HB2 | 2 | 0.57 |
| (1,838) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 2 | 0.57 |
| (1,838) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:58:LYS:HB2 | 8 | 0.57 |
| (1,838) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 8 | 0.57 |
| (1,838) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:58:LYS:HB2 | 19 | 0.57 |
| (1,838) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 19 | 0.57 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:72:LYS:HB3 | 6 | 0.57 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:72:LYS:HD2 | 6 | 0.57 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:73:ARG:HB3 | 6 | 0.57 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:55:ASP:HB2 | 1 | 0.57 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:56:LYS:HE2 | 1 | 0.57 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:56:LYS:HE3 | 1 | 0.57 |
| (1,3052) | 1:A:56:LYS:H | 1:A:55:ASP:HB2 | 16 | 0.57 |
| (1,2858) | 1:A:53:ALA:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 19 | 0.57 |
| (1,2803) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 11 | 0.57 |
| (1,2803) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 17 | 0.57 |
| (1,2756) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:25:ASN:HD22 | 2 | 0.57 |
| (1,2733) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 7 | 0.57 |
| (1,2611) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:67:LEU:HB3 | 15 | 0.57 |
| (1,2611) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:67:LEU:HB3 | 20 | 0.57 |
| (1,2405) | 1:A:90:PHE:H | 1:A:89:GLN:HG3 | 17 | 0.57 |
| (1,1978) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:56:LYS:HB2 | 2 | 0.57 |
| (1,1843) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:51:PRO:HD2 | 3 | 0.57 |
| (1,1843) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:51:PRO:HD2 | 9 | 0.57 |
| (1,1843) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:51:PRO:HD2 | 17 | 0.57 |
| (1,1843) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:51:PRO:HD2 | 19 | 0.57 |
| (1,1841) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 1 | 0.57 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1841) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 2 | 0.57 |
| (1,1841) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 8 | 0.57 |
| (1,1841) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 11 | 0.57 |
| (1,1841) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 13 | 0.57 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD11 | 1:A:36:ARG:HB2 | 17 | 0.57 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD13 | 1:A:36:ARG:HB2 | 17 | 0.57 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD12 | 1:A:36:ARG:HB2 | 17 | 0.57 |
| (1,1612) | 1:A:39:ALA:HA | 1:A:42:TYR:HB3 | 12 | 0.57 |
| (1,1605) | 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:38:LEU:HD11 | 4 | 0.57 |
| (1,1605) | 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:38:LEU:HD12 | 4 | 0.57 |
| (1,1605) | 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:38:LEU:HD13 | 4 | 0.57 |
| (1,1605) | 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:38:LEU:HD11 | 9 | 0.57 |
| (1,1605) | 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:38:LEU:HD12 | 9 | 0.57 |
| (1,1605) | 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:38:LEU:HD13 | 9 | 0.57 |
| (1,1605) | 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:38:LEU:HD11 | 10 | 0.57 |
| (1,1605) | 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:38:LEU:HD12 | 10 | 0.57 |
| (1,1605) | 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:38:LEU:HD13 | 10 | 0.57 |
| (1,1605) | 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:38:LEU:HD11 | 15 | 0.57 |
| (1,1605) | 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:38:LEU:HD12 | 15 | 0.57 |
| (1,1605) | 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:38:LEU:HD13 | 15 | 0.57 |
| (1,1605) | 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:38:LEU:HD11 | 17 | 0.57 |
| (1,1605) | 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:38:LEU:HD12 | 17 | 0.57 |
| (1,1605) | 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:38:LEU:HD13 | 17 | 0.57 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG21 | 1:A:59:GLU:HG2 | 18 | 0.57 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG22 | 1:A:59:GLU:HG2 | 18 | 0.57 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG23 | 1:A:59:GLU:HG2 | 18 | 0.57 |
| (1,1135) | 1:A:92:GLU:HG3 | 1:A:92:GLU:HA | 2 | 0.57 |
| (1,982) | 1:A:5:ARG:HD3 | 1:A:5:ARG:HA | 17 | 0.56 |
| (1,978) | 1:A:50:ASN:HD22 | 1:A:52:GLU:HB3 | 13 | 0.56 |
| (1,977) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 4 | 0.56 |
| (1,965) | 1:A:94:ASN:HD21 | 1:A:90:PHE:HB2 | 10 | 0.56 |
| (1,882) | 1:A:41:LYS:HE2 | 1:A:41:LYS:HG3 | 1 | 0.56 |
| (1,882) | 1:A:41:LYS:HE2 | 1:A:41:LYS:HG3 | 20 | 0.56 |
| (1,774) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:41:LYS:HB2 | 19 | 0.56 |
| (1,774) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:41:LYS:HD2 | 19 | 0.56 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:72:LYS:HB3 | 17 | 0.56 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:72:LYS:HD2 | 17 | 0.56 |
| (1,588) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:73:ARG:HB3 | 17 | 0.56 |
| (1,3052) | 1:A:56:LYS:H | 1:A:55:ASP:HB2 | 15 | 0.56 |
| (1,3052) | 1:A:56:LYS:H | 1:A:55:ASP:HB2 | 19 | 0.56 |
| (1,3001) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:45:ASP:HB2 | 14 | 0.56 |
| (1,2971) | 1:A:65:ALA:H | 1:A:64:HIS:HB2 | 20 | 0.56 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2803) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 4 | 0.56 |
| (1,2803) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 14 | 0.56 |
| (1,2733) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 20 | 0.56 |
| (1,2638) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 20 | 0.56 |
| (1,2611) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:67:LEU:HB3 | 1 | 0.56 |
| (1,2611) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:67:LEU:HB3 | 5 | 0.56 |
| (1,2611) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:67:LEU:HB3 | 11 | 0.56 |
| (1,2584) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:58:LYS:HA | 6 | 0.56 |
| (1,2550) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:6:GLN:HB2 | 6 | 0.56 |
| (1,2536) | 1:A:99:PHE:HB3 | 1:A:96:ASN:HA | 6 | 0.56 |
| (1,2510) | 1:A:49:ASP:HB2 | 1:A:48:PRO:HB3 | 5 | 0.56 |
| (1,2356) | 1:A:86:VAL:HA | 1:A:89:GLN:HG2 | 12 | 0.56 |
| (1,1916) | 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HG3 | 15 | 0.56 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB2 | 17 | 0.56 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB1 | 17 | 0.56 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB3 | 17 | 0.56 |
| (1,1841) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 18 | 0.56 |
| (1,1612) | 1:A:39:ALA:HA | 1:A:42:TYR:HB3 | 9 | 0.56 |
| (1,1612) | 1:A:39:ALA:HA | 1:A:42:TYR:HB3 | 10 | 0.56 |
| (1,1605) | 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:38:LEU:HD11 | 11 | 0.56 |
| (1,1605) | 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:38:LEU:HD12 | 11 | 0.56 |
| (1,1605) | 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:38:LEU:HD13 | 11 | 0.56 |
| (1,1605) | 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:38:LEU:HD11 | 12 | 0.56 |
| (1,1605) | 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:38:LEU:HD12 | 12 | 0.56 |
| (1,1605) | 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:38:LEU:HD13 | 12 | 0.56 |
| (1,1605) | 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:38:LEU:HD11 | 14 | 0.56 |
| (1,1605) | 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:38:LEU:HD12 | 14 | 0.56 |
| (1,1605) | 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:38:LEU:HD13 | 14 | 0.56 |
| (1,1475) | 1:A:31:ILE:HA | 1:A:31:ILE:HD13 | 5 | 0.56 |
| (1,1475) | 1:A:31:ILE:HA | 1:A:31:ILE:HD11 | 5 | 0.56 |
| (1,1475) | 1:A:31:ILE:HA | 1:A:31:ILE:HD12 | 5 | 0.56 |
| (1,1135) | 1:A:92:GLU:HG3 | 1:A:92:GLU:HA | 4 | 0.56 |
| (1,1135) | 1:A:92:GLU:HG3 | 1:A:92:GLU:HA | 19 | 0.56 |
| (1,1134) | 1:A:12:SER:HB2 | 1:A:14:GLU:HG3 | 2 | 0.56 |
| (1,1076) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:33:LYS:HB3 | 1 | 0.56 |
| (1,999) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:7:ARG:HB2 | 16 | 0.55 |
| (1,978) | 1:A:50:ASN:HD22 | 1:A:52:GLU:HB3 | 7 | 0.55 |
| (1,912) | 1:A:46:LYS:HB3 | 1:A:43:HIS:HB3 | 15 | 0.55 |
| (1,882) | 1:A:41:LYS:HE2 | 1:A:41:LYS:HG3 | 7 | 0.55 |
| (1,882) | 1:A:41:LYS:HE2 | 1:A:41:LYS:HG3 | 13 | 0.55 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:69:ASP:HB2 | 7 | 0.55 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:69:ASP:HB2 | 7 | 0.55 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:69:ASP:HB2 | 7 | 0.55 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:73:ARG:HD3 | 7 | 0.55 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:73:ARG:HD3 | 7 | 0.55 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:73:ARG:HD3 | 7 | 0.55 |
| (1,3052) | 1:A:56:LYS:H | 1:A:55:ASP:HB2 | 4 | 0.55 |
| (1,3052) | 1:A:56:LYS:H | 1:A:55:ASP:HB2 | 7 | 0.55 |
| (1,3001) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:45:ASP:HB2 | 13 | 0.55 |
| (1,3001) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:45:ASP:HB2 | 18 | 0.55 |
| (1,2912) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:62:ASN:HB2 | 15 | 0.55 |
| (1,2642) | 1:A:8:SER:H | 1:A:8:SER:HB3 | 8 | 0.55 |
| (1,2642) | 1:A:8:SER:H | 1:A:8:SER:HB3 | 16 | 0.55 |
| (1,2642) | 1:A:8:SER:H | 1:A:8:SER:HB3 | 17 | 0.55 |
| (1,2584) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:58:LYS:HA | 15 | 0.55 |
| (1,2536) | 1:A:99:PHE:HB3 | 1:A:96:ASN:HA | 5 | 0.55 |
| (1,2536) | 1:A:99:PHE:HB3 | 1:A:96:ASN:HA | 12 | 0.55 |
| (1,2356) | 1:A:86:VAL:HA | 1:A:89:GLN:HG2 | 14 | 0.55 |
| (1,2356) | 1:A:86:VAL:HA | 1:A:89:GLN:HG2 | 15 | 0.55 |
| (1,221) | 1:A:34:SER:HB3 | 1:A:37:LYS:HE2 | 9 | 0.55 |
| (1,221) | 1:A:34:SER:HB3 | 1:A:37:LYS:HE3 | 9 | 0.55 |
| (1,1931) | 1:A:56:LYS:HB3 | 1:A:53:ALA:HA | 3 | 0.55 |
| (1,1841) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 3 | 0.55 |
| (1,1841) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 14 | 0.55 |
| (1,1841) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 17 | 0.55 |
| (1,163) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HB2 | 16 | 0.55 |
| (1,163) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HB3 | 16 | 0.55 |
| (1,1605) | 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:38:LEU:HD11 | 13 | 0.55 |
| (1,1605) | 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:38:LEU:HD12 | 13 | 0.55 |
| (1,1605) | 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:38:LEU:HD13 | 13 | 0.55 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD11 | 1:A:62:ASN:HB2 | 11 | 0.55 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD13 | 1:A:62:ASN:HB2 | 11 | 0.55 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD12 | 1:A:62:ASN:HB2 | 11 | 0.55 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD11 | 1:A:62:ASN:HB2 | 12 | 0.55 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD13 | 1:A:62:ASN:HB2 | 12 | 0.55 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD12 | 1:A:62:ASN:HB2 | 12 | 0.55 |
| (1,1057) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:6:GLN:HG3 | 13 | 0.55 |
| (1,1057) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:6:GLN:HG3 | 13 | 0.55 |
| (1,1057) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:6:GLN:HG3 | 13 | 0.55 |
| (1,999) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:7:ARG:HB2 | 15 | 0.54 |
| (1,999) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:7:ARG:HB2 | 20 | 0.54 |
| (1,996) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:6:GLN:HG2 | 11 | 0.54 |
| (1,986) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:43:HIS:HD2 | 1 | 0.54 |
| (1,977) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 8 | 0.54 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,3052) | 1:A:56:LYS:H | 1:A:55:ASP:HB2 | 11 | 0.54 |
| (1,3052) | 1:A:56:LYS:H | 1:A:55:ASP:HB2 | 20 | 0.54 |
| (1,2642) | 1:A:8:SER:H | 1:A:8:SER:HB3 | 1 | 0.54 |
| (1,2642) | 1:A:8:SER:H | 1:A:8:SER:HB3 | 2 | 0.54 |
| (1,2642) | 1:A:8:SER:H | 1:A:8:SER:HB3 | 4 | 0.54 |
| (1,2642) | 1:A:8:SER:H | 1:A:8:SER:HB3 | 6 | 0.54 |
| (1,2611) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:67:LEU:HB3 | 10 | 0.54 |
| (1,2592) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HB3 | 7 | 0.54 |
| (1,2585) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:62:ASN:H | 1 | 0.54 |
| (1,2585) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:62:ASN:H | 6 | 0.54 |
| (1,2584) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:58:LYS:HA | 4 | 0.54 |
| (1,2510) | 1:A:49:ASP:HB2 | 1:A:48:PRO:HB3 | 9 | 0.54 |
| (1,2510) | 1:A:49:ASP:HB2 | 1:A:48:PRO:HB3 | 19 | 0.54 |
| (1,221) | 1:A:34:SER:HB3 | 1:A:37:LYS:HE2 | 5 | 0.54 |
| (1,221) | 1:A:34:SER:HB3 | 1:A:37:LYS:HE3 | 5 | 0.54 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB2 | 15 | 0.54 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB1 | 15 | 0.54 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB3 | 15 | 0.54 |
| (1,1841) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 15 | 0.54 |
| (1,1790) | 1:A:48:PRO:HB3 | 1:A:49:ASP:HB3 | 3 | 0.54 |
| (1,1790) | 1:A:48:PRO:HB3 | 1:A:49:ASP:HB3 | 20 | 0.54 |
| (1,1753) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:HB2 | 18 | 0.54 |
| (1,1733) | 1:A:99:PHE:HB2 | 1:A:100:VAL:HG13 | 6 | 0.54 |
| (1,1733) | 1:A:99:PHE:HB2 | 1:A:100:VAL:HG11 | 6 | 0.54 |
| (1,1733) | 1:A:99:PHE:HB2 | 1:A:100:VAL:HG12 | 6 | 0.54 |
| (1,1454) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:32:LYS:HG3 | 10 | 0.54 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG21 | 1:A:59:GLU:HG2 | 8 | 0.54 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG22 | 1:A:59:GLU:HG2 | 8 | 0.54 |
| (1,1292) | 1:A:19:VAL:HG23 | 1:A:59:GLU:HG2 | 8 | 0.54 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD11 | 1:A:62:ASN:HB2 | 16 | 0.54 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD13 | 1:A:62:ASN:HB2 | 16 | 0.54 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD12 | 1:A:62:ASN:HB2 | 16 | 0.54 |
| (1,1135) | 1:A:92:GLU:HG3 | 1:A:92:GLU:HA | 5 | 0.54 |
| (1,999) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:7:ARG:HB2 | 11 | 0.53 |
| (1,982) | 1:A:5:ARG:HD3 | 1:A:5:ARG:HA | 18 | 0.53 |
| (1,978) | 1:A:50:ASN:HD22 | 1:A:52:GLU:HB3 | 8 | 0.53 |
| (1,912) | 1:A:46:LYS:HB3 | 1:A:43:HIS:HB3 | 5 | 0.53 |
| (1,879) | 1:A:41:LYS:HD3 | 1:A:41:LYS:HA | 13 | 0.53 |
| (1,644) | 1:A:84:LEU:H | 1:A:92:GLU:HG3 | 11 | 0.53 |
| (1,644) | 1:A:84:LEU:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 11 | 0.53 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:69:ASP:HB2 | 11 | 0.53 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:69:ASP:HB2 | 11 | 0.53 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:69:ASP:HB2 | 11 | 0.53 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:73:ARG:HD3 | 11 | 0.53 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:73:ARG:HD3 | 11 | 0.53 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:73:ARG:HD3 | 11 | 0.53 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:69:ASP:HB2 | 16 | 0.53 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:69:ASP:HB2 | 16 | 0.53 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:69:ASP:HB2 | 16 | 0.53 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:73:ARG:HD3 | 16 | 0.53 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:73:ARG:HD3 | 16 | 0.53 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:73:ARG:HD3 | 16 | 0.53 |
| (1,3052) | 1:A:56:LYS:H | 1:A:55:ASP:HB2 | 2 | 0.53 |
| (1,3052) | 1:A:56:LYS:H | 1:A:55:ASP:HB2 | 8 | 0.53 |
| (1,3052) | 1:A:56:LYS:H | 1:A:55:ASP:HB2 | 18 | 0.53 |
| (1,3001) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:45:ASP:HB2 | 5 | 0.53 |
| (1,2971) | 1:A:65:ALA:H | 1:A:64:HIS:HB2 | 3 | 0.53 |
| (1,2971) | 1:A:65:ALA:H | 1:A:64:HIS:HB2 | 11 | 0.53 |
| (1,2947) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:44:PRO:HB2 | 6 | 0.53 |
| (1,2928) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HG3 | 11 | 0.53 |
| (1,2928) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HG3 | 12 | 0.53 |
| (1,2928) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HG3 | 14 | 0.53 |
| (1,2638) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 4 | 0.53 |
| (1,2638) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 19 | 0.53 |
| (1,2611) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:67:LEU:HB3 | 4 | 0.53 |
| (1,2585) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:62:ASN:H | 10 | 0.53 |
| (1,2510) | 1:A:49:ASP:HB2 | 1:A:48:PRO:HB3 | 4 | 0.53 |
| (1,2510) | 1:A:49:ASP:HB2 | 1:A:48:PRO:HB3 | 7 | 0.53 |
| (1,1841) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 6 | 0.53 |
| (1,1841) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 7 | 0.53 |
| (1,1733) | 1:A:99:PHE:HB2 | 1:A:100:VAL:HG13 | 11 | 0.53 |
| (1,1733) | 1:A:99:PHE:HB2 | 1:A:100:VAL:HG11 | 11 | 0.53 |
| (1,1733) | 1:A:99:PHE:HB2 | 1:A:100:VAL:HG12 | 11 | 0.53 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD11 | 1:A:36:ARG:HB2 | 3 | 0.53 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD13 | 1:A:36:ARG:HB2 | 3 | 0.53 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD12 | 1:A:36:ARG:HB2 | 3 | 0.53 |
| (1,1612) | 1:A:39:ALA:HA | 1:A:42:TYR:HB3 | 13 | 0.53 |
| (1,1605) | 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:38:LEU:HD11 | 5 | 0.53 |
| (1,1605) | 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:38:LEU:HD12 | 5 | 0.53 |
| (1,1605) | 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:38:LEU:HD13 | 5 | 0.53 |
| (1,1605) | 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:38:LEU:HD11 | 6 | 0.53 |
| (1,1605) | 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:38:LEU:HD12 | 6 | 0.53 |
| (1,1605) | 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:38:LEU:HD13 | 6 | 0.53 |
| (1,1113) | 1:A:12:SER:HB3 | 1:A:14:GLU:HG3 | 19 | 0.53 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,982) | 1:A:5:ARG:HD3 | 1:A:5:ARG:HA | 19 | 0.52 |
| (1,978) | 1:A:50:ASN:HD22 | 1:A:52:GLU:HB3 | 6 | 0.52 |
| (1,978) | 1:A:50:ASN:HD22 | 1:A:52:GLU:HB3 | 9 | 0.52 |
| (1,866) | 1:A:6:GLN:HG3 | 1:A:6:GLN:HE21 | 11 | 0.52 |
| (1,765) | 1:A:88:GLU:H | 1:A:88:GLU:HB2 | 4 | 0.52 |
| (1,765) | 1:A:88:GLU:H | 1:A:88:GLU:HG3 | 4 | 0.52 |
| (1,3001) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:45:ASP:HB2 | 15 | 0.52 |
| (1,2971) | 1:A:65:ALA:H | 1:A:64:HIS:HB2 | 7 | 0.52 |
| (1,2971) | 1:A:65:ALA:H | 1:A:64:HIS:HB2 | 19 | 0.52 |
| (1,2928) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HG3 | 6 | 0.52 |
| (1,2912) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:62:ASN:HB2 | 5 | 0.52 |
| (1,2733) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 12 | 0.52 |
| (1,2701) | 1:A:94:ASN:HD22 | 1:A:94:ASN:HB3 | 13 | 0.52 |
| (1,2701) | 1:A:94:ASN:HD22 | 1:A:94:ASN:HB3 | 19 | 0.52 |
| (1,2701) | 1:A:94:ASN:HD22 | 1:A:94:ASN:HB3 | 20 | 0.52 |
| (1,2664) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:34:SER:HB2 | 14 | 0.52 |
| (1,2611) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:67:LEU:HB3 | 3 | 0.52 |
| (1,2550) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:6:GLN:HB2 | 2 | 0.52 |
| (1,2536) | 1:A:99:PHE:HB3 | 1:A:96:ASN:HA | 3 | 0.52 |
| (1,2536) | 1:A:99:PHE:HB3 | 1:A:96:ASN:HA | 14 | 0.52 |
| (1,2510) | 1:A:49:ASP:HB2 | 1:A:48:PRO:HB3 | 1 | 0.52 |
| (1,221) | 1:A:34:SER:HB3 | 1:A:37:LYS:HE2 | 13 | 0.52 |
| (1,221) | 1:A:34:SER:HB3 | 1:A:37:LYS:HE3 | 13 | 0.52 |
| (1,1978) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:56:LYS:HB2 | 13 | 0.52 |
| (1,1841) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 12 | 0.52 |
| (1,1790) | 1:A:48:PRO:HB3 | 1:A:49:ASP:HB3 | 19 | 0.52 |
| (1,1753) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:HB2 | 1 | 0.52 |
| (1,163) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HB2 | 5 | 0.52 |
| (1,163) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HB3 | 5 | 0.52 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD11 | 1:A:62:ASN:HB2 | 9 | 0.52 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD13 | 1:A:62:ASN:HB2 | 9 | 0.52 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD12 | 1:A:62:ASN:HB2 | 9 | 0.52 |
| (1,1134) | 1:A:12:SER:HB2 | 1:A:14:GLU:HG3 | 20 | 0.52 |
| (1,1113) | 1:A:12:SER:HB3 | 1:A:14:GLU:HG3 | 7 | 0.52 |
| (1,999) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:7:ARG:HB2 | 1 | 0.51 |
| (1,978) | 1:A:50:ASN:HD22 | 1:A:52:GLU:HB3 | 3 | 0.51 |
| (1,881) | 1:A:78:LYS:HE3 | 1:A:78:LYS:HG3 | 17 | 0.51 |
| (1,879) | 1:A:41:LYS:HD3 | 1:A:41:LYS:HA | 1 | 0.51 |
| (1,879) | 1:A:41:LYS:HD3 | 1:A:41:LYS:HA | 20 | 0.51 |
| (1,838) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:58:LYS:HB2 | 16 | 0.51 |
| (1,838) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 16 | 0.51 |
| (1,3052) | 1:A:56:LYS:H | 1:A:55:ASP:HB2 | 17 | 0.51 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2756) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:25:ASN:HD22 | 4 | 0.51 |
| (1,2701) | 1:A:94:ASN:HD22 | 1:A:94:ASN:HB3 | 9 | 0.51 |
| (1,2701) | 1:A:94:ASN:HD22 | 1:A:94:ASN:HB3 | 14 | 0.51 |
| (1,2664) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:34:SER:HB2 | 2 | 0.51 |
| (1,2664) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:34:SER:HB2 | 11 | 0.51 |
| (1,2664) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:34:SER:HB2 | 17 | 0.51 |
| (1,2638) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 7 | 0.51 |
| (1,2611) | 1:A:69:ASP:H | 1:A:67:LEU:HB3 | 18 | 0.51 |
| (1,2585) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:62:ASN:H | 13 | 0.51 |
| (1,2536) | 1:A:99:PHE:HB3 | 1:A:96:ASN:HA | 1 | 0.51 |
| (1,2536) | 1:A:99:PHE:HB3 | 1:A:96:ASN:HA | 10 | 0.51 |
| (1,2510) | 1:A:49:ASP:HB2 | 1:A:48:PRO:HB3 | 3 | 0.51 |
| (1,2510) | 1:A:49:ASP:HB2 | 1:A:48:PRO:HB3 | 11 | 0.51 |
| (1,2356) | 1:A:86:VAL:HA | 1:A:89:GLN:HG2 | 1 | 0.51 |
| (1,2356) | 1:A:86:VAL:HA | 1:A:89:GLN:HG2 | 16 | 0.51 |
| (1,1978) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:56:LYS:HB2 | 3 | 0.51 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB2 | 5 | 0.51 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB1 | 5 | 0.51 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB3 | 5 | 0.51 |
| (1,1790) | 1:A:48:PRO:HB3 | 1:A:49:ASP:HB3 | 13 | 0.51 |
| (1,1753) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:HB2 | 4 | 0.51 |
| (1,1612) | 1:A:39:ALA:HA | 1:A:42:TYR:HB3 | 8 | 0.51 |
| (1,1075) | 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HB2 | 13 | 0.51 |
| (1,999) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:7:ARG:HB2 | 12 | 0.5 |
| (1,978) | 1:A:50:ASN:HD22 | 1:A:52:GLU:HB3 | 5 | 0.5 |
| (1,978) | 1:A:50:ASN:HD22 | 1:A:52:GLU:HB3 | 15 | 0.5 |
| (1,978) | 1:A:50:ASN:HD22 | 1:A:52:GLU:HB3 | 19 | 0.5 |
| (1,879) | 1:A:41:LYS:HD3 | 1:A:41:LYS:HA | 7 | 0.5 |
| (1,3052) | 1:A:56:LYS:H | 1:A:55:ASP:HB2 | 13 | 0.5 |
| (1,3052) | 1:A:56:LYS:H | 1:A:55:ASP:HB2 | 14 | 0.5 |
| (1,2912) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:62:ASN:HB2 | 1 | 0.5 |
| (1,2912) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:62:ASN:HB2 | 2 | 0.5 |
| (1,2912) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:62:ASN:HB2 | 11 | 0.5 |
| (1,2803) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 13 | 0.5 |
| (1,2664) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:34:SER:HB2 | 4 | 0.5 |
| (1,2664) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:34:SER:HB2 | 8 | 0.5 |
| (1,2664) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:34:SER:HB2 | 9 | 0.5 |
| (1,2664) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:34:SER:HB2 | 12 | 0.5 |
| (1,2638) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 18 | 0.5 |
| (1,2584) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:58:LYS:HA | 12 | 0.5 |
| (1,2551) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:7:ARG:HG2 | 2 | 0.5 |
| (1,2550) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:6:GLN:HB2 | 17 | 0.5 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2356) | 1:A:86:VAL:HA | 1:A:89:GLN:HG2 | 2 | 0.5 |
| (1,2356) | 1:A:86:VAL:HA | 1:A:89:GLN:HG2 | 3 | 0.5 |
| (1,1978) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:56:LYS:HB2 | 20 | 0.5 |
| (1,1612) | 1:A:39:ALA:HA | 1:A:42:TYR:HB3 | 19 | 0.5 |
| (1,1605) | 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:38:LEU:HD11 | 2 | 0.5 |
| (1,1605) | 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:38:LEU:HD12 | 2 | 0.5 |
| (1,1605) | 1:A:38:LEU:HB2 | 1:A:38:LEU:HD13 | 2 | 0.5 |
| (1,1135) | 1:A:92:GLU:HG3 | 1:A:92:GLU:HA | 7 | 0.5 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:85:TYR:HB2 | 16 | 0.5 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:85:TYR:HB2 | 16 | 0.5 |
| (1,1054) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:85:TYR:HB2 | 16 | 0.5 |
| (1,838) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:58:LYS:HB2 | 15 | 0.49 |
| (1,838) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 15 | 0.49 |
| (1,657) | 1:A:78:LYS:H | 1:A:6:GLN:HG2 | 3 | 0.49 |
| (1,657) | 1:A:78:LYS:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 3 | 0.49 |
| (1,657) | 1:A:78:LYS:H | 1:A:92:GLU:HG2 | 3 | 0.49 |
| (1,3052) | 1:A:56:LYS:H | 1:A:55:ASP:HB2 | 9 | 0.49 |
| (1,3001) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:45:ASP:HB2 | 3 | 0.49 |
| (1,3001) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:45:ASP:HB2 | 11 | 0.49 |
| (1,2928) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HG3 | 20 | 0.49 |
| (1,2912) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:62:ASN:HB2 | 9 | 0.49 |
| (1,2912) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:62:ASN:HB2 | 12 | 0.49 |
| (1,2912) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:62:ASN:HB2 | 16 | 0.49 |
| (1,2664) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:34:SER:HB2 | 7 | 0.49 |
| (1,2664) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:34:SER:HB2 | 10 | 0.49 |
| (1,2584) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:58:LYS:HA | 14 | 0.49 |
| (1,2584) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:58:LYS:HA | 18 | 0.49 |
| (1,1984) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:60:ILE:HA | 2 | 0.49 |
| (1,1978) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:56:LYS:HB2 | 11 | 0.49 |
| (1,1978) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:56:LYS:HB2 | 15 | 0.49 |
| (1,1978) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:56:LYS:HB2 | 17 | 0.49 |
| (1,1916) | 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HG3 | 10 | 0.49 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB2 | 7 | 0.49 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB1 | 7 | 0.49 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB3 | 7 | 0.49 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB2 | 10 | 0.49 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB1 | 10 | 0.49 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB3 | 10 | 0.49 |
| (1,1841) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 4 | 0.49 |
| (1,1753) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:HB2 | 16 | 0.49 |
| (1,1612) | 1:A:39:ALA:HA | 1:A:42:TYR:HB3 | 18 | 0.49 |
| (1,1454) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:32:LYS:HG3 | 2 | 0.49 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD11 | 1:A:62:ASN:HB2 | 3 | 0.49 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD13 | 1:A:62:ASN:HB2 | 3 | 0.49 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD12 | 1:A:62:ASN:HB2 | 3 | 0.49 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD11 | 1:A:62:ASN:HB2 | 7 | 0.49 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD13 | 1:A:62:ASN:HB2 | 7 | 0.49 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD12 | 1:A:62:ASN:HB2 | 7 | 0.49 |
| (1,978) | 1:A:50:ASN:HD22 | 1:A:52:GLU:HB3 | 12 | 0.48 |
| (1,978) | 1:A:50:ASN:HD22 | 1:A:52:GLU:HB3 | 17 | 0.48 |
| (1,978) | 1:A:50:ASN:HD22 | 1:A:52:GLU:HB3 | 18 | 0.48 |
| (1,774) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:41:LYS:HB2 | 7 | 0.48 |
| (1,774) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:41:LYS:HD2 | 7 | 0.48 |
| (1,774) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:41:LYS:HB2 | 13 | 0.48 |
| (1,774) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:41:LYS:HD2 | 13 | 0.48 |
| (1,3001) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:45:ASP:HB2 | 1 | 0.48 |
| (1,2928) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HG3 | 2 | 0.48 |
| (1,2928) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HG3 | 7 | 0.48 |
| (1,2664) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:34:SER:HB2 | 5 | 0.48 |
| (1,2664) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:34:SER:HB2 | 15 | 0.48 |
| (1,2664) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:34:SER:HB2 | 19 | 0.48 |
| (1,2664) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:34:SER:HB2 | 20 | 0.48 |
| (1,2638) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 15 | 0.48 |
| (1,2592) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HB3 | 12 | 0.48 |
| (1,2551) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:7:ARG:HG2 | 8 | 0.48 |
| (1,2510) | 1:A:49:ASP:HB2 | 1:A:48:PRO:HB3 | 12 | 0.48 |
| (1,1978) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:56:LYS:HB2 | 4 | 0.48 |
| (1,1978) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:56:LYS:HB2 | 6 | 0.48 |
| (1,1978) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:56:LYS:HB2 | 9 | 0.48 |
| (1,1978) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:56:LYS:HB2 | 10 | 0.48 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB2 | 19 | 0.48 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB1 | 19 | 0.48 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB3 | 19 | 0.48 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD11 | 1:A:36:ARG:HB2 | 16 | 0.48 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD13 | 1:A:36:ARG:HB2 | 16 | 0.48 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD12 | 1:A:36:ARG:HB2 | 16 | 0.48 |
| (1,163) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HB2 | 10 | 0.48 |
| (1,163) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HB3 | 10 | 0.48 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD11 | 1:A:62:ASN:HB2 | 2 | 0.48 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD13 | 1:A:62:ASN:HB2 | 2 | 0.48 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD12 | 1:A:62:ASN:HB2 | 2 | 0.48 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD11 | 1:A:62:ASN:HB2 | 5 | 0.48 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD13 | 1:A:62:ASN:HB2 | 5 | 0.48 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD12 | 1:A:62:ASN:HB2 | 5 | 0.48 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD11 | 1:A:62:ASN:HB2 | 10 | 0.48 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD13 | 1:A:62:ASN:HB2 | 10 | 0.48 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD12 | 1:A:62:ASN:HB2 | 10 | 0.48 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD11 | 1:A:62:ASN:HB2 | 20 | 0.48 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD13 | 1:A:62:ASN:HB2 | 20 | 0.48 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD12 | 1:A:62:ASN:HB2 | 20 | 0.48 |
| (1,982) | 1:A:5:ARG:HD3 | 1:A:5:ARG:HA | 7 | 0.47 |
| (1,912) | 1:A:46:LYS:HB3 | 1:A:43:HIS:HB3 | 16 | 0.47 |
| (1,881) | 1:A:78:LYS:HE3 | 1:A:78:LYS:HG3 | 13 | 0.47 |
| (1,839) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:56:LYS:HB3 | 4 | 0.47 |
| (1,839) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:56:LYS:HG3 | 4 | 0.47 |
| (1,774) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:41:LYS:HB2 | 20 | 0.47 |
| (1,774) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:41:LYS:HD2 | 20 | 0.47 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:55:ASP:HB2 | 7 | 0.47 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:56:LYS:HE2 | 7 | 0.47 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:56:LYS:HE3 | 7 | 0.47 |
| (1,3052) | 1:A:56:LYS:H | 1:A:55:ASP:HB2 | 1 | 0.47 |
| (1,3052) | 1:A:56:LYS:H | 1:A:55:ASP:HB2 | 5 | 0.47 |
| (1,2928) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HG3 | 9 | 0.47 |
| (1,2912) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:62:ASN:HB2 | 18 | 0.47 |
| (1,2664) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:34:SER:HB2 | 18 | 0.47 |
| (1,2551) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:7:ARG:HG2 | 3 | 0.47 |
| (1,2551) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:7:ARG:HG2 | 14 | 0.47 |
| (1,2385) | 1:A:88:GLU:H | 1:A:88:GLU:HG3 | 6 | 0.47 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB2 | 14 | 0.47 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB1 | 14 | 0.47 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB3 | 14 | 0.47 |
| (1,1612) | 1:A:39:ALA:HA | 1:A:42:TYR:HB3 | 3 | 0.47 |
| (1,1135) | 1:A:92:GLU:HG3 | 1:A:92:GLU:HA | 6 | 0.47 |
| (1,999) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:7:ARG:HB2 | 3 | 0.46 |
| (1,999) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:7:ARG:HB2 | 8 | 0.46 |
| (1,915) | 1:A:46:LYS:HG3 | 1:A:46:LYS:HA | 11 | 0.46 |
| (1,915) | 1:A:46:LYS:HG3 | 1:A:46:LYS:HA | 20 | 0.46 |
| (1,881) | 1:A:78:LYS:HE3 | 1:A:78:LYS:HG3 | 1 | 0.46 |
| (1,774) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:41:LYS:HB2 | 8 | 0.46 |
| (1,774) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:41:LYS:HD2 | 8 | 0.46 |
| (1,2803) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 5 | 0.46 |
| (1,2510) | 1:A:49:ASP:HB2 | 1:A:48:PRO:HB3 | 14 | 0.46 |
| (1,2271) | 1:A:81:SER:HB3 | 1:A:9:LEU:HB3 | 11 | 0.46 |
| (1,1984) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:60:ILE:HA | 3 | 0.46 |
| (1,1984) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:60:ILE:HA | 4 | 0.46 |
| (1,1978) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:56:LYS:HB2 | 1 | 0.46 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1944) | 1:A:56:LYS:HD3 | 1:A:56:LYS:H | 1 | 0.46 |
| (1,1931) | 1:A:56:LYS:HB3 | 1:A:53:ALA:HA | 1 | 0.46 |
| (1,1931) | 1:A:56:LYS:HB3 | 1:A:53:ALA:HA | 15 | 0.46 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB2 | 11 | 0.46 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB1 | 11 | 0.46 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB3 | 11 | 0.46 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB2 | 1:A:47:ASN:HB3 | 16 | 0.46 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB1 | 1:A:47:ASN:HB3 | 16 | 0.46 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB3 | 1:A:47:ASN:HB3 | 16 | 0.46 |
| (1,1838) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:58:LYS:H | 12 | 0.46 |
| (1,1612) | 1:A:39:ALA:HA | 1:A:42:TYR:HB3 | 20 | 0.46 |
| (1,881) | 1:A:78:LYS:HE3 | 1:A:78:LYS:HG3 | 8 | 0.45 |
| (1,881) | 1:A:78:LYS:HE3 | 1:A:78:LYS:HG3 | 11 | 0.45 |
| (1,881) | 1:A:78:LYS:HE3 | 1:A:78:LYS:HG3 | 16 | 0.45 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:58:LYS:HB2 | 11 | 0.45 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:58:LYS:HB3 | 11 | 0.45 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB3 | 1:A:58:LYS:HB3 | 11 | 0.45 |
| (1,2928) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HG3 | 3 | 0.45 |
| (1,2928) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HG3 | 10 | 0.45 |
| (1,2928) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HG3 | 18 | 0.45 |
| (1,2551) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:7:ARG:HG2 | 13 | 0.45 |
| (1,2536) | 1:A:99:PHE:HB3 | 1:A:96:ASN:HA | 17 | 0.45 |
| (1,2356) | 1:A:86:VAL:HA | 1:A:89:GLN:HG2 | 8 | 0.45 |
| (1,2271) | 1:A:81:SER:HB3 | 1:A:9:LEU:HB3 | 12 | 0.45 |
| (1,1944) | 1:A:56:LYS:HD3 | 1:A:56:LYS:H | 11 | 0.45 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB2 | 3 | 0.45 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB1 | 3 | 0.45 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB3 | 3 | 0.45 |
| (1,1753) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:HB2 | 15 | 0.45 |
| (1,1753) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:HB2 | 17 | 0.45 |
| (1,1698) | 1:A:44:PRO:HA | 1:A:47:ASN:HB3 | 20 | 0.45 |
| (1,1659) | 1:A:41:LYS:HD3 | 1:A:38:LEU:HD22 | 6 | 0.45 |
| (1,1659) | 1:A:41:LYS:HD3 | 1:A:38:LEU:HD21 | 6 | 0.45 |
| (1,1659) | 1:A:41:LYS:HD3 | 1:A:38:LEU:HD23 | 6 | 0.45 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD11 | 1:A:36:ARG:HB2 | 1 | 0.45 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD13 | 1:A:36:ARG:HB2 | 1 | 0.45 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD12 | 1:A:36:ARG:HB2 | 1 | 0.45 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD11 | 1:A:62:ASN:HB2 | 18 | 0.45 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD13 | 1:A:62:ASN:HB2 | 18 | 0.45 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD12 | 1:A:62:ASN:HB2 | 18 | 0.45 |
| (1,109) | 1:A:18:HIS:HB2 | 1:A:15:SER:HB3 | 20 | 0.45 |
| (1,109) | 1:A:18:HIS:HB3 | 1:A:15:SER:HB3 | 20 | 0.45 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1055) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:6:GLN:HB2 | 11 | 0.45 |
| (1,1055) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:6:GLN:HB2 | 11 | 0.45 |
| (1,1055) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:6:GLN:HB2 | 11 | 0.45 |
| (1,1055) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:6:GLN:HB2 | 13 | 0.45 |
| (1,1055) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:6:GLN:HB2 | 13 | 0.45 |
| (1,1055) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:6:GLN:HB2 | 13 | 0.45 |
| (1,999) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:7:ARG:HB2 | 2 | 0.44 |
| (1,999) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:7:ARG:HB2 | 9 | 0.44 |
| (1,999) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:7:ARG:HB2 | 19 | 0.44 |
| (1,978) | 1:A:50:ASN:HD22 | 1:A:52:GLU:HB3 | 4 | 0.44 |
| (1,881) | 1:A:78:LYS:HE3 | 1:A:78:LYS:HG3 | 5 | 0.44 |
| (1,839) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:56:LYS:HB3 | 16 | 0.44 |
| (1,839) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:56:LYS:HG3 | 16 | 0.44 |
| (1,774) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:41:LYS:HB2 | 1 | 0.44 |
| (1,774) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:41:LYS:HD2 | 1 | 0.44 |
| (1,633) | 1:A:94:ASN:HD22 | 1:A:93:GLU:HG2 | 17 | 0.44 |
| (1,633) | 1:A:94:ASN:HD22 | 1:A:93:GLU:HG3 | 17 | 0.44 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:47:ASN:H | 5 | 0.44 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:46:LYS:H | 5 | 0.44 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG2 | 1:A:47:ASN:H | 5 | 0.44 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:47:ASN:H | 12 | 0.44 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:46:LYS:H | 12 | 0.44 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG2 | 1:A:47:ASN:H | 12 | 0.44 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:47:ASN:H | 14 | 0.44 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:46:LYS:H | 14 | 0.44 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG2 | 1:A:47:ASN:H | 14 | 0.44 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:58:LYS:HB2 | 15 | 0.44 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:58:LYS:HB3 | 15 | 0.44 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB3 | 1:A:58:LYS:HB3 | 15 | 0.44 |
| (1,2928) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HG3 | 1 | 0.44 |
| (1,2928) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HG3 | 19 | 0.44 |
| (1,2912) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:62:ASN:HB2 | 10 | 0.44 |
| (1,2912) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:62:ASN:HB2 | 14 | 0.44 |
| (1,2912) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:62:ASN:HB2 | 17 | 0.44 |
| (1,2912) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:62:ASN:HB2 | 20 | 0.44 |
| (1,2817) | 1:A:89:GLN:H | 1:A:89:GLN:HG3 | 4 | 0.44 |
| (1,2803) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 6 | 0.44 |
| (1,2664) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:34:SER:HB2 | 3 | 0.44 |
| (1,2664) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:34:SER:HB2 | 6 | 0.44 |
| (1,2642) | 1:A:8:SER:H | 1:A:8:SER:HB3 | 15 | 0.44 |
| (1,2584) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:58:LYS:HA | 5 | 0.44 |
| (1,2551) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:7:ARG:HG2 | 4 | 0.44 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2356) | 1:A:86:VAL:HA | 1:A:89:GLN:HG2 | 9 | 0.44 |
| (1,2356) | 1:A:86:VAL:HA | 1:A:89:GLN:HG2 | 18 | 0.44 |
| (1,1984) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:60:ILE:HA | 20 | 0.44 |
| (1,1978) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:56:LYS:HB2 | 19 | 0.44 |
| (1,1931) | 1:A:56:LYS:HB3 | 1:A:53:ALA:HA | 18 | 0.44 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB2 | 12 | 0.44 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB1 | 12 | 0.44 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB3 | 12 | 0.44 |
| (1,1752) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:47:ASN:HD22 | 11 | 0.44 |
| (1,1661) | 1:A:41:LYS:HE3 | 1:A:42:TYR:HE2 | 18 | 0.44 |
| (1,1661) | 1:A:41:LYS:HE3 | 1:A:42:TYR:HE1 | 18 | 0.44 |
| (1,1454) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:32:LYS:HG3 | 19 | 0.44 |
| (1,1134) | 1:A:12:SER:HB2 | 1:A:14:GLU:HG3 | 9 | 0.44 |
| (1,1134) | 1:A:12:SER:HB2 | 1:A:14:GLU:HG3 | 15 | 0.44 |
| (1,1113) | 1:A:12:SER:HB3 | 1:A:14:GLU:HG3 | 1 | 0.44 |
| (1,1112) | 1:A:12:SER:HB2 | 1:A:14:GLU:HG2 | 8 | 0.44 |
| (1,999) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:7:ARG:HB2 | 10 | 0.43 |
| (1,987) | 1:A:45:ASP:H | 1:A:44:PRO:HG3 | 17 | 0.43 |
| (1,881) | 1:A:78:LYS:HE3 | 1:A:78:LYS:HG3 | 12 | 0.43 |
| (1,881) | 1:A:78:LYS:HE3 | 1:A:78:LYS:HG3 | 15 | 0.43 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:47:ASN:H | 1 | 0.43 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:46:LYS:H | 1 | 0.43 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG2 | 1:A:47:ASN:H | 1 | 0.43 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:47:ASN:H | 3 | 0.43 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:46:LYS:H | 3 | 0.43 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG2 | 1:A:47:ASN:H | 3 | 0.43 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:47:ASN:H | 7 | 0.43 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:46:LYS:H | 7 | 0.43 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG2 | 1:A:47:ASN:H | 7 | 0.43 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:47:ASN:H | 9 | 0.43 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:46:LYS:H | 9 | 0.43 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG2 | 1:A:47:ASN:H | 9 | 0.43 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:47:ASN:H | 18 | 0.43 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:46:LYS:H | 18 | 0.43 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG2 | 1:A:47:ASN:H | 18 | 0.43 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:58:LYS:HB2 | 12 | 0.43 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:58:LYS:HB3 | 12 | 0.43 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB3 | 1:A:58:LYS:HB3 | 12 | 0.43 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:58:LYS:HB2 | 14 | 0.43 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:58:LYS:HB3 | 14 | 0.43 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB3 | 1:A:58:LYS:HB3 | 14 | 0.43 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:58:LYS:HB2 | 19 | 0.43 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:58:LYS:HB3 | 19 | 0.43 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB3 | 1:A:58:LYS:HB3 | 19 | 0.43 |
| (1,2928) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HG3 | 17 | 0.43 |
| (1,2912) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:62:ASN:HB2 | 19 | 0.43 |
| (1,2690) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:52:GLU:HG3 | 10 | 0.43 |
| (1,2664) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:34:SER:HB2 | 13 | 0.43 |
| (1,2536) | 1:A:99:PHE:HB3 | 1:A:96:ASN:HA | 18 | 0.43 |
| (1,2510) | 1:A:49:ASP:HB2 | 1:A:48:PRO:HB3 | 2 | 0.43 |
| (1,2510) | 1:A:49:ASP:HB2 | 1:A:48:PRO:HB3 | 10 | 0.43 |
| (1,2448) | 1:A:100:VAL:HB | 1:A:100:VAL:H | 5 | 0.43 |
| (1,2271) | 1:A:81:SER:HB3 | 1:A:9:LEU:HB3 | 1 | 0.43 |
| (1,2271) | 1:A:81:SER:HB3 | 1:A:9:LEU:HB3 | 8 | 0.43 |
| (1,2271) | 1:A:81:SER:HB3 | 1:A:9:LEU:HB3 | 16 | 0.43 |
| (1,2143) | 1:A:73:ARG:HB3 | 1:A:70:ALA:HA | 11 | 0.43 |
| (1,1984) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:60:ILE:HA | 5 | 0.43 |
| (1,1978) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:56:LYS:HB2 | 7 | 0.43 |
| (1,1978) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:56:LYS:HB2 | 12 | 0.43 |
| (1,1931) | 1:A:56:LYS:HB3 | 1:A:53:ALA:HA | 8 | 0.43 |
| (1,1931) | 1:A:56:LYS:HB3 | 1:A:53:ALA:HA | 11 | 0.43 |
| (1,1931) | 1:A:56:LYS:HB3 | 1:A:53:ALA:HA | 20 | 0.43 |
| (1,1733) | 1:A:99:PHE:HB2 | 1:A:100:VAL:HG13 | 12 | 0.43 |
| (1,1733) | 1:A:99:PHE:HB2 | 1:A:100:VAL:HG11 | 12 | 0.43 |
| (1,1733) | 1:A:99:PHE:HB2 | 1:A:100:VAL:HG12 | 12 | 0.43 |
| (1,1135) | 1:A:92:GLU:HG3 | 1:A:92:GLU:HA | 11 | 0.43 |
| (1,109) | 1:A:18:HIS:HB2 | 1:A:15:SER:HB3 | 15 | 0.43 |
| (1,109) | 1:A:18:HIS:HB3 | 1:A:15:SER:HB3 | 15 | 0.43 |
| (1,109) | 1:A:18:HIS:HB2 | 1:A:15:SER:HB3 | 18 | 0.43 |
| (1,109) | 1:A:18:HIS:HB3 | 1:A:15:SER:HB3 | 18 | 0.43 |
| (1,109) | 1:A:18:HIS:HB2 | 1:A:15:SER:HB3 | 19 | 0.43 |
| (1,109) | 1:A:18:HIS:HB3 | 1:A:15:SER:HB3 | 19 | 0.43 |
| (1,1009) | 1:A:8:SER:HA | 1:A:8:SER:HB2 | 16 | 0.43 |
| (1,1009) | 1:A:8:SER:HA | 1:A:8:SER:HB2 | 17 | 0.43 |
| (1,881) | 1:A:78:LYS:HE3 | 1:A:78:LYS:HG3 | 2 | 0.42 |
| (1,838) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:58:LYS:HB2 | 11 | 0.42 |
| (1,838) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 11 | 0.42 |
| (1,774) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:41:LYS:HB2 | 9 | 0.42 |
| (1,774) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:41:LYS:HD2 | 9 | 0.42 |
| (1,657) | 1:A:78:LYS:H | 1:A:6:GLN:HG2 | 16 | 0.42 |
| (1,657) | 1:A:78:LYS:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 16 | 0.42 |
| (1,657) | 1:A:78:LYS:H | 1:A:92:GLU:HG2 | 16 | 0.42 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:33:LYS:HB2 | 10 | 0.42 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:33:LYS:HB3 | 10 | 0.42 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:36:ARG:HG2 | 10 | 0.42 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 10 | 0.42 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:47:ASN:H | 2 | 0.42 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:46:LYS:H | 2 | 0.42 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG2 | 1:A:47:ASN:H | 2 | 0.42 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:47:ASN:H | 6 | 0.42 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:46:LYS:H | 6 | 0.42 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG2 | 1:A:47:ASN:H | 6 | 0.42 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:47:ASN:H | 8 | 0.42 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:46:LYS:H | 8 | 0.42 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG2 | 1:A:47:ASN:H | 8 | 0.42 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:47:ASN:H | 10 | 0.42 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:46:LYS:H | 10 | 0.42 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG2 | 1:A:47:ASN:H | 10 | 0.42 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:47:ASN:H | 11 | 0.42 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:46:LYS:H | 11 | 0.42 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG2 | 1:A:47:ASN:H | 11 | 0.42 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:47:ASN:H | 15 | 0.42 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:46:LYS:H | 15 | 0.42 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG2 | 1:A:47:ASN:H | 15 | 0.42 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:47:ASN:H | 19 | 0.42 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:46:LYS:H | 19 | 0.42 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG2 | 1:A:47:ASN:H | 19 | 0.42 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:79:TYR:HB3 | 16 | 0.42 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:72:LYS:HE2 | 16 | 0.42 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:72:LYS:HE3 | 16 | 0.42 |
| (1,3103) | 1:A:80:GLY:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 5 | 0.42 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:55:ASP:HB2 | 4 | 0.42 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:56:LYS:HE2 | 4 | 0.42 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:56:LYS:HE3 | 4 | 0.42 |
| (1,2984) | 1:A:73:ARG:H | 1:A:73:ARG:HD3 | 7 | 0.42 |
| (1,2984) | 1:A:73:ARG:H | 1:A:73:ARG:HD3 | 11 | 0.42 |
| (1,2928) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HG3 | 4 | 0.42 |
| (1,2912) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:62:ASN:HB2 | 8 | 0.42 |
| (1,2733) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 1 | 0.42 |
| (1,2592) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HB3 | 1 | 0.42 |
| (1,2551) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:7:ARG:HG2 | 5 | 0.42 |
| (1,2510) | 1:A:49:ASP:HB2 | 1:A:48:PRO:HB3 | 18 | 0.42 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD12 | 1:A:85:TYR:HB2 | 16 | 0.42 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD11 | 1:A:85:TYR:HB2 | 16 | 0.42 |
| (1,2291) | 1:A:82:LEU:HD13 | 1:A:85:TYR:HB2 | 16 | 0.42 |
| (1,2271) | 1:A:81:SER:HB3 | 1:A:9:LEU:HB3 | 7 | 0.42 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1931) | 1:A:56:LYS:HB3 | 1:A:53:ALA:HA | 9 | 0.42 |
| (1,1838) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:58:LYS:H | 11 | 0.42 |
| (1,1752) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:47:ASN:HD22 | 20 | 0.42 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD11 | 1:A:36:ARG:HB2 | 7 | 0.42 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD13 | 1:A:36:ARG:HB2 | 7 | 0.42 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD12 | 1:A:36:ARG:HB2 | 7 | 0.42 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD11 | 1:A:36:ARG:HB2 | 18 | 0.42 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD13 | 1:A:36:ARG:HB2 | 18 | 0.42 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD12 | 1:A:36:ARG:HB2 | 18 | 0.42 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD11 | 1:A:36:ARG:HB2 | 19 | 0.42 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD13 | 1:A:36:ARG:HB2 | 19 | 0.42 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD12 | 1:A:36:ARG:HB2 | 19 | 0.42 |
| (1,1612) | 1:A:39:ALA:HA | 1:A:42:TYR:HB3 | 14 | 0.42 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD11 | 1:A:62:ASN:HB2 | 8 | 0.42 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD13 | 1:A:62:ASN:HB2 | 8 | 0.42 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD12 | 1:A:62:ASN:HB2 | 8 | 0.42 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD11 | 1:A:62:ASN:HB2 | 15 | 0.42 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD13 | 1:A:62:ASN:HB2 | 15 | 0.42 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD12 | 1:A:62:ASN:HB2 | 15 | 0.42 |
| (1,1112) | 1:A:12:SER:HB2 | 1:A:14:GLU:HG2 | 6 | 0.42 |
| (1,1009) | 1:A:8:SER:HA | 1:A:8:SER:HB2 | 1 | 0.42 |
| (1,1009) | 1:A:8:SER:HA | 1:A:8:SER:HB2 | 2 | 0.42 |
| (1,1009) | 1:A:8:SER:HA | 1:A:8:SER:HB2 | 4 | 0.42 |
| (1,1009) | 1:A:8:SER:HA | 1:A:8:SER:HB2 | 6 | 0.42 |
| (1,1009) | 1:A:8:SER:HA | 1:A:8:SER:HB2 | 8 | 0.42 |
| (1,999) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:7:ARG:HB2 | 4 | 0.41 |
| (1,999) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:7:ARG:HB2 | 13 | 0.41 |
| (1,996) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:6:GLN:HG2 | 13 | 0.41 |
| (1,912) | 1:A:46:LYS:HB3 | 1:A:43:HIS:HB3 | 3 | 0.41 |
| (1,882) | 1:A:41:LYS:HE2 | 1:A:41:LYS:HG3 | 18 | 0.41 |
| (1,881) | 1:A:78:LYS:HE3 | 1:A:78:LYS:HG3 | 3 | 0.41 |
| (1,838) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:58:LYS:HB2 | 4 | 0.41 |
| (1,838) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 4 | 0.41 |
| (1,838) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:58:LYS:HB2 | 13 | 0.41 |
| (1,838) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 13 | 0.41 |
| (1,774) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:41:LYS:HB2 | 11 | 0.41 |
| (1,774) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:41:LYS:HD2 | 11 | 0.41 |
| (1,774) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:41:LYS:HB2 | 14 | 0.41 |
| (1,774) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:41:LYS:HD2 | 14 | 0.41 |
| (1,633) | 1:A:94:ASN:HD22 | 1:A:93:GLU:HG2 | 3 | 0.41 |
| (1,633) | 1:A:94:ASN:HD22 | 1:A:93:GLU:HG3 | 3 | 0.41 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:33:LYS:HB2 | 13 | 0.41 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:33:LYS:HB3 | 13 | 0.41 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:36:ARG:HG2 | 13 | 0.41 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 13 | 0.41 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:47:ASN:H | 13 | 0.41 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:46:LYS:H | 13 | 0.41 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG2 | 1:A:47:ASN:H | 13 | 0.41 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:47:ASN:H | 17 | 0.41 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:46:LYS:H | 17 | 0.41 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG2 | 1:A:47:ASN:H | 17 | 0.41 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD13 | 8 | 0.41 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD11 | 8 | 0.41 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD12 | 8 | 0.41 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB1 | 1:A:61:ASN:HA | 8 | 0.41 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB2 | 1:A:61:ASN:HA | 8 | 0.41 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB3 | 1:A:61:ASN:HA | 8 | 0.41 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG21 | 8 | 0.41 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG23 | 8 | 0.41 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG22 | 8 | 0.41 |
| (1,434) | 1:A:75:ILE:HG22 | 1:A:84:LEU:HB2 | 9 | 0.41 |
| (1,434) | 1:A:75:ILE:HG21 | 1:A:84:LEU:HB2 | 9 | 0.41 |
| (1,434) | 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:84:LEU:HB2 | 9 | 0.41 |
| (1,434) | 1:A:75:ILE:HG22 | 1:A:92:GLU:HB2 | 9 | 0.41 |
| (1,434) | 1:A:75:ILE:HG21 | 1:A:92:GLU:HB2 | 9 | 0.41 |
| (1,434) | 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:92:GLU:HB2 | 9 | 0.41 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:58:LYS:HB2 | 9 | 0.41 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:58:LYS:HB3 | 9 | 0.41 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB3 | 1:A:58:LYS:HB3 | 9 | 0.41 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:58:LYS:HB2 | 16 | 0.41 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:58:LYS:HB3 | 16 | 0.41 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB3 | 1:A:58:LYS:HB3 | 16 | 0.41 |
| (1,2947) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:44:PRO:HB2 | 3 | 0.41 |
| (1,2928) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HG3 | 8 | 0.41 |
| (1,2928) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HG3 | 16 | 0.41 |
| (1,2803) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 2 | 0.41 |
| (1,2585) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:62:ASN:H | 9 | 0.41 |
| (1,2584) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:58:LYS:HA | 2 | 0.41 |
| (1,2510) | 1:A:49:ASP:HB2 | 1:A:48:PRO:HB3 | 17 | 0.41 |
| (1,2242) | 1:A:78:LYS:HG2 | 1:A:79:TYR:H | 15 | 0.41 |
| (1,2006) | 1:A:78:LYS:HD2 | 1:A:75:ILE:HA | 11 | 0.41 |
| (1,1978) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:56:LYS:HB2 | 16 | 0.41 |
| (1,1753) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:HB2 | 7 | 0.41 |
| (1,1112) | 1:A:12:SER:HB2 | 1:A:14:GLU:HG2 | 3 | 0.41 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1112) | 1:A:12:SER:HB2 | 1:A:14:GLU:HG2 | 14 | 0.41 |
| (1,1009) | 1:A:8:SER:HA | 1:A:8:SER:HB2 | 15 | 0.41 |
| (1,999) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:7:ARG:HB2 | 18 | 0.4 |
| (1,987) | 1:A:45:ASP:H | 1:A:44:PRO:HG3 | 20 | 0.4 |
| (1,912) | 1:A:46:LYS:HB3 | 1:A:43:HIS:HB3 | 14 | 0.4 |
| (1,774) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:41:LYS:HB2 | 18 | 0.4 |
| (1,774) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:41:LYS:HD2 | 18 | 0.4 |
| (1,765) | 1:A:88:GLU:H | 1:A:88:GLU:HB2 | 13 | 0.4 |
| (1,765) | 1:A:88:GLU:H | 1:A:88:GLU:HG3 | 13 | 0.4 |
| (1,657) | 1:A:78:LYS:H | 1:A:6:GLN:HG2 | 19 | 0.4 |
| (1,657) | 1:A:78:LYS:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 19 | 0.4 |
| (1,657) | 1:A:78:LYS:H | 1:A:92:GLU:HG2 | 19 | 0.4 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:33:LYS:HB2 | 5 | 0.4 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:33:LYS:HB3 | 5 | 0.4 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:36:ARG:HG2 | 5 | 0.4 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 5 | 0.4 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:33:LYS:HB2 | 9 | 0.4 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:33:LYS:HB3 | 9 | 0.4 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:36:ARG:HG2 | 9 | 0.4 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 9 | 0.4 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:47:ASN:H | 4 | 0.4 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:46:LYS:H | 4 | 0.4 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG2 | 1:A:47:ASN:H | 4 | 0.4 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD13 | 1 | 0.4 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD11 | 1 | 0.4 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD12 | 1 | 0.4 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB1 | 1:A:61:ASN:HA | 1 | 0.4 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB2 | 1:A:61:ASN:HA | 1 | 0.4 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB3 | 1:A:61:ASN:HA | 1 | 0.4 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG21 | 1 | 0.4 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG23 | 1 | 0.4 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG22 | 1 | 0.4 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD13 | 20 | 0.4 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD11 | 20 | 0.4 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD12 | 20 | 0.4 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB1 | 1:A:61:ASN:HA | 20 | 0.4 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB2 | 1:A:61:ASN:HA | 20 | 0.4 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB3 | 1:A:61:ASN:HA | 20 | 0.4 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG21 | 20 | 0.4 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG23 | 20 | 0.4 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG22 | 20 | 0.4 |
| (1,434) | 1:A:75:ILE:HG22 | 1:A:84:LEU:HB2 | 11 | 0.4 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,434) | 1:A:75:ILE:HG21 | 1:A:84:LEU:HB2 | 11 | 0.4 |
| (1,434) | 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:84:LEU:HB2 | 11 | 0.4 |
| (1,434) | 1:A:75:ILE:HG22 | 1:A:92:GLU:HB2 | 11 | 0.4 |
| (1,434) | 1:A:75:ILE:HG21 | 1:A:92:GLU:HB2 | 11 | 0.4 |
| (1,434) | 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:92:GLU:HB2 | 11 | 0.4 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:69:ASP:HB2 | 15 | 0.4 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:69:ASP:HB2 | 15 | 0.4 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:69:ASP:HB2 | 15 | 0.4 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:73:ARG:HD3 | 15 | 0.4 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:73:ARG:HD3 | 15 | 0.4 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:73:ARG:HD3 | 15 | 0.4 |
| (1,2843) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:67:LEU:HB2 | 9 | 0.4 |
| (1,2585) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:62:ASN:H | 4 | 0.4 |
| (1,2356) | 1:A:86:VAL:HA | 1:A:89:GLN:HG2 | 7 | 0.4 |
| (1,2356) | 1:A:86:VAL:HA | 1:A:89:GLN:HG2 | 13 | 0.4 |
| (1,2271) | 1:A:81:SER:HB3 | 1:A:9:LEU:HB3 | 5 | 0.4 |
| (1,2271) | 1:A:81:SER:HB3 | 1:A:9:LEU:HB3 | 17 | 0.4 |
| (1,2271) | 1:A:81:SER:HB3 | 1:A:9:LEU:HB3 | 20 | 0.4 |
| (1,1864) | 1:A:52:GLU:HB2 | 1:A:52:GLU:HA | 7 | 0.4 |
| (1,1864) | 1:A:52:GLU:HB2 | 1:A:52:GLU:HA | 19 | 0.4 |
| (1,1838) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:58:LYS:H | 8 | 0.4 |
| (1,1832) | 1:A:51:PRO:HA | 1:A:51:PRO:HB2 | 1 | 0.4 |
| (1,1832) | 1:A:51:PRO:HA | 1:A:51:PRO:HB2 | 3 | 0.4 |
| (1,1832) | 1:A:51:PRO:HA | 1:A:51:PRO:HB2 | 4 | 0.4 |
| (1,1832) | 1:A:51:PRO:HA | 1:A:51:PRO:HB2 | 6 | 0.4 |
| (1,1832) | 1:A:51:PRO:HA | 1:A:51:PRO:HB2 | 7 | 0.4 |
| (1,1832) | 1:A:51:PRO:HA | 1:A:51:PRO:HB2 | 12 | 0.4 |
| (1,1832) | 1:A:51:PRO:HA | 1:A:51:PRO:HB2 | 13 | 0.4 |
| (1,1832) | 1:A:51:PRO:HA | 1:A:51:PRO:HB2 | 15 | 0.4 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD11 | 1:A:36:ARG:HB2 | 8 | 0.4 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD13 | 1:A:36:ARG:HB2 | 8 | 0.4 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD12 | 1:A:36:ARG:HB2 | 8 | 0.4 |
| (1,1407) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:25:ASN:HA | 11 | 0.4 |
| (1,1135) | 1:A:92:GLU:HG3 | 1:A:92:GLU:HA | 9 | 0.4 |
| (1,1112) | 1:A:12:SER:HB2 | 1:A:14:GLU:HG2 | 12 | 0.4 |
| (1,109) | 1:A:18:HIS:HB2 | 1:A:15:SER:HB3 | 1 | 0.4 |
| (1,109) | 1:A:18:HIS:HB3 | 1:A:15:SER:HB3 | 1 | 0.4 |
| (1,999) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:7:ARG:HB2 | 5 | 0.39 |
| (1,865) | 1:A:94:ASN:HB3 | 1:A:94:ASN:HD21 | 13 | 0.39 |
| (1,865) | 1:A:94:ASN:HB3 | 1:A:94:ASN:HD21 | 20 | 0.39 |
| (1,838) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:58:LYS:HB2 | 1 | 0.39 |
| (1,838) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 1 | 0.39 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:33:LYS:HB2 | 11 | 0.39 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:33:LYS:HB3 | 11 | 0.39 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:36:ARG:HG2 | 11 | 0.39 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 11 | 0.39 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:69:ASP:HB2 | 1 | 0.39 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:69:ASP:HB2 | 1 | 0.39 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:69:ASP:HB2 | 1 | 0.39 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:73:ARG:HD3 | 1 | 0.39 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:73:ARG:HD3 | 1 | 0.39 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:73:ARG:HD3 | 1 | 0.39 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:58:LYS:HB2 | 5 | 0.39 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:58:LYS:HB3 | 5 | 0.39 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB3 | 1:A:58:LYS:HB3 | 5 | 0.39 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:58:LYS:HB2 | 18 | 0.39 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:58:LYS:HB3 | 18 | 0.39 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB3 | 1:A:58:LYS:HB3 | 18 | 0.39 |
| (1,2912) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:62:ASN:HB2 | 3 | 0.39 |
| (1,2664) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:34:SER:HB2 | 1 | 0.39 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG12 | 13 | 0.39 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG11 | 13 | 0.39 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG13 | 13 | 0.39 |
| (1,2271) | 1:A:81:SER:HB3 | 1:A:9:LEU:HB3 | 2 | 0.39 |
| (1,2271) | 1:A:81:SER:HB3 | 1:A:9:LEU:HB3 | 13 | 0.39 |
| (1,2271) | 1:A:81:SER:HB3 | 1:A:9:LEU:HB3 | 18 | 0.39 |
| (1,1984) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:60:ILE:HA | 6 | 0.39 |
| (1,1864) | 1:A:52:GLU:HB2 | 1:A:52:GLU:HA | 1 | 0.39 |
| (1,1864) | 1:A:52:GLU:HB2 | 1:A:52:GLU:HA | 2 | 0.39 |
| (1,1864) | 1:A:52:GLU:HB2 | 1:A:52:GLU:HA | 3 | 0.39 |
| (1,1864) | 1:A:52:GLU:HB2 | 1:A:52:GLU:HA | 4 | 0.39 |
| (1,1864) | 1:A:52:GLU:HB2 | 1:A:52:GLU:HA | 5 | 0.39 |
| (1,1864) | 1:A:52:GLU:HB2 | 1:A:52:GLU:HA | 6 | 0.39 |
| (1,1864) | 1:A:52:GLU:HB2 | 1:A:52:GLU:HA | 9 | 0.39 |
| (1,1864) | 1:A:52:GLU:HB2 | 1:A:52:GLU:HA | 11 | 0.39 |
| (1,1864) | 1:A:52:GLU:HB2 | 1:A:52:GLU:HA | 12 | 0.39 |
| (1,1864) | 1:A:52:GLU:HB2 | 1:A:52:GLU:HA | 13 | 0.39 |
| (1,1864) | 1:A:52:GLU:HB2 | 1:A:52:GLU:HA | 14 | 0.39 |
| (1,1864) | 1:A:52:GLU:HB2 | 1:A:52:GLU:HA | 15 | 0.39 |
| (1,1864) | 1:A:52:GLU:HB2 | 1:A:52:GLU:HA | 17 | 0.39 |
| (1,1864) | 1:A:52:GLU:HB2 | 1:A:52:GLU:HA | 18 | 0.39 |
| (1,1864) | 1:A:52:GLU:HB2 | 1:A:52:GLU:HA | 20 | 0.39 |
| (1,1838) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:58:LYS:H | 3 | 0.39 |
| (1,1838) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:58:LYS:H | 18 | 0.39 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1838) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:58:LYS:H | 20 | 0.39 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD11 | 1:A:36:ARG:HB2 | 20 | 0.39 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD13 | 1:A:36:ARG:HB2 | 20 | 0.39 |
| (1,1632) | 1:A:40:LEU:HD12 | 1:A:36:ARG:HB2 | 20 | 0.39 |
| (1,1612) | 1:A:39:ALA:HA | 1:A:42:TYR:HB3 | 4 | 0.39 |
| (1,1612) | 1:A:39:ALA:HA | 1:A:42:TYR:HB3 | 17 | 0.39 |
| (1,1508) | 1:A:58:LYS:HA | 1:A:58:LYS:HB3 | 7 | 0.39 |
| (1,1508) | 1:A:58:LYS:HA | 1:A:58:LYS:HB3 | 13 | 0.39 |
| (1,1075) | 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HB2 | 7 | 0.39 |
| (1,987) | 1:A:45:ASP:H | 1:A:44:PRO:HG3 | 11 | 0.38 |
| (1,912) | 1:A:46:LYS:HB3 | 1:A:43:HIS:HB3 | 9 | 0.38 |
| (1,865) | 1:A:94:ASN:HB3 | 1:A:94:ASN:HD21 | 9 | 0.38 |
| (1,865) | 1:A:94:ASN:HB3 | 1:A:94:ASN:HD21 | 19 | 0.38 |
| (1,839) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:56:LYS:HB3 | 17 | 0.38 |
| (1,839) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:56:LYS:HG3 | 17 | 0.38 |
| (1,774) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:41:LYS:HB2 | 17 | 0.38 |
| (1,774) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:41:LYS:HD2 | 17 | 0.38 |
| (1,765) | 1:A:88:GLU:H | 1:A:88:GLU:HB2 | 6 | 0.38 |
| (1,765) | 1:A:88:GLU:H | 1:A:88:GLU:HG3 | 6 | 0.38 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:33:LYS:HB2 | 2 | 0.38 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:33:LYS:HB3 | 2 | 0.38 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:36:ARG:HG2 | 2 | 0.38 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 2 | 0.38 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:33:LYS:HB2 | 12 | 0.38 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:33:LYS:HB3 | 12 | 0.38 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:36:ARG:HG2 | 12 | 0.38 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 12 | 0.38 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:33:LYS:HB2 | 17 | 0.38 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:33:LYS:HB3 | 17 | 0.38 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:36:ARG:HG2 | 17 | 0.38 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 17 | 0.38 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:47:ASN:H | 16 | 0.38 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:46:LYS:H | 16 | 0.38 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG2 | 1:A:47:ASN:H | 16 | 0.38 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:47:ASN:H | 20 | 0.38 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:46:LYS:H | 20 | 0.38 |
| (1,59) | 1:A:44:PRO:HG2 | 1:A:47:ASN:H | 20 | 0.38 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD13 | 7 | 0.38 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD11 | 7 | 0.38 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD12 | 7 | 0.38 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB1 | 1:A:61:ASN:HA | 7 | 0.38 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB2 | 1:A:61:ASN:HA | 7 | 0.38 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB3 | 1:A:61:ASN:HA | 7 | 0.38 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG21 | 7 | 0.38 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG23 | 7 | 0.38 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG22 | 7 | 0.38 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD13 | 18 | 0.38 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD11 | 18 | 0.38 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD12 | 18 | 0.38 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB1 | 1:A:61:ASN:HA | 18 | 0.38 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB2 | 1:A:61:ASN:HA | 18 | 0.38 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB3 | 1:A:61:ASN:HA | 18 | 0.38 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG21 | 18 | 0.38 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG23 | 18 | 0.38 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG22 | 18 | 0.38 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:69:ASP:HB2 | 17 | 0.38 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:69:ASP:HB2 | 17 | 0.38 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:69:ASP:HB2 | 17 | 0.38 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:73:ARG:HD3 | 17 | 0.38 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:73:ARG:HD3 | 17 | 0.38 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:73:ARG:HD3 | 17 | 0.38 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:58:LYS:HB2 | 17 | 0.38 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:58:LYS:HB3 | 17 | 0.38 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB3 | 1:A:58:LYS:HB3 | 17 | 0.38 |
| (1,2928) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:32:LYS:HG3 | 15 | 0.38 |
| (1,2912) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:62:ASN:HB2 | 13 | 0.38 |
| (1,2843) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:67:LEU:HB2 | 15 | 0.38 |
| (1,2843) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:67:LEU:HB2 | 17 | 0.38 |
| (1,2792) | 1:A:49:ASP:H | 1:A:48:PRO:HB3 | 16 | 0.38 |
| (1,2792) | 1:A:49:ASP:H | 1:A:48:PRO:HB3 | 20 | 0.38 |
| (1,2584) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:58:LYS:HA | 17 | 0.38 |
| (1,2551) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:7:ARG:HG2 | 7 | 0.38 |
| (1,2478) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:62:ASN:HA | 14 | 0.38 |
| (1,2413) | 1:A:91:GLY:HA2 | 1:A:94:ASN:HD22 | 2 | 0.38 |
| (1,2413) | 1:A:91:GLY:HA2 | 1:A:94:ASN:HD22 | 17 | 0.38 |
| (1,2405) | 1:A:90:PHE:H | 1:A:89:GLN:HG3 | 3 | 0.38 |
| (1,2405) | 1:A:90:PHE:H | 1:A:89:GLN:HG3 | 8 | 0.38 |
| (1,2356) | 1:A:86:VAL:HA | 1:A:89:GLN:HG2 | 6 | 0.38 |
| (1,2356) | 1:A:86:VAL:HA | 1:A:89:GLN:HG2 | 10 | 0.38 |
| (1,2271) | 1:A:81:SER:HB3 | 1:A:9:LEU:HB3 | 3 | 0.38 |
| (1,2242) | 1:A:78:LYS:HG2 | 1:A:79:TYR:H | 12 | 0.38 |
| (1,1984) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:60:ILE:HA | 13 | 0.38 |
| (1,1944) | 1:A:56:LYS:HD3 | 1:A:56:LYS:H | 7 | 0.38 |
| (1,1864) | 1:A:52:GLU:HB2 | 1:A:52:GLU:HA | 8 | 0.38 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1838) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:58:LYS:H | 19 | 0.38 |
| (1,1832) | 1:A:51:PRO:HA | 1:A:51:PRO:HB2 | 2 | 0.38 |
| (1,1832) | 1:A:51:PRO:HA | 1:A:51:PRO:HB2 | 5 | 0.38 |
| (1,1832) | 1:A:51:PRO:HA | 1:A:51:PRO:HB2 | 8 | 0.38 |
| (1,1832) | 1:A:51:PRO:HA | 1:A:51:PRO:HB2 | 9 | 0.38 |
| (1,1832) | 1:A:51:PRO:HA | 1:A:51:PRO:HB2 | 10 | 0.38 |
| (1,1832) | 1:A:51:PRO:HA | 1:A:51:PRO:HB2 | 11 | 0.38 |
| (1,1832) | 1:A:51:PRO:HA | 1:A:51:PRO:HB2 | 14 | 0.38 |
| (1,1832) | 1:A:51:PRO:HA | 1:A:51:PRO:HB2 | 16 | 0.38 |
| (1,1832) | 1:A:51:PRO:HA | 1:A:51:PRO:HB2 | 17 | 0.38 |
| (1,1832) | 1:A:51:PRO:HA | 1:A:51:PRO:HB2 | 18 | 0.38 |
| (1,1832) | 1:A:51:PRO:HA | 1:A:51:PRO:HB2 | 19 | 0.38 |
| (1,1832) | 1:A:51:PRO:HA | 1:A:51:PRO:HB2 | 20 | 0.38 |
| (1,1653) | 1:A:41:LYS:HD2 | 1:A:38:LEU:HA | 18 | 0.38 |
| (1,1508) | 1:A:58:LYS:HA | 1:A:58:LYS:HB3 | 2 | 0.38 |
| (1,1508) | 1:A:58:LYS:HA | 1:A:58:LYS:HB3 | 4 | 0.38 |
| (1,1508) | 1:A:58:LYS:HA | 1:A:58:LYS:HB3 | 10 | 0.38 |
| (1,1508) | 1:A:58:LYS:HA | 1:A:58:LYS:HB3 | 16 | 0.38 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD11 | 1:A:62:ASN:HB2 | 1 | 0.38 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD13 | 1:A:62:ASN:HB2 | 1 | 0.38 |
| (1,1188) | 1:A:16:LEU:HD12 | 1:A:62:ASN:HB2 | 1 | 0.38 |
| (1,1051) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:9:LEU:H | 15 | 0.38 |
| (1,1051) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:9:LEU:H | 15 | 0.38 |
| (1,1051) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:9:LEU:H | 15 | 0.38 |
| (1,999) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:7:ARG:HB2 | 7 | 0.37 |
| (1,999) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:7:ARG:HB2 | 17 | 0.37 |
| (1,987) | 1:A:45:ASP:H | 1:A:44:PRO:HG3 | 12 | 0.37 |
| (1,912) | 1:A:46:LYS:HB3 | 1:A:43:HIS:HB3 | 6 | 0.37 |
| (1,912) | 1:A:46:LYS:HB3 | 1:A:43:HIS:HB3 | 13 | 0.37 |
| (1,877) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:25:ASN:HA | 4 | 0.37 |
| (1,865) | 1:A:94:ASN:HB3 | 1:A:94:ASN:HD21 | 14 | 0.37 |
| (1,839) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:56:LYS:HB3 | 19 | 0.37 |
| (1,839) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:56:LYS:HG3 | 19 | 0.37 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:38:LEU:HD22 | 7 | 0.37 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:38:LEU:HD21 | 7 | 0.37 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:38:LEU:HD23 | 7 | 0.37 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:39:ALA:HB1 | 7 | 0.37 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:39:ALA:HB2 | 7 | 0.37 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:39:ALA:HB3 | 7 | 0.37 |
| (1,774) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:41:LYS:HB2 | 12 | 0.37 |
| (1,774) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:41:LYS:HD2 | 12 | 0.37 |
| (1,760) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:48:PRO:HB3 | 4 | 0.37 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,760) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:48:PRO:HG2 | 4 | 0.37 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:33:LYS:HB2 | 15 | 0.37 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:33:LYS:HB3 | 15 | 0.37 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:36:ARG:HG2 | 15 | 0.37 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 15 | 0.37 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:58:LYS:HB2 | 1 | 0.37 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:58:LYS:HB3 | 1 | 0.37 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB3 | 1:A:58:LYS:HB3 | 1 | 0.37 |
| (1,3103) | 1:A:80:GLY:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 13 | 0.37 |
| (1,3002) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:46:LYS:HB3 | 17 | 0.37 |
| (1,2584) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:58:LYS:HA | 11 | 0.37 |
| (1,2584) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:58:LYS:HA | 19 | 0.37 |
| (1,2550) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:6:GLN:HB2 | 11 | 0.37 |
| (1,2405) | 1:A:90:PHE:H | 1:A:89:GLN:HG3 | 5 | 0.37 |
| (1,2356) | 1:A:86:VAL:HA | 1:A:89:GLN:HG2 | 5 | 0.37 |
| (1,2356) | 1:A:86:VAL:HA | 1:A:89:GLN:HG2 | 11 | 0.37 |
| (1,2356) | 1:A:86:VAL:HA | 1:A:89:GLN:HG2 | 17 | 0.37 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG12 | 18 | 0.37 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG11 | 18 | 0.37 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG13 | 18 | 0.37 |
| (1,2271) | 1:A:81:SER:HB3 | 1:A:9:LEU:HB3 | 10 | 0.37 |
| (1,1984) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:60:ILE:HA | 8 | 0.37 |
| (1,1984) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:60:ILE:HA | 17 | 0.37 |
| (1,1931) | 1:A:56:LYS:HB3 | 1:A:53:ALA:HA | 4 | 0.37 |
| (1,1931) | 1:A:56:LYS:HB3 | 1:A:53:ALA:HA | 17 | 0.37 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB2 | 9 | 0.37 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB1 | 9 | 0.37 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB3 | 9 | 0.37 |
| (1,1664) | 1:A:41:LYS:HE2 | 1:A:38:LEU:HA | 11 | 0.37 |
| (1,1571) | 1:A:58:LYS:HG2 | 1:A:58:LYS:HA | 12 | 0.37 |
| (1,1508) | 1:A:58:LYS:HA | 1:A:58:LYS:HB3 | 6 | 0.37 |
| (1,1508) | 1:A:58:LYS:HA | 1:A:58:LYS:HB3 | 14 | 0.37 |
| (1,109) | 1:A:18:HIS:HB2 | 1:A:15:SER:HB3 | 10 | 0.37 |
| (1,109) | 1:A:18:HIS:HB3 | 1:A:15:SER:HB3 | 10 | 0.37 |
| (1,1075) | 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HB2 | 15 | 0.37 |
| (1,1055) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:6:GLN:HB2 | 19 | 0.37 |
| (1,1055) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:6:GLN:HB2 | 19 | 0.37 |
| (1,1055) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:6:GLN:HB2 | 19 | 0.37 |
| (1,999) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:7:ARG:HB2 | 6 | 0.36 |
| (1,999) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:7:ARG:HB2 | 14 | 0.36 |
| (1,987) | 1:A:45:ASP:H | 1:A:44:PRO:HG3 | 19 | 0.36 |
| (1,915) | 1:A:46:LYS:HG3 | 1:A:46:LYS:HA | 9 | 0.36 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,915) | 1:A:46:LYS:HG3 | 1:A:46:LYS:HA | 12 | 0.36 |
| (1,915) | 1:A:46:LYS:HG3 | 1:A:46:LYS:HA | 14 | 0.36 |
| (1,912) | 1:A:46:LYS:HB3 | 1:A:43:HIS:HB3 | 12 | 0.36 |
| (1,839) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:56:LYS:HB3 | 5 | 0.36 |
| (1,839) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:56:LYS:HG3 | 5 | 0.36 |
| (1,839) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:56:LYS:HB3 | 13 | 0.36 |
| (1,839) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:56:LYS:HG3 | 13 | 0.36 |
| (1,838) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:58:LYS:HB2 | 7 | 0.36 |
| (1,838) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 7 | 0.36 |
| (1,774) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:41:LYS:HB2 | 15 | 0.36 |
| (1,774) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:41:LYS:HD2 | 15 | 0.36 |
| (1,760) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:48:PRO:HB3 | 7 | 0.36 |
| (1,760) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:48:PRO:HG2 | 7 | 0.36 |
| (1,760) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:48:PRO:HB3 | 15 | 0.36 |
| (1,760) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:48:PRO:HG2 | 15 | 0.36 |
| (1,739) | 1:A:47:ASN:HD22 | 1:A:46:LYS:HD3 | 17 | 0.36 |
| (1,739) | 1:A:47:ASN:HD22 | 1:A:53:ALA:HB2 | 17 | 0.36 |
| (1,739) | 1:A:47:ASN:HD22 | 1:A:53:ALA:HB1 | 17 | 0.36 |
| (1,739) | 1:A:47:ASN:HD22 | 1:A:53:ALA:HB3 | 17 | 0.36 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:33:LYS:HB2 | 14 | 0.36 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:33:LYS:HB3 | 14 | 0.36 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:36:ARG:HG2 | 14 | 0.36 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 14 | 0.36 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:58:LYS:HB2 | 2 | 0.36 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:58:LYS:HB3 | 2 | 0.36 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB3 | 1:A:58:LYS:HB3 | 2 | 0.36 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:58:LYS:HB2 | 7 | 0.36 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:58:LYS:HB3 | 7 | 0.36 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB3 | 1:A:58:LYS:HB3 | 7 | 0.36 |
| (1,3002) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:46:LYS:HB3 | 10 | 0.36 |
| (1,3002) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:46:LYS:HB3 | 16 | 0.36 |
| (1,2912) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:62:ASN:HB2 | 6 | 0.36 |
| (1,2869) | 1:A:47:ASN:H | 1:A:46:LYS:HB3 | 11 | 0.36 |
| (1,2843) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:67:LEU:HB2 | 19 | 0.36 |
| (1,2802) | 1:A:6:GLN:H | 1:A:6:GLN:HA | 2 | 0.36 |
| (1,2802) | 1:A:6:GLN:H | 1:A:6:GLN:HA | 12 | 0.36 |
| (1,2792) | 1:A:49:ASP:H | 1:A:48:PRO:HB3 | 1 | 0.36 |
| (1,276) | 1:A:99:PHE:HB3 | 1:A:96:ASN:HA | 1 | 0.36 |
| (1,276) | 1:A:49:ASP:HB3 | 1:A:49:ASP:HA | 1 | 0.36 |
| (1,276) | 1:A:99:PHE:HB3 | 1:A:96:ASN:HA | 3 | 0.36 |
| (1,276) | 1:A:49:ASP:HB3 | 1:A:49:ASP:HA | 3 | 0.36 |
| (1,276) | 1:A:99:PHE:HB3 | 1:A:96:ASN:HA | 5 | 0.36 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,276) | 1:A:49:ASP:HB3 | 1:A:49:ASP:HA | 5 | 0.36 |
| (1,276) | 1:A:99:PHE:HB3 | 1:A:96:ASN:HA | 6 | 0.36 |
| (1,276) | 1:A:49:ASP:HB3 | 1:A:49:ASP:HA | 6 | 0.36 |
| (1,276) | 1:A:99:PHE:HB3 | 1:A:96:ASN:HA | 12 | 0.36 |
| (1,276) | 1:A:49:ASP:HB3 | 1:A:49:ASP:HA | 12 | 0.36 |
| (1,2733) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 19 | 0.36 |
| (1,2664) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:34:SER:HB2 | 16 | 0.36 |
| (1,2584) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:58:LYS:HA | 1 | 0.36 |
| (1,2584) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:58:LYS:HA | 3 | 0.36 |
| (1,2551) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:7:ARG:HG2 | 18 | 0.36 |
| (1,2403) | 1:A:89:GLN:HA | 1:A:89:GLN:HG3 | 13 | 0.36 |
| (1,2242) | 1:A:78:LYS:HG2 | 1:A:79:TYR:H | 6 | 0.36 |
| (1,1984) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:60:ILE:HA | 18 | 0.36 |
| (1,1931) | 1:A:56:LYS:HB3 | 1:A:53:ALA:HA | 12 | 0.36 |
| (1,1838) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:58:LYS:H | 1 | 0.36 |
| (1,1838) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:58:LYS:H | 5 | 0.36 |
| (1,1838) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:58:LYS:H | 15 | 0.36 |
| (1,1838) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:58:LYS:H | 17 | 0.36 |
| (1,1753) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:HB2 | 10 | 0.36 |
| (1,163) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HB2 | 1 | 0.36 |
| (1,163) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HB3 | 1 | 0.36 |
| (1,163) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HB2 | 11 | 0.36 |
| (1,163) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HB3 | 11 | 0.36 |
| (1,1508) | 1:A:58:LYS:HA | 1:A:58:LYS:HB3 | 1 | 0.36 |
| (1,1508) | 1:A:58:LYS:HA | 1:A:58:LYS:HB3 | 5 | 0.36 |
| (1,1508) | 1:A:58:LYS:HA | 1:A:58:LYS:HB3 | 8 | 0.36 |
| (1,1508) | 1:A:58:LYS:HA | 1:A:58:LYS:HB3 | 9 | 0.36 |
| (1,1508) | 1:A:58:LYS:HA | 1:A:58:LYS:HB3 | 17 | 0.36 |
| (1,1508) | 1:A:58:LYS:HA | 1:A:58:LYS:HB3 | 18 | 0.36 |
| (1,1335) | 1:A:20:LEU:HD22 | 1:A:22:LEU:HB2 | 12 | 0.36 |
| (1,1335) | 1:A:20:LEU:HD21 | 1:A:22:LEU:HB2 | 12 | 0.36 |
| (1,1335) | 1:A:20:LEU:HD23 | 1:A:22:LEU:HB2 | 12 | 0.36 |
| (1,1335) | 1:A:20:LEU:HD22 | 1:A:22:LEU:HB2 | 17 | 0.36 |
| (1,1335) | 1:A:20:LEU:HD21 | 1:A:22:LEU:HB2 | 17 | 0.36 |
| (1,1335) | 1:A:20:LEU:HD23 | 1:A:22:LEU:HB2 | 17 | 0.36 |
| (1,1197) | 1:A:67:LEU:HD22 | 1:A:73:ARG:HD3 | 8 | 0.36 |
| (1,1197) | 1:A:67:LEU:HD21 | 1:A:73:ARG:HD3 | 8 | 0.36 |
| (1,1197) | 1:A:67:LEU:HD23 | 1:A:73:ARG:HD3 | 8 | 0.36 |
| (1,1104) | 1:A:12:SER:HB2 | 1:A:14:GLU:H | 8 | 0.36 |
| (1,109) | 1:A:18:HIS:HB2 | 1:A:15:SER:HB3 | 9 | 0.36 |
| (1,109) | 1:A:18:HIS:HB3 | 1:A:15:SER:HB3 | 9 | 0.36 |
| (1,879) | 1:A:41:LYS:HD3 | 1:A:41:LYS:HA | 4 | 0.35 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:38:LEU:HD22 | 18 | 0.35 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:38:LEU:HD21 | 18 | 0.35 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:38:LEU:HD23 | 18 | 0.35 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:39:ALA:HB1 | 18 | 0.35 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:39:ALA:HB2 | 18 | 0.35 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:39:ALA:HB3 | 18 | 0.35 |
| (1,760) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:48:PRO:HB3 | 5 | 0.35 |
| (1,760) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:48:PRO:HG2 | 5 | 0.35 |
| (1,760) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:48:PRO:HB3 | 11 | 0.35 |
| (1,760) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:48:PRO:HG2 | 11 | 0.35 |
| (1,760) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:48:PRO:HB3 | 18 | 0.35 |
| (1,760) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:48:PRO:HG2 | 18 | 0.35 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:33:LYS:HB2 | 1 | 0.35 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:33:LYS:HB3 | 1 | 0.35 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:36:ARG:HG2 | 1 | 0.35 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 1 | 0.35 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:33:LYS:HB2 | 6 | 0.35 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:33:LYS:HB3 | 6 | 0.35 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:36:ARG:HG2 | 6 | 0.35 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 6 | 0.35 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:79:TYR:HB3 | 12 | 0.35 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:72:LYS:HE2 | 12 | 0.35 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:72:LYS:HE3 | 12 | 0.35 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD13 | 10 | 0.35 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD11 | 10 | 0.35 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD12 | 10 | 0.35 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB1 | 1:A:61:ASN:HA | 10 | 0.35 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB2 | 1:A:61:ASN:HA | 10 | 0.35 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB3 | 1:A:61:ASN:HA | 10 | 0.35 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG21 | 10 | 0.35 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG23 | 10 | 0.35 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG22 | 10 | 0.35 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:58:LYS:HB2 | 10 | 0.35 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:58:LYS:HB3 | 10 | 0.35 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB3 | 1:A:58:LYS:HB3 | 10 | 0.35 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:58:LYS:HB2 | 13 | 0.35 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:58:LYS:HB3 | 13 | 0.35 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB3 | 1:A:58:LYS:HB3 | 13 | 0.35 |
| (1,2912) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:62:ASN:HB2 | 7 | 0.35 |
| (1,276) | 1:A:99:PHE:HB3 | 1:A:96:ASN:HA | 8 | 0.35 |
| (1,276) | 1:A:49:ASP:HB3 | 1:A:49:ASP:HA | 8 | 0.35 |
| (1,276) | 1:A:99:PHE:HB3 | 1:A:96:ASN:HA | 10 | 0.35 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,276) | 1:A:49:ASP:HB3 | 1:A:49:ASP:HA | 10 | 0.35 |
| (1,276) | 1:A:99:PHE:HB3 | 1:A:96:ASN:HA | 11 | 0.35 |
| (1,276) | 1:A:49:ASP:HB3 | 1:A:49:ASP:HA | 11 | 0.35 |
| (1,276) | 1:A:99:PHE:HB3 | 1:A:96:ASN:HA | 14 | 0.35 |
| (1,276) | 1:A:49:ASP:HB3 | 1:A:49:ASP:HA | 14 | 0.35 |
| (1,276) | 1:A:99:PHE:HB3 | 1:A:96:ASN:HA | 17 | 0.35 |
| (1,276) | 1:A:49:ASP:HB3 | 1:A:49:ASP:HA | 17 | 0.35 |
| (1,276) | 1:A:99:PHE:HB3 | 1:A:96:ASN:HA | 18 | 0.35 |
| (1,276) | 1:A:49:ASP:HB3 | 1:A:49:ASP:HA | 18 | 0.35 |
| (1,2551) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:7:ARG:HG2 | 10 | 0.35 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG12 | 9 | 0.35 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG11 | 9 | 0.35 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG13 | 9 | 0.35 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG22 | 16 | 0.35 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG21 | 16 | 0.35 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG23 | 16 | 0.35 |
| (1,2006) | 1:A:78:LYS:HD2 | 1:A:75:ILE:HA | 2 | 0.35 |
| (1,1984) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:60:ILE:HA | 11 | 0.35 |
| (1,1984) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:60:ILE:HA | 19 | 0.35 |
| (1,1978) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:56:LYS:HB2 | 14 | 0.35 |
| (1,1952) | 1:A:78:LYS:HG2 | 1:A:78:LYS:H | 4 | 0.35 |
| (1,1952) | 1:A:78:LYS:HG2 | 1:A:78:LYS:H | 6 | 0.35 |
| (1,1838) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:58:LYS:H | 4 | 0.35 |
| (1,1838) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:58:LYS:H | 6 | 0.35 |
| (1,1508) | 1:A:58:LYS:HA | 1:A:58:LYS:HB3 | 3 | 0.35 |
| (1,1508) | 1:A:58:LYS:HA | 1:A:58:LYS:HB3 | 15 | 0.35 |
| (1,1508) | 1:A:58:LYS:HA | 1:A:58:LYS:HB3 | 19 | 0.35 |
| (1,1508) | 1:A:58:LYS:HA | 1:A:58:LYS:HB3 | 20 | 0.35 |
| (1,1108) | 1:A:12:SER:H | 1:A:12:SER:HB3 | 8 | 0.35 |
| (1,1104) | 1:A:12:SER:HB2 | 1:A:14:GLU:H | 3 | 0.35 |
| (1,109) | 1:A:18:HIS:HB2 | 1:A:15:SER:HB3 | 17 | 0.35 |
| (1,109) | 1:A:18:HIS:HB3 | 1:A:15:SER:HB3 | 17 | 0.35 |
| (1,996) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:6:GLN:HG2 | 14 | 0.34 |
| (1,989) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:82:LEU:HD12 | 17 | 0.34 |
| (1,989) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:82:LEU:HD11 | 17 | 0.34 |
| (1,989) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:82:LEU:HD13 | 17 | 0.34 |
| (1,987) | 1:A:45:ASP:H | 1:A:44:PRO:HG3 | 8 | 0.34 |
| (1,987) | 1:A:45:ASP:H | 1:A:44:PRO:HG3 | 16 | 0.34 |
| (1,986) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:43:HIS:HD2 | 19 | 0.34 |
| (1,912) | 1:A:46:LYS:HB3 | 1:A:43:HIS:HB3 | 8 | 0.34 |
| (1,912) | 1:A:46:LYS:HB3 | 1:A:43:HIS:HB3 | 17 | 0.34 |
| (1,877) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:25:ASN:HA | 12 | 0.34 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:38:LEU:HD22 | 1 | 0.34 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:38:LEU:HD21 | 1 | 0.34 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:38:LEU:HD23 | 1 | 0.34 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:39:ALA:HB1 | 1 | 0.34 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:39:ALA:HB2 | 1 | 0.34 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:39:ALA:HB3 | 1 | 0.34 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:38:LEU:HD22 | 8 | 0.34 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:38:LEU:HD21 | 8 | 0.34 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:38:LEU:HD23 | 8 | 0.34 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:39:ALA:HB1 | 8 | 0.34 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:39:ALA:HB2 | 8 | 0.34 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:39:ALA:HB3 | 8 | 0.34 |
| (1,760) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:48:PRO:HB3 | 6 | 0.34 |
| (1,760) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:48:PRO:HG2 | 6 | 0.34 |
| (1,760) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:48:PRO:HB3 | 12 | 0.34 |
| (1,760) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:48:PRO:HG2 | 12 | 0.34 |
| (1,760) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:48:PRO:HB3 | 14 | 0.34 |
| (1,760) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:48:PRO:HG2 | 14 | 0.34 |
| (1,727) | 1:A:99:PHE:H | 1:A:95:VAL:HG21 | 15 | 0.34 |
| (1,727) | 1:A:99:PHE:H | 1:A:95:VAL:HG22 | 15 | 0.34 |
| (1,727) | 1:A:99:PHE:H | 1:A:95:VAL:HG23 | 15 | 0.34 |
| (1,727) | 1:A:99:PHE:H | 1:A:100:VAL:HG13 | 15 | 0.34 |
| (1,727) | 1:A:99:PHE:H | 1:A:100:VAL:HG11 | 15 | 0.34 |
| (1,727) | 1:A:99:PHE:H | 1:A:100:VAL:HG12 | 15 | 0.34 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:33:LYS:HB2 | 4 | 0.34 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:33:LYS:HB3 | 4 | 0.34 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:36:ARG:HG2 | 4 | 0.34 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 4 | 0.34 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:33:LYS:HB2 | 20 | 0.34 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:33:LYS:HB3 | 20 | 0.34 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:36:ARG:HG2 | 20 | 0.34 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 20 | 0.34 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:69:ASP:HB2 | 19 | 0.34 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:69:ASP:HB2 | 19 | 0.34 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:69:ASP:HB2 | 19 | 0.34 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:73:ARG:HD3 | 19 | 0.34 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:73:ARG:HD3 | 19 | 0.34 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:73:ARG:HD3 | 19 | 0.34 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:58:LYS:HB2 | 6 | 0.34 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:58:LYS:HB3 | 6 | 0.34 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB3 | 1:A:58:LYS:HB3 | 6 | 0.34 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:55:ASP:HB2 | 13 | 0.34 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:56:LYS:HE2 | 13 | 0.34 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:56:LYS:HE3 | 13 | 0.34 |
| (1,3090) | 1:A:60:ILE:H | 1:A:59:GLU:HB3 | 4 | 0.34 |
| (1,3090) | 1:A:60:ILE:H | 1:A:59:GLU:HB3 | 5 | 0.34 |
| (1,3002) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:46:LYS:HB3 | 2 | 0.34 |
| (1,3002) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:46:LYS:HB3 | 4 | 0.34 |
| (1,3002) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:46:LYS:HB3 | 6 | 0.34 |
| (1,3002) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:46:LYS:HB3 | 7 | 0.34 |
| (1,3002) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:46:LYS:HB3 | 15 | 0.34 |
| (1,3002) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:46:LYS:HB3 | 19 | 0.34 |
| (1,2869) | 1:A:47:ASN:H | 1:A:46:LYS:HB3 | 20 | 0.34 |
| (1,2867) | 1:A:47:ASN:H | 1:A:47:ASN:HB3 | 3 | 0.34 |
| (1,2843) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:67:LEU:HB2 | 1 | 0.34 |
| (1,2843) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:67:LEU:HB2 | 2 | 0.34 |
| (1,2817) | 1:A:89:GLN:H | 1:A:89:GLN:HG3 | 2 | 0.34 |
| (1,2817) | 1:A:89:GLN:H | 1:A:89:GLN:HG3 | 17 | 0.34 |
| (1,2802) | 1:A:6:GLN:H | 1:A:6:GLN:HA | 1 | 0.34 |
| (1,2802) | 1:A:6:GLN:H | 1:A:6:GLN:HA | 20 | 0.34 |
| (1,2792) | 1:A:49:ASP:H | 1:A:48:PRO:HB3 | 3 | 0.34 |
| (1,2792) | 1:A:49:ASP:H | 1:A:48:PRO:HB3 | 6 | 0.34 |
| (1,2792) | 1:A:49:ASP:H | 1:A:48:PRO:HB3 | 8 | 0.34 |
| (1,2792) | 1:A:49:ASP:H | 1:A:48:PRO:HB3 | 9 | 0.34 |
| (1,2792) | 1:A:49:ASP:H | 1:A:48:PRO:HB3 | 12 | 0.34 |
| (1,2792) | 1:A:49:ASP:H | 1:A:48:PRO:HB3 | 13 | 0.34 |
| (1,2551) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:7:ARG:HG2 | 6 | 0.34 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG12 | 20 | 0.34 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG11 | 20 | 0.34 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG13 | 20 | 0.34 |
| (1,1984) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:60:ILE:HA | 9 | 0.34 |
| (1,1984) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:60:ILE:HA | 10 | 0.34 |
| (1,1978) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:56:LYS:HB2 | 18 | 0.34 |
| (1,1952) | 1:A:78:LYS:HG2 | 1:A:78:LYS:H | 10 | 0.34 |
| (1,1931) | 1:A:56:LYS:HB3 | 1:A:53:ALA:HA | 2 | 0.34 |
| (1,1838) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:58:LYS:H | 9 | 0.34 |
| (1,1733) | 1:A:99:PHE:HB2 | 1:A:100:VAL:HG13 | 18 | 0.34 |
| (1,1733) | 1:A:99:PHE:HB2 | 1:A:100:VAL:HG11 | 18 | 0.34 |
| (1,1733) | 1:A:99:PHE:HB2 | 1:A:100:VAL:HG12 | 18 | 0.34 |
| (1,1571) | 1:A:58:LYS:HG2 | 1:A:58:LYS:HA | 14 | 0.34 |
| (1,1508) | 1:A:58:LYS:HA | 1:A:58:LYS:HB3 | 11 | 0.34 |
| (1,1135) | 1:A:92:GLU:HG3 | 1:A:92:GLU:HA | 16 | 0.34 |
| (1,1108) | 1:A:12:SER:H | 1:A:12:SER:HB3 | 6 | 0.34 |
| (1,109) | 1:A:18:HIS:HB2 | 1:A:15:SER:HB3 | 8 | 0.34 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,109) | 1:A:18:HIS:HB3 | 1:A:15:SER:HB3 | 8 | 0.34 |
| (1,1057) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:6:GLN:HG3 | 19 | 0.34 |
| (1,1057) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:6:GLN:HG3 | 19 | 0.34 |
| (1,1057) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:6:GLN:HG3 | 19 | 0.34 |
| (1,1011) | 1:A:8:SER:HB2 | 1:A:8:SER:H | 12 | 0.34 |
| (1,987) | 1:A:45:ASP:H | 1:A:44:PRO:HG3 | 6 | 0.33 |
| (1,877) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:25:ASN:HA | 3 | 0.33 |
| (1,877) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:25:ASN:HA | 17 | 0.33 |
| (1,839) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:56:LYS:HB3 | 2 | 0.33 |
| (1,839) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:56:LYS:HG3 | 2 | 0.33 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:38:LEU:HD22 | 19 | 0.33 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:38:LEU:HD21 | 19 | 0.33 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:38:LEU:HD23 | 19 | 0.33 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:39:ALA:HB1 | 19 | 0.33 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:39:ALA:HB2 | 19 | 0.33 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:39:ALA:HB3 | 19 | 0.33 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:38:LEU:HD22 | 20 | 0.33 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:38:LEU:HD21 | 20 | 0.33 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:38:LEU:HD23 | 20 | 0.33 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:39:ALA:HB1 | 20 | 0.33 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:39:ALA:HB2 | 20 | 0.33 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:39:ALA:HB3 | 20 | 0.33 |
| (1,760) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:48:PRO:HB3 | 1 | 0.33 |
| (1,760) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:48:PRO:HG2 | 1 | 0.33 |
| (1,760) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:48:PRO:HB3 | 3 | 0.33 |
| (1,760) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:48:PRO:HG2 | 3 | 0.33 |
| (1,760) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:48:PRO:HB3 | 10 | 0.33 |
| (1,760) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:48:PRO:HG2 | 10 | 0.33 |
| (1,760) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:48:PRO:HB3 | 17 | 0.33 |
| (1,760) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:48:PRO:HG2 | 17 | 0.33 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:33:LYS:HB2 | 3 | 0.33 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:33:LYS:HB3 | 3 | 0.33 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:36:ARG:HG2 | 3 | 0.33 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 3 | 0.33 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:33:LYS:HB2 | 18 | 0.33 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:33:LYS:HB3 | 18 | 0.33 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:36:ARG:HG2 | 18 | 0.33 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 18 | 0.33 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD13 | 16 | 0.33 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD11 | 16 | 0.33 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD12 | 16 | 0.33 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB1 | 1:A:61:ASN:HA | 16 | 0.33 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB2 | 1:A:61:ASN:HA | 16 | 0.33 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB3 | 1:A:61:ASN:HA | 16 | 0.33 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG21 | 16 | 0.33 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG23 | 16 | 0.33 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG22 | 16 | 0.33 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:55:ASP:HB2 | 20 | 0.33 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:56:LYS:HE2 | 20 | 0.33 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:56:LYS:HE3 | 20 | 0.33 |
| (1,3002) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:46:LYS:HB3 | 3 | 0.33 |
| (1,3002) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:46:LYS:HB3 | 5 | 0.33 |
| (1,3002) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:46:LYS:HB3 | 9 | 0.33 |
| (1,3002) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:46:LYS:HB3 | 12 | 0.33 |
| (1,3002) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:46:LYS:HB3 | 13 | 0.33 |
| (1,2867) | 1:A:47:ASN:H | 1:A:47:ASN:HB3 | 1 | 0.33 |
| (1,2867) | 1:A:47:ASN:H | 1:A:47:ASN:HB3 | 10 | 0.33 |
| (1,2843) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:67:LEU:HB2 | 8 | 0.33 |
| (1,2592) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HB3 | 16 | 0.33 |
| (1,2584) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:58:LYS:HA | 16 | 0.33 |
| (1,2551) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:7:ARG:HG2 | 17 | 0.33 |
| (1,2405) | 1:A:90:PHE:H | 1:A:89:GLN:HG3 | 18 | 0.33 |
| (1,2403) | 1:A:89:GLN:HA | 1:A:89:GLN:HG3 | 1 | 0.33 |
| (1,2403) | 1:A:89:GLN:HA | 1:A:89:GLN:HG3 | 3 | 0.33 |
| (1,2403) | 1:A:89:GLN:HA | 1:A:89:GLN:HG3 | 6 | 0.33 |
| (1,2403) | 1:A:89:GLN:HA | 1:A:89:GLN:HG3 | 7 | 0.33 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG12 | 14 | 0.33 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG11 | 14 | 0.33 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG13 | 14 | 0.33 |
| (1,2271) | 1:A:81:SER:HB3 | 1:A:9:LEU:HB3 | 9 | 0.33 |
| (1,2242) | 1:A:78:LYS:HG2 | 1:A:79:TYR:H | 10 | 0.33 |
| (1,2242) | 1:A:78:LYS:HG2 | 1:A:79:TYR:H | 16 | 0.33 |
| (1,2242) | 1:A:78:LYS:HG2 | 1:A:79:TYR:H | 19 | 0.33 |
| (1,1984) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:60:ILE:HA | 15 | 0.33 |
| (1,1980) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:19:VAL:HG12 | 2 | 0.33 |
| (1,1980) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:19:VAL:HG11 | 2 | 0.33 |
| (1,1980) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:19:VAL:HG13 | 2 | 0.33 |
| (1,1952) | 1:A:78:LYS:HG2 | 1:A:78:LYS:H | 8 | 0.33 |
| (1,1944) | 1:A:56:LYS:HD3 | 1:A:56:LYS:H | 20 | 0.33 |
| (1,1931) | 1:A:56:LYS:HB3 | 1:A:53:ALA:HA | 14 | 0.33 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB2 | 1:A:47:ASN:HB3 | 11 | 0.33 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB1 | 1:A:47:ASN:HB3 | 11 | 0.33 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB3 | 1:A:47:ASN:HB3 | 11 | 0.33 |
| (1,1838) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:58:LYS:H | 2 | 0.33 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1838) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:58:LYS:H | 16 | 0.33 |
| (1,1733) | 1:A:99:PHE:HB2 | 1:A:100:VAL:HG13 | 14 | 0.33 |
| (1,1733) | 1:A:99:PHE:HB2 | 1:A:100:VAL:HG11 | 14 | 0.33 |
| (1,1733) | 1:A:99:PHE:HB2 | 1:A:100:VAL:HG12 | 14 | 0.33 |
| (1,1571) | 1:A:58:LYS:HG2 | 1:A:58:LYS:HA | 1 | 0.33 |
| (1,1571) | 1:A:58:LYS:HG2 | 1:A:58:LYS:HA | 5 | 0.33 |
| (1,1571) | 1:A:58:LYS:HG2 | 1:A:58:LYS:HA | 18 | 0.33 |
| (1,1571) | 1:A:58:LYS:HG2 | 1:A:58:LYS:HA | 20 | 0.33 |
| (1,1335) | 1:A:20:LEU:HD22 | 1:A:22:LEU:HB2 | 5 | 0.33 |
| (1,1335) | 1:A:20:LEU:HD21 | 1:A:22:LEU:HB2 | 5 | 0.33 |
| (1,1335) | 1:A:20:LEU:HD23 | 1:A:22:LEU:HB2 | 5 | 0.33 |
| (1,1197) | 1:A:67:LEU:HD22 | 1:A:73:ARG:HD3 | 15 | 0.33 |
| (1,1197) | 1:A:67:LEU:HD21 | 1:A:73:ARG:HD3 | 15 | 0.33 |
| (1,1197) | 1:A:67:LEU:HD23 | 1:A:73:ARG:HD3 | 15 | 0.33 |
| (1,1108) | 1:A:12:SER:H | 1:A:12:SER:HB3 | 2 | 0.33 |
| (1,1108) | 1:A:12:SER:H | 1:A:12:SER:HB3 | 3 | 0.33 |
| (1,1108) | 1:A:12:SER:H | 1:A:12:SER:HB3 | 12 | 0.33 |
| (1,996) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:6:GLN:HG2 | 5 | 0.32 |
| (1,987) | 1:A:45:ASP:H | 1:A:44:PRO:HG3 | 1 | 0.32 |
| (1,987) | 1:A:45:ASP:H | 1:A:44:PRO:HG3 | 4 | 0.32 |
| (1,987) | 1:A:45:ASP:H | 1:A:44:PRO:HG3 | 10 | 0.32 |
| (1,912) | 1:A:46:LYS:HB3 | 1:A:43:HIS:HB3 | 1 | 0.32 |
| (1,877) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:25:ASN:HA | 6 | 0.32 |
| (1,877) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:25:ASN:HA | 7 | 0.32 |
| (1,877) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:25:ASN:HA | 13 | 0.32 |
| (1,877) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:25:ASN:HA | 15 | 0.32 |
| (1,877) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:25:ASN:HA | 18 | 0.32 |
| (1,839) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:56:LYS:HB3 | 6 | 0.32 |
| (1,839) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:56:LYS:HG3 | 6 | 0.32 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:38:LEU:HD22 | 16 | 0.32 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:38:LEU:HD21 | 16 | 0.32 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:38:LEU:HD23 | 16 | 0.32 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:39:ALA:HB1 | 16 | 0.32 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:39:ALA:HB2 | 16 | 0.32 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:39:ALA:HB3 | 16 | 0.32 |
| (1,760) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:48:PRO:HB3 | 2 | 0.32 |
| (1,760) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:48:PRO:HG2 | 2 | 0.32 |
| (1,760) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:48:PRO:HB3 | 9 | 0.32 |
| (1,760) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:48:PRO:HG2 | 9 | 0.32 |
| (1,760) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:48:PRO:HB3 | 13 | 0.32 |
| (1,760) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:48:PRO:HG2 | 13 | 0.32 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:33:LYS:HB2 | 7 | 0.32 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:33:LYS:HB3 | 7 | 0.32 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:36:ARG:HG2 | 7 | 0.32 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 7 | 0.32 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:33:LYS:HB2 | 8 | 0.32 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:33:LYS:HB3 | 8 | 0.32 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:36:ARG:HG2 | 8 | 0.32 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 8 | 0.32 |
| (1,607) | 1:A:96:ASN:H | 1:A:95:VAL:HG12 | 8 | 0.32 |
| (1,607) | 1:A:96:ASN:H | 1:A:95:VAL:HG11 | 8 | 0.32 |
| (1,607) | 1:A:96:ASN:H | 1:A:95:VAL:HG13 | 8 | 0.32 |
| (1,607) | 1:A:96:ASN:H | 1:A:97:THR:HG22 | 8 | 0.32 |
| (1,607) | 1:A:96:ASN:H | 1:A:97:THR:HG21 | 8 | 0.32 |
| (1,607) | 1:A:96:ASN:H | 1:A:97:THR:HG23 | 8 | 0.32 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:79:TYR:HB3 | 19 | 0.32 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:72:LYS:HE2 | 19 | 0.32 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:72:LYS:HE3 | 19 | 0.32 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD13 | 3 | 0.32 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD11 | 3 | 0.32 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD12 | 3 | 0.32 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB1 | 1:A:61:ASN:HA | 3 | 0.32 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB2 | 1:A:61:ASN:HA | 3 | 0.32 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB3 | 1:A:61:ASN:HA | 3 | 0.32 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG21 | 3 | 0.32 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG23 | 3 | 0.32 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG22 | 3 | 0.32 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:58:LYS:HB2 | 3 | 0.32 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:58:LYS:HB3 | 3 | 0.32 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB3 | 1:A:58:LYS:HB3 | 3 | 0.32 |
| (1,3090) | 1:A:60:ILE:H | 1:A:59:GLU:HB3 | 13 | 0.32 |
| (1,3002) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:46:LYS:HB3 | 8 | 0.32 |
| (1,3002) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:46:LYS:HB3 | 11 | 0.32 |
| (1,3002) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:46:LYS:HB3 | 14 | 0.32 |
| (1,3002) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:46:LYS:HB3 | 18 | 0.32 |
| (1,2984) | 1:A:73:ARG:H | 1:A:73:ARG:HD3 | 18 | 0.32 |
| (1,2947) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:44:PRO:HB2 | 20 | 0.32 |
| (1,2843) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:67:LEU:HB2 | 7 | 0.32 |
| (1,2817) | 1:A:89:GLN:H | 1:A:89:GLN:HG3 | 12 | 0.32 |
| (1,2792) | 1:A:49:ASP:H | 1:A:48:PRO:HB3 | 11 | 0.32 |
| (1,2792) | 1:A:49:ASP:H | 1:A:48:PRO:HB3 | 15 | 0.32 |
| (1,276) | 1:A:99:PHE:HB3 | 1:A:96:ASN:HA | 4 | 0.32 |
| (1,276) | 1:A:49:ASP:HB3 | 1:A:49:ASP:HA | 4 | 0.32 |
| (1,2584) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:58:LYS:HA | 20 | 0.32 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2448) | 1:A:100:VAL:HB | 1:A:100:VAL:H | 6 | 0.32 |
| (1,2405) | 1:A:90:PHE:H | 1:A:89:GLN:HG3 | 1 | 0.32 |
| (1,2405) | 1:A:90:PHE:H | 1:A:89:GLN:HG3 | 19 | 0.32 |
| (1,2403) | 1:A:89:GLN:HA | 1:A:89:GLN:HG3 | 4 | 0.32 |
| (1,2403) | 1:A:89:GLN:HA | 1:A:89:GLN:HG3 | 9 | 0.32 |
| (1,2403) | 1:A:89:GLN:HA | 1:A:89:GLN:HG3 | 19 | 0.32 |
| (1,2397) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:88:GLU:HB3 | 6 | 0.32 |
| (1,2397) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:88:GLU:HB3 | 13 | 0.32 |
| (1,2265) | 1:A:81:SER:HA | 1:A:84:LEU:HB3 | 18 | 0.32 |
| (1,2242) | 1:A:78:LYS:HG2 | 1:A:79:TYR:H | 4 | 0.32 |
| (1,2242) | 1:A:78:LYS:HG2 | 1:A:79:TYR:H | 8 | 0.32 |
| (1,2242) | 1:A:78:LYS:HG2 | 1:A:79:TYR:H | 9 | 0.32 |
| (1,2242) | 1:A:78:LYS:HG2 | 1:A:79:TYR:H | 11 | 0.32 |
| (1,2006) | 1:A:78:LYS:HD2 | 1:A:75:ILE:HA | 5 | 0.32 |
| (1,1838) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:58:LYS:H | 14 | 0.32 |
| (1,1596) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD11 | 3 | 0.32 |
| (1,1596) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD12 | 3 | 0.32 |
| (1,1596) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD13 | 3 | 0.32 |
| (1,1508) | 1:A:58:LYS:HA | 1:A:58:LYS:HB3 | 12 | 0.32 |
| (1,1046) | 1:A:85:TYR:H | 1:A:9:LEU:HD11 | 15 | 0.32 |
| (1,1046) | 1:A:85:TYR:H | 1:A:9:LEU:HD13 | 15 | 0.32 |
| (1,1046) | 1:A:85:TYR:H | 1:A:9:LEU:HD12 | 15 | 0.32 |
| (1,987) | 1:A:45:ASP:H | 1:A:44:PRO:HG3 | 7 | 0.31 |
| (1,987) | 1:A:45:ASP:H | 1:A:44:PRO:HG3 | 9 | 0.31 |
| (1,987) | 1:A:45:ASP:H | 1:A:44:PRO:HG3 | 14 | 0.31 |
| (1,986) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:43:HIS:HD2 | 11 | 0.31 |
| (1,978) | 1:A:50:ASN:HD22 | 1:A:52:GLU:HB3 | 1 | 0.31 |
| (1,877) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:25:ASN:HA | 14 | 0.31 |
| (1,760) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:48:PRO:HB3 | 19 | 0.31 |
| (1,760) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:48:PRO:HG2 | 19 | 0.31 |
| (1,3090) | 1:A:60:ILE:H | 1:A:59:GLU:HB3 | 3 | 0.31 |
| (1,2988) | 1:A:73:ARG:H | 1:A:73:ARG:HB3 | 11 | 0.31 |
| (1,2947) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:44:PRO:HB2 | 5 | 0.31 |
| (1,2869) | 1:A:47:ASN:H | 1:A:46:LYS:HB3 | 3 | 0.31 |
| (1,2867) | 1:A:47:ASN:H | 1:A:47:ASN:HB3 | 4 | 0.31 |
| (1,2867) | 1:A:47:ASN:H | 1:A:47:ASN:HB3 | 6 | 0.31 |
| (1,2867) | 1:A:47:ASN:H | 1:A:47:ASN:HB3 | 7 | 0.31 |
| (1,2867) | 1:A:47:ASN:H | 1:A:47:ASN:HB3 | 13 | 0.31 |
| (1,2867) | 1:A:47:ASN:H | 1:A:47:ASN:HB3 | 15 | 0.31 |
| (1,2867) | 1:A:47:ASN:H | 1:A:47:ASN:HB3 | 16 | 0.31 |
| (1,2867) | 1:A:47:ASN:H | 1:A:47:ASN:HB3 | 19 | 0.31 |
| (1,2843) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:67:LEU:HB2 | 4 | 0.31 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2843) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:67:LEU:HB2 | 16 | 0.31 |
| (1,2817) | 1:A:89:GLN:H | 1:A:89:GLN:HG3 | 6 | 0.31 |
| (1,2792) | 1:A:49:ASP:H | 1:A:48:PRO:HB3 | 14 | 0.31 |
| (1,2792) | 1:A:49:ASP:H | 1:A:48:PRO:HB3 | 17 | 0.31 |
| (1,276) | 1:A:99:PHE:HB3 | 1:A:96:ASN:HA | 16 | 0.31 |
| (1,276) | 1:A:49:ASP:HB3 | 1:A:49:ASP:HA | 16 | 0.31 |
| (1,2584) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:58:LYS:HA | 10 | 0.31 |
| (1,2403) | 1:A:89:GLN:HA | 1:A:89:GLN:HG3 | 8 | 0.31 |
| (1,2403) | 1:A:89:GLN:HA | 1:A:89:GLN:HG3 | 16 | 0.31 |
| (1,2403) | 1:A:89:GLN:HA | 1:A:89:GLN:HG3 | 18 | 0.31 |
| (1,2403) | 1:A:89:GLN:HA | 1:A:89:GLN:HG3 | 20 | 0.31 |
| (1,2356) | 1:A:86:VAL:HA | 1:A:89:GLN:HG2 | 19 | 0.31 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG12 | 4 | 0.31 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG11 | 4 | 0.31 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG13 | 4 | 0.31 |
| (1,2242) | 1:A:78:LYS:HG2 | 1:A:79:TYR:H | 1 | 0.31 |
| (1,2242) | 1:A:78:LYS:HG2 | 1:A:79:TYR:H | 13 | 0.31 |
| (1,2242) | 1:A:78:LYS:HG2 | 1:A:79:TYR:H | 14 | 0.31 |
| (1,2242) | 1:A:78:LYS:HG2 | 1:A:79:TYR:H | 18 | 0.31 |
| (1,221) | 1:A:34:SER:HB3 | 1:A:37:LYS:HE2 | 1 | 0.31 |
| (1,221) | 1:A:34:SER:HB3 | 1:A:37:LYS:HE3 | 1 | 0.31 |
| (1,1978) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:56:LYS:HB2 | 8 | 0.31 |
| (1,1659) | 1:A:41:LYS:HD3 | 1:A:38:LEU:HD22 | 3 | 0.31 |
| (1,1659) | 1:A:41:LYS:HD3 | 1:A:38:LEU:HD21 | 3 | 0.31 |
| (1,1659) | 1:A:41:LYS:HD3 | 1:A:38:LEU:HD23 | 3 | 0.31 |
| (1,1501) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:35:TYR:HB2 | 8 | 0.31 |
| (1,1412) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:23:ASP:HB3 | 16 | 0.31 |
| (1,1335) | 1:A:20:LEU:HD22 | 1:A:22:LEU:HB2 | 9 | 0.31 |
| (1,1335) | 1:A:20:LEU:HD21 | 1:A:22:LEU:HB2 | 9 | 0.31 |
| (1,1335) | 1:A:20:LEU:HD23 | 1:A:22:LEU:HB2 | 9 | 0.31 |
| (1,1108) | 1:A:12:SER:H | 1:A:12:SER:HB3 | 9 | 0.31 |
| (1,1011) | 1:A:8:SER:HB2 | 1:A:8:SER:H | 9 | 0.31 |
| (1,987) | 1:A:45:ASP:H | 1:A:44:PRO:HG3 | 5 | 0.3 |
| (1,987) | 1:A:45:ASP:H | 1:A:44:PRO:HG3 | 13 | 0.3 |
| (1,966) | 1:A:99:PHE:HB2 | 1:A:99:PHE:H | 13 | 0.3 |
| (1,943) | 1:A:81:SER:HB3 | 1:A:10:SEP:H | 15 | 0.3 |
| (1,915) | 1:A:46:LYS:HG3 | 1:A:46:LYS:HA | 6 | 0.3 |
| (1,877) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:25:ASN:HA | 8 | 0.3 |
| (1,864) | 1:A:47:ASN:HB3 | 1:A:47:ASN:HD22 | 11 | 0.3 |
| (1,839) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:56:LYS:HB3 | 9 | 0.3 |
| (1,839) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:56:LYS:HG3 | 9 | 0.3 |
| (1,760) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:48:PRO:HB3 | 8 | 0.3 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,760) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:48:PRO:HG2 | 8 | 0.3 |
| (1,739) | 1:A:47:ASN:HD22 | 1:A:46:LYS:HD3 | 2 | 0.3 |
| (1,739) | 1:A:47:ASN:HD22 | 1:A:53:ALA:HB2 | 2 | 0.3 |
| (1,739) | 1:A:47:ASN:HD22 | 1:A:53:ALA:HB1 | 2 | 0.3 |
| (1,739) | 1:A:47:ASN:HD22 | 1:A:53:ALA:HB3 | 2 | 0.3 |
| (1,657) | 1:A:78:LYS:H | 1:A:6:GLN:HG2 | 15 | 0.3 |
| (1,657) | 1:A:78:LYS:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 15 | 0.3 |
| (1,657) | 1:A:78:LYS:H | 1:A:92:GLU:HG2 | 15 | 0.3 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:33:LYS:HB2 | 19 | 0.3 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:33:LYS:HB3 | 19 | 0.3 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:36:ARG:HG2 | 19 | 0.3 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 19 | 0.3 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD13 | 19 | 0.3 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD11 | 19 | 0.3 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD12 | 19 | 0.3 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB1 | 1:A:61:ASN:HA | 19 | 0.3 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB2 | 1:A:61:ASN:HA | 19 | 0.3 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB3 | 1:A:61:ASN:HA | 19 | 0.3 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG21 | 19 | 0.3 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG23 | 19 | 0.3 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG22 | 19 | 0.3 |
| (1,478) | 1:A:88:GLU:HG2 | 1:A:84:LEU:HD13 | 4 | 0.3 |
| (1,478) | 1:A:88:GLU:HG2 | 1:A:84:LEU:HD11 | 4 | 0.3 |
| (1,478) | 1:A:88:GLU:HG2 | 1:A:84:LEU:HD12 | 4 | 0.3 |
| (1,478) | 1:A:88:GLU:HG2 | 1:A:84:LEU:HD21 | 4 | 0.3 |
| (1,478) | 1:A:88:GLU:HG2 | 1:A:84:LEU:HD22 | 4 | 0.3 |
| (1,478) | 1:A:88:GLU:HG2 | 1:A:84:LEU:HD23 | 4 | 0.3 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:55:ASP:HB2 | 18 | 0.3 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:56:LYS:HE2 | 18 | 0.3 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:56:LYS:HE3 | 18 | 0.3 |
| (1,3090) | 1:A:60:ILE:H | 1:A:59:GLU:HB3 | 2 | 0.3 |
| (1,3090) | 1:A:60:ILE:H | 1:A:59:GLU:HB3 | 6 | 0.3 |
| (1,3002) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:46:LYS:HB3 | 1 | 0.3 |
| (1,3002) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:46:LYS:HB3 | 20 | 0.3 |
| (1,2947) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:44:PRO:HB2 | 12 | 0.3 |
| (1,2947) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:44:PRO:HB2 | 13 | 0.3 |
| (1,2947) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:44:PRO:HB2 | 15 | 0.3 |
| (1,2869) | 1:A:47:ASN:H | 1:A:46:LYS:HB3 | 16 | 0.3 |
| (1,2817) | 1:A:89:GLN:H | 1:A:89:GLN:HG3 | 10 | 0.3 |
| (1,2792) | 1:A:49:ASP:H | 1:A:48:PRO:HB3 | 2 | 0.3 |
| (1,2792) | 1:A:49:ASP:H | 1:A:48:PRO:HB3 | 5 | 0.3 |
| (1,2792) | 1:A:49:ASP:H | 1:A:48:PRO:HB3 | 10 | 0.3 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2792) | 1:A:49:ASP:H | 1:A:48:PRO:HB3 | 19 | 0.3 |
| (1,2733) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 14 | 0.3 |
| (1,2584) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:58:LYS:HA | 8 | 0.3 |
| (1,2536) | 1:A:99:PHE:HB3 | 1:A:96:ASN:HA | 8 | 0.3 |
| (1,2403) | 1:A:89:GLN:HA | 1:A:89:GLN:HG3 | 5 | 0.3 |
| (1,2403) | 1:A:89:GLN:HA | 1:A:89:GLN:HG3 | 11 | 0.3 |
| (1,2403) | 1:A:89:GLN:HA | 1:A:89:GLN:HG3 | 12 | 0.3 |
| (1,2403) | 1:A:89:GLN:HA | 1:A:89:GLN:HG3 | 15 | 0.3 |
| (1,2356) | 1:A:86:VAL:HA | 1:A:89:GLN:HG2 | 4 | 0.3 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG12 | 3 | 0.3 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG11 | 3 | 0.3 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG13 | 3 | 0.3 |
| (1,2271) | 1:A:81:SER:HB3 | 1:A:9:LEU:HB3 | 14 | 0.3 |
| (1,2271) | 1:A:81:SER:HB3 | 1:A:9:LEU:HB3 | 19 | 0.3 |
| (1,2242) | 1:A:78:LYS:HG2 | 1:A:79:TYR:H | 3 | 0.3 |
| (1,2242) | 1:A:78:LYS:HG2 | 1:A:79:TYR:H | 5 | 0.3 |
| (1,2242) | 1:A:78:LYS:HG2 | 1:A:79:TYR:H | 20 | 0.3 |
| (1,221) | 1:A:34:SER:HB3 | 1:A:37:LYS:HE2 | 8 | 0.3 |
| (1,221) | 1:A:34:SER:HB3 | 1:A:37:LYS:HE3 | 8 | 0.3 |
| (1,221) | 1:A:34:SER:HB3 | 1:A:37:LYS:HE2 | 20 | 0.3 |
| (1,221) | 1:A:34:SER:HB3 | 1:A:37:LYS:HE3 | 20 | 0.3 |
| (1,1974) | 1:A:59:GLU:HA | 1:A:58:LYS:HG3 | 10 | 0.3 |
| (1,1952) | 1:A:78:LYS:HG2 | 1:A:78:LYS:H | 9 | 0.3 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB2 | 18 | 0.3 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB1 | 18 | 0.3 |
| (1,1875) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:53:ALA:HB3 | 18 | 0.3 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB2 | 1:A:47:ASN:HB3 | 1 | 0.3 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB1 | 1:A:47:ASN:HB3 | 1 | 0.3 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB3 | 1:A:47:ASN:HB3 | 1 | 0.3 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB2 | 1:A:47:ASN:HB3 | 20 | 0.3 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB1 | 1:A:47:ASN:HB3 | 20 | 0.3 |
| (1,1872) | 1:A:53:ALA:HB3 | 1:A:47:ASN:HB3 | 20 | 0.3 |
| (1,1838) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:58:LYS:H | 10 | 0.3 |
| (1,1754) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:HB3 | 3 | 0.3 |
| (1,1571) | 1:A:58:LYS:HG2 | 1:A:58:LYS:HA | 11 | 0.3 |
| (1,1571) | 1:A:58:LYS:HG2 | 1:A:58:LYS:HA | 17 | 0.3 |
| (1,1421) | 1:A:25:ASN:HA | 1:A:25:ASN:HD22 | 4 | 0.3 |
| (1,1412) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:23:ASP:HB3 | 1 | 0.3 |
| (1,1335) | 1:A:20:LEU:HD22 | 1:A:22:LEU:HB2 | 11 | 0.3 |
| (1,1335) | 1:A:20:LEU:HD21 | 1:A:22:LEU:HB2 | 11 | 0.3 |
| (1,1335) | 1:A:20:LEU:HD23 | 1:A:22:LEU:HB2 | 11 | 0.3 |
| (1,1157) | 1:A:15:SER:HB3 | 1:A:14:GLU:H | 11 | 0.3 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1108) | 1:A:12:SER:H | 1:A:12:SER:HB3 | 20 | 0.3 |
| (1,989) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:82:LEU:HD12 | 3 | 0.29 |
| (1,989) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:82:LEU:HD11 | 3 | 0.29 |
| (1,989) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:82:LEU:HD13 | 3 | 0.29 |
| (1,987) | 1:A:45:ASP:H | 1:A:44:PRO:HG3 | 2 | 0.29 |
| (1,986) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:43:HIS:HD2 | 4 | 0.29 |
| (1,986) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:43:HIS:HD2 | 18 | 0.29 |
| (1,984) | 1:A:5:ARG:HA | 1:A:5:ARG:HG2 | 4 | 0.29 |
| (1,978) | 1:A:50:ASN:HD22 | 1:A:52:GLU:HB3 | 11 | 0.29 |
| (1,952) | 1:A:92:GLU:HB2 | 1:A:92:GLU:H | 6 | 0.29 |
| (1,912) | 1:A:46:LYS:HB3 | 1:A:43:HIS:HB3 | 4 | 0.29 |
| (1,912) | 1:A:46:LYS:HB3 | 1:A:43:HIS:HB3 | 19 | 0.29 |
| (1,864) | 1:A:47:ASN:HB3 | 1:A:47:ASN:HD22 | 1 | 0.29 |
| (1,864) | 1:A:47:ASN:HB3 | 1:A:47:ASN:HD22 | 2 | 0.29 |
| (1,864) | 1:A:47:ASN:HB3 | 1:A:47:ASN:HD22 | 3 | 0.29 |
| (1,864) | 1:A:47:ASN:HB3 | 1:A:47:ASN:HD22 | 4 | 0.29 |
| (1,864) | 1:A:47:ASN:HB3 | 1:A:47:ASN:HD22 | 5 | 0.29 |
| (1,864) | 1:A:47:ASN:HB3 | 1:A:47:ASN:HD22 | 8 | 0.29 |
| (1,864) | 1:A:47:ASN:HB3 | 1:A:47:ASN:HD22 | 9 | 0.29 |
| (1,864) | 1:A:47:ASN:HB3 | 1:A:47:ASN:HD22 | 10 | 0.29 |
| (1,864) | 1:A:47:ASN:HB3 | 1:A:47:ASN:HD22 | 13 | 0.29 |
| (1,864) | 1:A:47:ASN:HB3 | 1:A:47:ASN:HD22 | 15 | 0.29 |
| (1,864) | 1:A:47:ASN:HB3 | 1:A:47:ASN:HD22 | 16 | 0.29 |
| (1,864) | 1:A:47:ASN:HB3 | 1:A:47:ASN:HD22 | 17 | 0.29 |
| (1,864) | 1:A:47:ASN:HB3 | 1:A:47:ASN:HD22 | 18 | 0.29 |
| (1,864) | 1:A:47:ASN:HB3 | 1:A:47:ASN:HD22 | 19 | 0.29 |
| (1,864) | 1:A:47:ASN:HB3 | 1:A:47:ASN:HD22 | 20 | 0.29 |
| (1,839) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:56:LYS:HB3 | 11 | 0.29 |
| (1,839) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:56:LYS:HG3 | 11 | 0.29 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:38:LEU:HD22 | 3 | 0.29 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:38:LEU:HD21 | 3 | 0.29 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:38:LEU:HD23 | 3 | 0.29 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:39:ALA:HB1 | 3 | 0.29 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:39:ALA:HB2 | 3 | 0.29 |
| (1,775) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:39:ALA:HB3 | 3 | 0.29 |
| (1,774) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:41:LYS:HB2 | 16 | 0.29 |
| (1,774) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:41:LYS:HD2 | 16 | 0.29 |
| (1,760) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:48:PRO:HB3 | 20 | 0.29 |
| (1,760) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:48:PRO:HG2 | 20 | 0.29 |
| (1,657) | 1:A:78:LYS:H | 1:A:6:GLN:HG2 | 14 | 0.29 |
| (1,657) | 1:A:78:LYS:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 14 | 0.29 |
| (1,657) | 1:A:78:LYS:H | 1:A:92:GLU:HG2 | 14 | 0.29 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:33:LYS:HB2 | 16 | 0.29 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:33:LYS:HB3 | 16 | 0.29 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:36:ARG:HG2 | 16 | 0.29 |
| (1,615) | 1:A:35:TYR:H | 1:A:38:LEU:HB2 | 16 | 0.29 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:58:LYS:HB2 | 8 | 0.29 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:58:LYS:HB3 | 8 | 0.29 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB3 | 1:A:58:LYS:HB3 | 8 | 0.29 |
| (1,3090) | 1:A:60:ILE:H | 1:A:59:GLU:HB3 | 8 | 0.29 |
| (1,3090) | 1:A:60:ILE:H | 1:A:59:GLU:HB3 | 9 | 0.29 |
| (1,3090) | 1:A:60:ILE:H | 1:A:59:GLU:HB3 | 10 | 0.29 |
| (1,3090) | 1:A:60:ILE:H | 1:A:59:GLU:HB3 | 11 | 0.29 |
| (1,2869) | 1:A:47:ASN:H | 1:A:46:LYS:HB3 | 4 | 0.29 |
| (1,2869) | 1:A:47:ASN:H | 1:A:46:LYS:HB3 | 10 | 0.29 |
| (1,2869) | 1:A:47:ASN:H | 1:A:46:LYS:HB3 | 15 | 0.29 |
| (1,2867) | 1:A:47:ASN:H | 1:A:47:ASN:HB3 | 2 | 0.29 |
| (1,2867) | 1:A:47:ASN:H | 1:A:47:ASN:HB3 | 5 | 0.29 |
| (1,2867) | 1:A:47:ASN:H | 1:A:47:ASN:HB3 | 9 | 0.29 |
| (1,2867) | 1:A:47:ASN:H | 1:A:47:ASN:HB3 | 12 | 0.29 |
| (1,2867) | 1:A:47:ASN:H | 1:A:47:ASN:HB3 | 14 | 0.29 |
| (1,2867) | 1:A:47:ASN:H | 1:A:47:ASN:HB3 | 18 | 0.29 |
| (1,2843) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:67:LEU:HB2 | 12 | 0.29 |
| (1,2792) | 1:A:49:ASP:H | 1:A:48:PRO:HB3 | 4 | 0.29 |
| (1,2792) | 1:A:49:ASP:H | 1:A:48:PRO:HB3 | 7 | 0.29 |
| (1,2792) | 1:A:49:ASP:H | 1:A:48:PRO:HB3 | 18 | 0.29 |
| (1,2733) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 5 | 0.29 |
| (1,2584) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:58:LYS:HA | 7 | 0.29 |
| (1,2457) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:4:GLN:HA | 4 | 0.29 |
| (1,2457) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:4:GLN:HA | 7 | 0.29 |
| (1,2457) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:4:GLN:HA | 19 | 0.29 |
| (1,2405) | 1:A:90:PHE:H | 1:A:89:GLN:HG3 | 16 | 0.29 |
| (1,2405) | 1:A:90:PHE:H | 1:A:89:GLN:HG3 | 20 | 0.29 |
| (1,2403) | 1:A:89:GLN:HA | 1:A:89:GLN:HG3 | 10 | 0.29 |
| (1,2403) | 1:A:89:GLN:HA | 1:A:89:GLN:HG3 | 14 | 0.29 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG12 | 2 | 0.29 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG11 | 2 | 0.29 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG13 | 2 | 0.29 |
| (1,2271) | 1:A:81:SER:HB3 | 1:A:9:LEU:HB3 | 4 | 0.29 |
| (1,1984) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:60:ILE:HA | 1 | 0.29 |
| (1,1952) | 1:A:78:LYS:HG2 | 1:A:78:LYS:H | 5 | 0.29 |
| (1,1952) | 1:A:78:LYS:HG2 | 1:A:78:LYS:H | 14 | 0.29 |
| (1,1659) | 1:A:41:LYS:HD3 | 1:A:38:LEU:HD22 | 18 | 0.29 |
| (1,1659) | 1:A:41:LYS:HD3 | 1:A:38:LEU:HD21 | 18 | 0.29 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1659) | 1:A:41:LYS:HD3 | 1:A:38:LEU:HD23 | 18 | 0.29 |
| (1,1648) | 1:A:41:LYS:HD2 | 1:A:41:LYS:H | 1 | 0.29 |
| (1,1571) | 1:A:58:LYS:HG2 | 1:A:58:LYS:HA | 16 | 0.29 |
| (1,1571) | 1:A:58:LYS:HG2 | 1:A:58:LYS:HA | 19 | 0.29 |
| (1,1108) | 1:A:12:SER:H | 1:A:12:SER:HB3 | 14 | 0.29 |
| (1,109) | 1:A:18:HIS:HB2 | 1:A:15:SER:HB3 | 6 | 0.29 |
| (1,109) | 1:A:18:HIS:HB3 | 1:A:15:SER:HB3 | 6 | 0.29 |
| (1,1057) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:6:GLN:HG3 | 11 | 0.29 |
| (1,1057) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:6:GLN:HG3 | 11 | 0.29 |
| (1,1057) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:6:GLN:HG3 | 11 | 0.29 |
| (1,1055) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:6:GLN:HB2 | 5 | 0.29 |
| (1,1055) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:6:GLN:HB2 | 5 | 0.29 |
| (1,1055) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:6:GLN:HB2 | 5 | 0.29 |
| (1,1011) | 1:A:8:SER:HB2 | 1:A:8:SER:H | 10 | 0.29 |
| (1,1011) | 1:A:8:SER:HB2 | 1:A:8:SER:H | 14 | 0.29 |
| (1,1011) | 1:A:8:SER:HB2 | 1:A:8:SER:H | 19 | 0.29 |
| (1,989) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:82:LEU:HD12 | 10 | 0.28 |
| (1,989) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:82:LEU:HD11 | 10 | 0.28 |
| (1,989) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:82:LEU:HD13 | 10 | 0.28 |
| (1,987) | 1:A:45:ASP:H | 1:A:44:PRO:HG3 | 3 | 0.28 |
| (1,987) | 1:A:45:ASP:H | 1:A:44:PRO:HG3 | 18 | 0.28 |
| (1,915) | 1:A:46:LYS:HG3 | 1:A:46:LYS:HA | 2 | 0.28 |
| (1,864) | 1:A:47:ASN:HB3 | 1:A:47:ASN:HD22 | 6 | 0.28 |
| (1,864) | 1:A:47:ASN:HB3 | 1:A:47:ASN:HD22 | 7 | 0.28 |
| (1,864) | 1:A:47:ASN:HB3 | 1:A:47:ASN:HD22 | 12 | 0.28 |
| (1,864) | 1:A:47:ASN:HB3 | 1:A:47:ASN:HD22 | 14 | 0.28 |
| (1,839) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:56:LYS:HB3 | 8 | 0.28 |
| (1,839) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:56:LYS:HG3 | 8 | 0.28 |
| (1,774) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:41:LYS:HB2 | 10 | 0.28 |
| (1,774) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:41:LYS:HD2 | 10 | 0.28 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HB2 | 14 | 0.28 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HB3 | 14 | 0.28 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HG2 | 14 | 0.28 |
| (1,533) | 1:A:59:GLU:HG3 | 1:A:56:LYS:HE2 | 16 | 0.28 |
| (1,533) | 1:A:59:GLU:HG3 | 1:A:56:LYS:HE3 | 16 | 0.28 |
| (1,484) | 1:A:91:GLY:HA2 | 1:A:92:GLU:HB3 | 9 | 0.28 |
| (1,484) | 1:A:91:GLY:HA2 | 1:A:92:GLU:HB2 | 9 | 0.28 |
| (1,477) | 1:A:94:ASN:HD22 | 1:A:92:GLU:HB2 | 17 | 0.28 |
| (1,477) | 1:A:92:GLU:HB2 | 1:A:96:ASN:HD22 | 17 | 0.28 |
| (1,477) | 1:A:92:GLU:HB3 | 1:A:94:ASN:HD22 | 17 | 0.28 |
| (1,477) | 1:A:92:GLU:HB3 | 1:A:96:ASN:HD22 | 17 | 0.28 |
| (1,477) | 1:A:88:GLU:HB3 | 1:A:61:ASN:HD22 | 17 | 0.28 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,477) | 1:A:88:GLU:HB3 | 1:A:61:ASN:HD21 | 17 | 0.28 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:58:LYS:HB2 | 4 | 0.28 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:58:LYS:HB3 | 4 | 0.28 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB3 | 1:A:58:LYS:HB3 | 4 | 0.28 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:58:LYS:HB2 | 20 | 0.28 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:58:LYS:HB3 | 20 | 0.28 |
| (1,353) | 1:A:61:ASN:HB3 | 1:A:58:LYS:HB3 | 20 | 0.28 |
| (1,3103) | 1:A:80:GLY:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 14 | 0.28 |
| (1,3103) | 1:A:80:GLY:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 15 | 0.28 |
| (1,3090) | 1:A:60:ILE:H | 1:A:59:GLU:HB3 | 20 | 0.28 |
| (1,2912) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:62:ASN:HB2 | 4 | 0.28 |
| (1,2869) | 1:A:47:ASN:H | 1:A:46:LYS:HB3 | 9 | 0.28 |
| (1,2869) | 1:A:47:ASN:H | 1:A:46:LYS:HB3 | 14 | 0.28 |
| (1,2817) | 1:A:89:GLN:H | 1:A:89:GLN:HG3 | 11 | 0.28 |
| (1,2817) | 1:A:89:GLN:H | 1:A:89:GLN:HG3 | 14 | 0.28 |
| (1,2817) | 1:A:89:GLN:H | 1:A:89:GLN:HG3 | 18 | 0.28 |
| (1,2457) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:4:GLN:HA | 18 | 0.28 |
| (1,2457) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:4:GLN:HA | 20 | 0.28 |
| (1,2405) | 1:A:90:PHE:H | 1:A:89:GLN:HG3 | 12 | 0.28 |
| (1,2403) | 1:A:89:GLN:HA | 1:A:89:GLN:HG3 | 17 | 0.28 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG12 | 17 | 0.28 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG11 | 17 | 0.28 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG13 | 17 | 0.28 |
| (1,2242) | 1:A:78:LYS:HG2 | 1:A:79:TYR:H | 7 | 0.28 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG22 | 7 | 0.28 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG21 | 7 | 0.28 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG23 | 7 | 0.28 |
| (1,1984) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:60:ILE:HA | 7 | 0.28 |
| (1,1952) | 1:A:78:LYS:HG2 | 1:A:78:LYS:H | 11 | 0.28 |
| (1,1952) | 1:A:78:LYS:HG2 | 1:A:78:LYS:H | 13 | 0.28 |
| (1,1931) | 1:A:56:LYS:HB3 | 1:A:53:ALA:HA | 5 | 0.28 |
| (1,1838) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:58:LYS:H | 7 | 0.28 |
| (1,1838) | 1:A:58:LYS:HB2 | 1:A:58:LYS:H | 13 | 0.28 |
| (1,1659) | 1:A:41:LYS:HD3 | 1:A:38:LEU:HD22 | 5 | 0.28 |
| (1,1659) | 1:A:41:LYS:HD3 | 1:A:38:LEU:HD21 | 5 | 0.28 |
| (1,1659) | 1:A:41:LYS:HD3 | 1:A:38:LEU:HD23 | 5 | 0.28 |
| (1,1648) | 1:A:41:LYS:HD2 | 1:A:41:LYS:H | 20 | 0.28 |
| (1,1596) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD11 | 20 | 0.28 |
| (1,1596) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD12 | 20 | 0.28 |
| (1,1596) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD13 | 20 | 0.28 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD11 | 5 | 0.28 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD12 | 5 | 0.28 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD13 | 5 | 0.28 |
| (1,1571) | 1:A:58:LYS:HG2 | 1:A:58:LYS:HA | 2 | 0.28 |
| (1,1501) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:35:TYR:HB2 | 19 | 0.28 |
| (1,1149) | 1:A:100:VAL:HA | 1:A:100:VAL:HB | 19 | 0.28 |
| (1,1108) | 1:A:12:SER:H | 1:A:12:SER:HB3 | 15 | 0.28 |
| (1,984) | 1:A:5:ARG:HA | 1:A:5:ARG:HG2 | 20 | 0.27 |
| (1,915) | 1:A:46:LYS:HG3 | 1:A:46:LYS:HA | 8 | 0.27 |
| (1,912) | 1:A:46:LYS:HB3 | 1:A:43:HIS:HB3 | 2 | 0.27 |
| (1,912) | 1:A:46:LYS:HB3 | 1:A:43:HIS:HB3 | 7 | 0.27 |
| (1,877) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:25:ASN:HA | 9 | 0.27 |
| (1,839) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:56:LYS:HB3 | 14 | 0.27 |
| (1,839) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:56:LYS:HG3 | 14 | 0.27 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD13 | 9 | 0.27 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD11 | 9 | 0.27 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD12 | 9 | 0.27 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB1 | 1:A:61:ASN:HA | 9 | 0.27 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB2 | 1:A:61:ASN:HA | 9 | 0.27 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB3 | 1:A:61:ASN:HA | 9 | 0.27 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG21 | 9 | 0.27 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG23 | 9 | 0.27 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG22 | 9 | 0.27 |
| (1,434) | 1:A:75:ILE:HG22 | 1:A:84:LEU:HB2 | 6 | 0.27 |
| (1,434) | 1:A:75:ILE:HG21 | 1:A:84:LEU:HB2 | 6 | 0.27 |
| (1,434) | 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:84:LEU:HB2 | 6 | 0.27 |
| (1,434) | 1:A:75:ILE:HG22 | 1:A:92:GLU:HB2 | 6 | 0.27 |
| (1,434) | 1:A:75:ILE:HG21 | 1:A:92:GLU:HB2 | 6 | 0.27 |
| (1,434) | 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:92:GLU:HB2 | 6 | 0.27 |
| (1,3090) | 1:A:60:ILE:H | 1:A:59:GLU:HB3 | 1 | 0.27 |
| (1,3090) | 1:A:60:ILE:H | 1:A:59:GLU:HB3 | 7 | 0.27 |
| (1,3090) | 1:A:60:ILE:H | 1:A:59:GLU:HB3 | 18 | 0.27 |
| (1,2869) | 1:A:47:ASN:H | 1:A:46:LYS:HB3 | 7 | 0.27 |
| (1,2869) | 1:A:47:ASN:H | 1:A:46:LYS:HB3 | 19 | 0.27 |
| (1,2867) | 1:A:47:ASN:H | 1:A:47:ASN:HB3 | 8 | 0.27 |
| (1,2867) | 1:A:47:ASN:H | 1:A:47:ASN:HB3 | 11 | 0.27 |
| (1,2867) | 1:A:47:ASN:H | 1:A:47:ASN:HB3 | 17 | 0.27 |
| (1,2817) | 1:A:89:GLN:H | 1:A:89:GLN:HG3 | 5 | 0.27 |
| (1,2817) | 1:A:89:GLN:H | 1:A:89:GLN:HG3 | 15 | 0.27 |
| (1,2817) | 1:A:89:GLN:H | 1:A:89:GLN:HG3 | 19 | 0.27 |
| (1,2550) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:6:GLN:HB2 | 18 | 0.27 |
| (1,2403) | 1:A:89:GLN:HA | 1:A:89:GLN:HG3 | 2 | 0.27 |
| (1,2242) | 1:A:78:LYS:HG2 | 1:A:79:TYR:H | 2 | 0.27 |
| (1,2242) | 1:A:78:LYS:HG2 | 1:A:79:TYR:H | 17 | 0.27 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG22 | 15 | 0.27 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG21 | 15 | 0.27 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG23 | 15 | 0.27 |
| (1,221) | 1:A:34:SER:HB3 | 1:A:37:LYS:HE2 | 10 | 0.27 |
| (1,221) | 1:A:34:SER:HB3 | 1:A:37:LYS:HE3 | 10 | 0.27 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD22 | 16 | 0.27 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD21 | 16 | 0.27 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD23 | 16 | 0.27 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD22 | 16 | 0.27 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD21 | 16 | 0.27 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD23 | 16 | 0.27 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD22 | 16 | 0.27 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD21 | 16 | 0.27 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD23 | 16 | 0.27 |
| (1,1984) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:60:ILE:HA | 16 | 0.27 |
| (1,1952) | 1:A:78:LYS:HG2 | 1:A:78:LYS:H | 1 | 0.27 |
| (1,1944) | 1:A:56:LYS:HD3 | 1:A:56:LYS:H | 18 | 0.27 |
| (1,1886) | 1:A:87:ALA:HB2 | 1:A:92:GLU:HB2 | 11 | 0.27 |
| (1,1886) | 1:A:87:ALA:HB1 | 1:A:92:GLU:HB2 | 11 | 0.27 |
| (1,1886) | 1:A:87:ALA:HB3 | 1:A:92:GLU:HB2 | 11 | 0.27 |
| (1,1596) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD11 | 1 | 0.27 |
| (1,1596) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD12 | 1 | 0.27 |
| (1,1596) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD13 | 1 | 0.27 |
| (1,1596) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD11 | 7 | 0.27 |
| (1,1596) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD12 | 7 | 0.27 |
| (1,1596) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD13 | 7 | 0.27 |
| (1,1596) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD11 | 16 | 0.27 |
| (1,1596) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD12 | 16 | 0.27 |
| (1,1596) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD13 | 16 | 0.27 |
| (1,1596) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD11 | 18 | 0.27 |
| (1,1596) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD12 | 18 | 0.27 |
| (1,1596) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD13 | 18 | 0.27 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD11 | 2 | 0.27 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD12 | 2 | 0.27 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD13 | 2 | 0.27 |
| (1,1571) | 1:A:58:LYS:HG2 | 1:A:58:LYS:HA | 6 | 0.27 |
| (1,1531) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:34:SER:HB3 | 8 | 0.27 |
| (1,1412) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:23:ASP:HB3 | 8 | 0.27 |
| (1,1335) | 1:A:20:LEU:HD22 | 1:A:22:LEU:HB2 | 2 | 0.27 |
| (1,1335) | 1:A:20:LEU:HD21 | 1:A:22:LEU:HB2 | 2 | 0.27 |
| (1,1335) | 1:A:20:LEU:HD23 | 1:A:22:LEU:HB2 | 2 | 0.27 |
| (1,1335) | 1:A:20:LEU:HD22 | 1:A:22:LEU:HB2 | 6 | 0.27 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1335) | 1:A:20:LEU:HD21 | 1:A:22:LEU:HB2 | 6 | 0.27 |
| (1,1335) | 1:A:20:LEU:HD23 | 1:A:22:LEU:HB2 | 6 | 0.27 |
| (1,1335) | 1:A:20:LEU:HD22 | 1:A:22:LEU:HB2 | 10 | 0.27 |
| (1,1335) | 1:A:20:LEU:HD21 | 1:A:22:LEU:HB2 | 10 | 0.27 |
| (1,1335) | 1:A:20:LEU:HD23 | 1:A:22:LEU:HB2 | 10 | 0.27 |
| (1,1149) | 1:A:100:VAL:HA | 1:A:100:VAL:HB | 1 | 0.27 |
| (1,1149) | 1:A:100:VAL:HA | 1:A:100:VAL:HB | 7 | 0.27 |
| (1,1149) | 1:A:100:VAL:HA | 1:A:100:VAL:HB | 15 | 0.27 |
| (1,993) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:6:GLN:HB2 | 7 | 0.26 |
| (1,993) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:6:GLN:HB2 | 14 | 0.26 |
| (1,993) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:6:GLN:HB2 | 15 | 0.26 |
| (1,993) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:6:GLN:HB2 | 16 | 0.26 |
| (1,993) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:6:GLN:HB2 | 19 | 0.26 |
| (1,989) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:82:LEU:HD12 | 8 | 0.26 |
| (1,989) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:82:LEU:HD11 | 8 | 0.26 |
| (1,989) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:82:LEU:HD13 | 8 | 0.26 |
| (1,877) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:25:ASN:HA | 2 | 0.26 |
| (1,839) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:56:LYS:HB3 | 3 | 0.26 |
| (1,839) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:56:LYS:HG3 | 3 | 0.26 |
| (1,838) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:58:LYS:HB2 | 10 | 0.26 |
| (1,838) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:51:PRO:HB3 | 10 | 0.26 |
| (1,800) | 1:A:5:ARG:H | 1:A:5:ARG:HG2 | 16 | 0.26 |
| (1,800) | 1:A:5:ARG:H | 1:A:5:ARG:HG3 | 16 | 0.26 |
| (1,786) | 1:A:87:ALA:H | 1:A:92:GLU:HG3 | 10 | 0.26 |
| (1,786) | 1:A:87:ALA:H | 1:A:92:GLU:HG2 | 10 | 0.26 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HB2 | 6 | 0.26 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HB3 | 6 | 0.26 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HG2 | 6 | 0.26 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HB2 | 11 | 0.26 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HB3 | 11 | 0.26 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HG2 | 11 | 0.26 |
| (1,760) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:48:PRO:HB3 | 16 | 0.26 |
| (1,760) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:48:PRO:HG2 | 16 | 0.26 |
| (1,739) | 1:A:47:ASN:HD22 | 1:A:46:LYS:HD3 | 4 | 0.26 |
| (1,739) | 1:A:47:ASN:HD22 | 1:A:53:ALA:HB2 | 4 | 0.26 |
| (1,739) | 1:A:47:ASN:HD22 | 1:A:53:ALA:HB1 | 4 | 0.26 |
| (1,739) | 1:A:47:ASN:HD22 | 1:A:53:ALA:HB3 | 4 | 0.26 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:24:LYS:HB2 | 2 | 0.26 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG21 | 2 | 0.26 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG22 | 2 | 0.26 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG23 | 2 | 0.26 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:67:LEU:HB2 | 2 | 0.26 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:24:LYS:HB2 | 18 | 0.26 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG21 | 18 | 0.26 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG22 | 18 | 0.26 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG23 | 18 | 0.26 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:67:LEU:HB2 | 18 | 0.26 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:79:TYR:HB3 | 7 | 0.26 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:72:LYS:HE2 | 7 | 0.26 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:72:LYS:HE3 | 7 | 0.26 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:79:TYR:HB3 | 14 | 0.26 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:72:LYS:HE2 | 14 | 0.26 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:72:LYS:HE3 | 14 | 0.26 |
| (1,472) | 1:A:85:TYR:HA | 1:A:82:LEU:HD12 | 7 | 0.26 |
| (1,472) | 1:A:85:TYR:HA | 1:A:82:LEU:HD11 | 7 | 0.26 |
| (1,472) | 1:A:85:TYR:HA | 1:A:82:LEU:HD13 | 7 | 0.26 |
| (1,472) | 1:A:85:TYR:HA | 1:A:89:GLN:HB2 | 7 | 0.26 |
| (1,3090) | 1:A:60:ILE:H | 1:A:59:GLU:HB3 | 16 | 0.26 |
| (1,3090) | 1:A:60:ILE:H | 1:A:59:GLU:HB3 | 17 | 0.26 |
| (1,307) | 1:A:52:GLU:HG2 | 1:A:52:GLU:HA | 16 | 0.26 |
| (1,307) | 1:A:52:GLU:HG3 | 1:A:52:GLU:HA | 16 | 0.26 |
| (1,2947) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:44:PRO:HB2 | 2 | 0.26 |
| (1,2869) | 1:A:47:ASN:H | 1:A:46:LYS:HB3 | 12 | 0.26 |
| (1,2858) | 1:A:53:ALA:H | 1:A:52:GLU:HB3 | 10 | 0.26 |
| (1,2817) | 1:A:89:GLN:H | 1:A:89:GLN:HG3 | 8 | 0.26 |
| (1,2478) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:62:ASN:HA | 20 | 0.26 |
| (1,2457) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:4:GLN:HA | 15 | 0.26 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:89:GLN:HE21 | 19 | 0.26 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD12 | 1:A:89:GLN:HE21 | 19 | 0.26 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD13 | 1:A:89:GLN:HE21 | 19 | 0.26 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:89:GLN:HE22 | 19 | 0.26 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD12 | 1:A:89:GLN:HE22 | 19 | 0.26 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD13 | 1:A:89:GLN:HE22 | 19 | 0.26 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG12 | 5 | 0.26 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG11 | 5 | 0.26 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG13 | 5 | 0.26 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG12 | 10 | 0.26 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG11 | 10 | 0.26 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG13 | 10 | 0.26 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG12 | 19 | 0.26 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG11 | 19 | 0.26 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG13 | 19 | 0.26 |
| (1,2266) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:81:SER:HA | 15 | 0.26 |
| (1,2266) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:81:SER:HA | 15 | 0.26 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2266) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:81:SER:HA | 15 | 0.26 |
| (1,2265) | 1:A:81:SER:HA | 1:A:84:LEU:HB3 | 17 | 0.26 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG22 | 9 | 0.26 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG21 | 9 | 0.26 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG23 | 9 | 0.26 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD22 | 4 | 0.26 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD21 | 4 | 0.26 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD23 | 4 | 0.26 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD22 | 4 | 0.26 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD21 | 4 | 0.26 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD23 | 4 | 0.26 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD22 | 4 | 0.26 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD21 | 4 | 0.26 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD23 | 4 | 0.26 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD22 | 18 | 0.26 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD21 | 18 | 0.26 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD23 | 18 | 0.26 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD22 | 18 | 0.26 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD21 | 18 | 0.26 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD23 | 18 | 0.26 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD22 | 18 | 0.26 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD21 | 18 | 0.26 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD23 | 18 | 0.26 |
| (1,1984) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:60:ILE:HA | 14 | 0.26 |
| (1,1952) | 1:A:78:LYS:HG2 | 1:A:78:LYS:H | 12 | 0.26 |
| (1,1952) | 1:A:78:LYS:HG2 | 1:A:78:LYS:H | 18 | 0.26 |
| (1,1754) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:HB3 | 5 | 0.26 |
| (1,1733) | 1:A:99:PHE:HB2 | 1:A:100:VAL:HG13 | 16 | 0.26 |
| (1,1733) | 1:A:99:PHE:HB2 | 1:A:100:VAL:HG11 | 16 | 0.26 |
| (1,1733) | 1:A:99:PHE:HB2 | 1:A:100:VAL:HG12 | 16 | 0.26 |
| (1,1665) | 1:A:41:LYS:HD2 | 1:A:41:LYS:HE2 | 11 | 0.26 |
| (1,1596) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD11 | 8 | 0.26 |
| (1,1596) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD12 | 8 | 0.26 |
| (1,1596) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD13 | 8 | 0.26 |
| (1,1571) | 1:A:58:LYS:HG2 | 1:A:58:LYS:HA | 3 | 0.26 |
| (1,1571) | 1:A:58:LYS:HG2 | 1:A:58:LYS:HA | 4 | 0.26 |
| (1,1571) | 1:A:58:LYS:HG2 | 1:A:58:LYS:HA | 8 | 0.26 |
| (1,1531) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:34:SER:HB3 | 1 | 0.26 |
| (1,1427) | 1:A:26:ALA:HA | 1:A:30:ASP:H | 13 | 0.26 |
| (1,1421) | 1:A:25:ASN:HA | 1:A:25:ASN:HD22 | 2 | 0.26 |
| (1,1421) | 1:A:25:ASN:HA | 1:A:25:ASN:HD22 | 7 | 0.26 |
| (1,1412) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:23:ASP:HB3 | 10 | 0.26 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1412) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:23:ASP:HB3 | 11 | 0.26 |
| (1,1335) | 1:A:20:LEU:HD22 | 1:A:22:LEU:HB2 | 15 | 0.26 |
| (1,1335) | 1:A:20:LEU:HD21 | 1:A:22:LEU:HB2 | 15 | 0.26 |
| (1,1335) | 1:A:20:LEU:HD23 | 1:A:22:LEU:HB2 | 15 | 0.26 |
| (1,993) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:6:GLN:HB2 | 5 | 0.25 |
| (1,993) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:6:GLN:HB2 | 6 | 0.25 |
| (1,993) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:6:GLN:HB2 | 8 | 0.25 |
| (1,993) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:6:GLN:HB2 | 11 | 0.25 |
| (1,993) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:6:GLN:HB2 | 12 | 0.25 |
| (1,993) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:6:GLN:HB2 | 13 | 0.25 |
| (1,993) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:6:GLN:HB2 | 18 | 0.25 |
| (1,993) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:6:GLN:HB2 | 20 | 0.25 |
| (1,966) | 1:A:99:PHE:HB2 | 1:A:99:PHE:H | 19 | 0.25 |
| (1,877) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:25:ASN:HA | 5 | 0.25 |
| (1,877) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:25:ASN:HA | 10 | 0.25 |
| (1,877) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:25:ASN:HA | 11 | 0.25 |
| (1,877) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:25:ASN:HA | 16 | 0.25 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD22 | 3 | 0.25 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD21 | 3 | 0.25 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD23 | 3 | 0.25 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:39:ALA:HB1 | 3 | 0.25 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:39:ALA:HB2 | 3 | 0.25 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:39:ALA:HB3 | 3 | 0.25 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:24:LYS:HB2 | 12 | 0.25 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG21 | 12 | 0.25 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG22 | 12 | 0.25 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG23 | 12 | 0.25 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:67:LEU:HB2 | 12 | 0.25 |
| (1,652) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:6:GLN:HB2 | 15 | 0.25 |
| (1,652) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:84:LEU:HB2 | 15 | 0.25 |
| (1,3090) | 1:A:60:ILE:H | 1:A:59:GLU:HB3 | 14 | 0.25 |
| (1,2888) | 1:A:25:ASN:HD22 | 1:A:25:ASN:HB2 | 1 | 0.25 |
| (1,2867) | 1:A:47:ASN:H | 1:A:47:ASN:HB3 | 20 | 0.25 |
| (1,2843) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:67:LEU:HB2 | 5 | 0.25 |
| (1,2817) | 1:A:89:GLN:H | 1:A:89:GLN:HG3 | 7 | 0.25 |
| (1,2817) | 1:A:89:GLN:H | 1:A:89:GLN:HG3 | 9 | 0.25 |
| (1,2817) | 1:A:89:GLN:H | 1:A:89:GLN:HG3 | 13 | 0.25 |
| (1,2802) | 1:A:6:GLN:H | 1:A:6:GLN:HA | 9 | 0.25 |
| (1,2635) | 1:A:10:SEP:H | 1:A:82:LEU:H | 1 | 0.25 |
| (1,2635) | 1:A:10:SEP:H | 1:A:82:LEU:H | 15 | 0.25 |
| (1,2405) | 1:A:90:PHE:H | 1:A:89:GLN:HG3 | 7 | 0.25 |
| (1,2405) | 1:A:90:PHE:H | 1:A:89:GLN:HG3 | 14 | 0.25 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1980) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:19:VAL:HG12 | 5 | 0.25 |
| (1,1980) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:19:VAL:HG11 | 5 | 0.25 |
| (1,1980) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:19:VAL:HG13 | 5 | 0.25 |
| (1,1974) | 1:A:59:GLU:HA | 1:A:58:LYS:HG3 | 13 | 0.25 |
| (1,1753) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:HB2 | 19 | 0.25 |
| (1,1648) | 1:A:41:LYS:HD2 | 1:A:41:LYS:H | 7 | 0.25 |
| (1,1596) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD11 | 19 | 0.25 |
| (1,1596) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD12 | 19 | 0.25 |
| (1,1596) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD13 | 19 | 0.25 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD11 | 20 | 0.25 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD12 | 20 | 0.25 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD13 | 20 | 0.25 |
| (1,1531) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:34:SER:HB3 | 7 | 0.25 |
| (1,1531) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:34:SER:HB3 | 19 | 0.25 |
| (1,1501) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:35:TYR:HB2 | 1 | 0.25 |
| (1,1427) | 1:A:26:ALA:HA | 1:A:30:ASP:H | 14 | 0.25 |
| (1,1421) | 1:A:25:ASN:HA | 1:A:25:ASN:HD22 | 14 | 0.25 |
| (1,1373) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:31:ILE:H | 8 | 0.25 |
| (1,1335) | 1:A:20:LEU:HD22 | 1:A:22:LEU:HB2 | 4 | 0.25 |
| (1,1335) | 1:A:20:LEU:HD21 | 1:A:22:LEU:HB2 | 4 | 0.25 |
| (1,1335) | 1:A:20:LEU:HD23 | 1:A:22:LEU:HB2 | 4 | 0.25 |
| (1,1197) | 1:A:67:LEU:HD22 | 1:A:73:ARG:HD3 | 18 | 0.25 |
| (1,1197) | 1:A:67:LEU:HD21 | 1:A:73:ARG:HD3 | 18 | 0.25 |
| (1,1197) | 1:A:67:LEU:HD23 | 1:A:73:ARG:HD3 | 18 | 0.25 |
| (1,1110) | 1:A:12:SER:HA | 1:A:12:SER:HB2 | 2 | 0.25 |
| (1,1110) | 1:A:12:SER:HA | 1:A:12:SER:HB2 | 3 | 0.25 |
| (1,1110) | 1:A:12:SER:HA | 1:A:12:SER:HB2 | 6 | 0.25 |
| (1,1110) | 1:A:12:SER:HA | 1:A:12:SER:HB2 | 8 | 0.25 |
| (1,1110) | 1:A:12:SER:HA | 1:A:12:SER:HB2 | 9 | 0.25 |
| (1,1110) | 1:A:12:SER:HA | 1:A:12:SER:HB2 | 12 | 0.25 |
| (1,1110) | 1:A:12:SER:HA | 1:A:12:SER:HB2 | 14 | 0.25 |
| (1,1110) | 1:A:12:SER:HA | 1:A:12:SER:HB2 | 15 | 0.25 |
| (1,1110) | 1:A:12:SER:HA | 1:A:12:SER:HB2 | 20 | 0.25 |
| (1,996) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:6:GLN:HG2 | 9 | 0.24 |
| (1,996) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:6:GLN:HG2 | 10 | 0.24 |
| (1,993) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:6:GLN:HB2 | 1 | 0.24 |
| (1,993) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:6:GLN:HB2 | 3 | 0.24 |
| (1,993) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:6:GLN:HB2 | 4 | 0.24 |
| (1,987) | 1:A:45:ASP:H | 1:A:44:PRO:HG3 | 15 | 0.24 |
| (1,952) | 1:A:92:GLU:HB2 | 1:A:92:GLU:H | 11 | 0.24 |
| (1,915) | 1:A:46:LYS:HG3 | 1:A:46:LYS:HA | 17 | 0.24 |
| (1,885) | 1:A:3:ASP:HB3 | 1:A:3:ASP:HA | 1 | 0.24 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,839) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:56:LYS:HB3 | 12 | 0.24 |
| (1,839) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:56:LYS:HG3 | 12 | 0.24 |
| (1,839) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:56:LYS:HB3 | 18 | 0.24 |
| (1,839) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:56:LYS:HG3 | 18 | 0.24 |
| (1,800) | 1:A:5:ARG:H | 1:A:5:ARG:HG2 | 5 | 0.24 |
| (1,800) | 1:A:5:ARG:H | 1:A:5:ARG:HG3 | 5 | 0.24 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HB2 | 4 | 0.24 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HB3 | 4 | 0.24 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HG2 | 4 | 0.24 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HB2 | 15 | 0.24 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HB3 | 15 | 0.24 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HG2 | 15 | 0.24 |
| (1,604) | 1:A:8:SER:H | 1:A:7:ARG:HG2 | 12 | 0.24 |
| (1,604) | 1:A:8:SER:H | 1:A:7:ARG:HG3 | 12 | 0.24 |
| (1,596) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:3:ASP:HB2 | 11 | 0.24 |
| (1,596) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:3:ASP:HB3 | 11 | 0.24 |
| (1,484) | 1:A:91:GLY:HA2 | 1:A:92:GLU:HB3 | 6 | 0.24 |
| (1,484) | 1:A:91:GLY:HA2 | 1:A:92:GLU:HB2 | 6 | 0.24 |
| (1,2888) | 1:A:25:ASN:HD22 | 1:A:25:ASN:HB2 | 5 | 0.24 |
| (1,2888) | 1:A:25:ASN:HD22 | 1:A:25:ASN:HB2 | 9 | 0.24 |
| (1,2869) | 1:A:47:ASN:H | 1:A:46:LYS:HB3 | 2 | 0.24 |
| (1,2869) | 1:A:47:ASN:H | 1:A:46:LYS:HB3 | 13 | 0.24 |
| (1,2843) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:67:LEU:HB2 | 3 | 0.24 |
| (1,2635) | 1:A:10:SEP:H | 1:A:82:LEU:H | 6 | 0.24 |
| (1,2635) | 1:A:10:SEP:H | 1:A:82:LEU:H | 16 | 0.24 |
| (1,2584) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:58:LYS:HA | 9 | 0.24 |
| (1,2478) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:62:ASN:HA | 17 | 0.24 |
| (1,2405) | 1:A:90:PHE:H | 1:A:89:GLN:HG3 | 2 | 0.24 |
| (1,2405) | 1:A:90:PHE:H | 1:A:89:GLN:HG3 | 10 | 0.24 |
| (1,2397) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:88:GLU:HB3 | 4 | 0.24 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG12 | 8 | 0.24 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG11 | 8 | 0.24 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG13 | 8 | 0.24 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG12 | 11 | 0.24 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG11 | 11 | 0.24 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG13 | 11 | 0.24 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG22 | 1 | 0.24 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG21 | 1 | 0.24 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG23 | 1 | 0.24 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD22 | 20 | 0.24 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD21 | 20 | 0.24 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD23 | 20 | 0.24 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD22 | 20 | 0.24 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD21 | 20 | 0.24 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD23 | 20 | 0.24 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD22 | 20 | 0.24 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD21 | 20 | 0.24 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD23 | 20 | 0.24 |
| (1,1952) | 1:A:78:LYS:HG2 | 1:A:78:LYS:H | 17 | 0.24 |
| (1,1952) | 1:A:78:LYS:HG2 | 1:A:78:LYS:H | 19 | 0.24 |
| (1,1793) | 1:A:48:PRO:HD2 | 1:A:48:PRO:HB2 | 2 | 0.24 |
| (1,1793) | 1:A:48:PRO:HD2 | 1:A:48:PRO:HB2 | 7 | 0.24 |
| (1,1793) | 1:A:48:PRO:HD2 | 1:A:48:PRO:HB2 | 17 | 0.24 |
| (1,1753) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:HB2 | 6 | 0.24 |
| (1,1753) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:HB2 | 8 | 0.24 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD11 | 3 | 0.24 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD12 | 3 | 0.24 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD13 | 3 | 0.24 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD11 | 6 | 0.24 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD12 | 6 | 0.24 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD13 | 6 | 0.24 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD11 | 7 | 0.24 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD12 | 7 | 0.24 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD13 | 7 | 0.24 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD11 | 8 | 0.24 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD12 | 8 | 0.24 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD13 | 8 | 0.24 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD11 | 9 | 0.24 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD12 | 9 | 0.24 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD13 | 9 | 0.24 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD11 | 11 | 0.24 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD12 | 11 | 0.24 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD13 | 11 | 0.24 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD11 | 12 | 0.24 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD12 | 12 | 0.24 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD13 | 12 | 0.24 |
| (1,1571) | 1:A:58:LYS:HG2 | 1:A:58:LYS:HA | 9 | 0.24 |
| (1,1531) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:34:SER:HB3 | 3 | 0.24 |
| (1,1531) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:34:SER:HB3 | 15 | 0.24 |
| (1,1531) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:34:SER:HB3 | 16 | 0.24 |
| (1,1531) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:34:SER:HB3 | 20 | 0.24 |
| (1,1421) | 1:A:25:ASN:HA | 1:A:25:ASN:HD22 | 15 | 0.24 |
| (1,1412) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:23:ASP:HB3 | 5 | 0.24 |
| (1,1412) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:23:ASP:HB3 | 18 | 0.24 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1373) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:31:ILE:H | 6 | 0.24 |
| (1,1373) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:31:ILE:H | 9 | 0.24 |
| (1,1373) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:31:ILE:H | 15 | 0.24 |
| (1,1104) | 1:A:12:SER:HB2 | 1:A:14:GLU:H | 12 | 0.24 |
| (1,1104) | 1:A:12:SER:HB2 | 1:A:14:GLU:H | 14 | 0.24 |
| (1,109) | 1:A:18:HIS:HB2 | 1:A:15:SER:HB3 | 3 | 0.24 |
| (1,109) | 1:A:18:HIS:HB3 | 1:A:15:SER:HB3 | 3 | 0.24 |
| (1,1057) | 1:A:9:LEU:HD22 | 1:A:6:GLN:HG3 | 14 | 0.24 |
| (1,1057) | 1:A:9:LEU:HD21 | 1:A:6:GLN:HG3 | 14 | 0.24 |
| (1,1057) | 1:A:9:LEU:HD23 | 1:A:6:GLN:HG3 | 14 | 0.24 |
| (1,993) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:6:GLN:HB2 | 2 | 0.23 |
| (1,993) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:6:GLN:HB2 | 10 | 0.23 |
| (1,993) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:6:GLN:HB2 | 17 | 0.23 |
| (1,885) | 1:A:3:ASP:HB3 | 1:A:3:ASP:HA | 2 | 0.23 |
| (1,885) | 1:A:3:ASP:HB3 | 1:A:3:ASP:HA | 9 | 0.23 |
| (1,885) | 1:A:3:ASP:HB3 | 1:A:3:ASP:HA | 10 | 0.23 |
| (1,885) | 1:A:3:ASP:HB3 | 1:A:3:ASP:HA | 11 | 0.23 |
| (1,885) | 1:A:3:ASP:HB3 | 1:A:3:ASP:HA | 12 | 0.23 |
| (1,885) | 1:A:3:ASP:HB3 | 1:A:3:ASP:HA | 14 | 0.23 |
| (1,885) | 1:A:3:ASP:HB3 | 1:A:3:ASP:HA | 18 | 0.23 |
| (1,839) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:56:LYS:HB3 | 10 | 0.23 |
| (1,839) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:56:LYS:HG3 | 10 | 0.23 |
| (1,800) | 1:A:5:ARG:H | 1:A:5:ARG:HG2 | 9 | 0.23 |
| (1,800) | 1:A:5:ARG:H | 1:A:5:ARG:HG3 | 9 | 0.23 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HB2 | 2 | 0.23 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HB3 | 2 | 0.23 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HG2 | 2 | 0.23 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HB2 | 5 | 0.23 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HB3 | 5 | 0.23 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HG2 | 5 | 0.23 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HB2 | 9 | 0.23 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HB3 | 9 | 0.23 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HG2 | 9 | 0.23 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HB2 | 12 | 0.23 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HB3 | 12 | 0.23 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HG2 | 12 | 0.23 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD11 | 5 | 0.23 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD13 | 5 | 0.23 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD12 | 5 | 0.23 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD13 | 5 | 0.23 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD11 | 5 | 0.23 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD12 | 5 | 0.23 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG21 | 5 | 0.23 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG23 | 5 | 0.23 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG22 | 5 | 0.23 |
| (1,739) | 1:A:47:ASN:HD22 | 1:A:46:LYS:HD3 | 8 | 0.23 |
| (1,739) | 1:A:47:ASN:HD22 | 1:A:53:ALA:HB2 | 8 | 0.23 |
| (1,739) | 1:A:47:ASN:HD22 | 1:A:53:ALA:HB1 | 8 | 0.23 |
| (1,739) | 1:A:47:ASN:HD22 | 1:A:53:ALA:HB3 | 8 | 0.23 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:24:LYS:HB2 | 4 | 0.23 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG21 | 4 | 0.23 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG22 | 4 | 0.23 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG23 | 4 | 0.23 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:67:LEU:HB2 | 4 | 0.23 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:24:LYS:HB2 | 16 | 0.23 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG21 | 16 | 0.23 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG22 | 16 | 0.23 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG23 | 16 | 0.23 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:67:LEU:HB2 | 16 | 0.23 |
| (1,652) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:6:GLN:HB2 | 12 | 0.23 |
| (1,652) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:84:LEU:HB2 | 12 | 0.23 |
| (1,644) | 1:A:84:LEU:H | 1:A:92:GLU:HG3 | 3 | 0.23 |
| (1,644) | 1:A:84:LEU:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 3 | 0.23 |
| (1,566) | 1:A:12:SER:H | 1:A:10:SEP:HB2 | 4 | 0.23 |
| (1,566) | 1:A:12:SER:H | 1:A:10:SEP:HB3 | 4 | 0.23 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD13 | 5 | 0.23 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD11 | 5 | 0.23 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD12 | 5 | 0.23 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB1 | 1:A:61:ASN:HA | 5 | 0.23 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB2 | 1:A:61:ASN:HA | 5 | 0.23 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB3 | 1:A:61:ASN:HA | 5 | 0.23 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG21 | 5 | 0.23 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG23 | 5 | 0.23 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG22 | 5 | 0.23 |
| (1,484) | 1:A:91:GLY:HA2 | 1:A:92:GLU:HB3 | 11 | 0.23 |
| (1,484) | 1:A:91:GLY:HA2 | 1:A:92:GLU:HB2 | 11 | 0.23 |
| (1,3090) | 1:A:60:ILE:H | 1:A:59:GLU:HB3 | 15 | 0.23 |
| (1,2947) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:44:PRO:HB2 | 11 | 0.23 |
| (1,2888) | 1:A:25:ASN:HD22 | 1:A:25:ASN:HB2 | 8 | 0.23 |
| (1,2888) | 1:A:25:ASN:HD22 | 1:A:25:ASN:HB2 | 10 | 0.23 |
| (1,2888) | 1:A:25:ASN:HD22 | 1:A:25:ASN:HB2 | 13 | 0.23 |
| (1,2888) | 1:A:25:ASN:HD22 | 1:A:25:ASN:HB2 | 16 | 0.23 |
| (1,2888) | 1:A:25:ASN:HD22 | 1:A:25:ASN:HB2 | 17 | 0.23 |
| (1,2888) | 1:A:25:ASN:HD22 | 1:A:25:ASN:HB2 | 19 | 0.23 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2817) | 1:A:89:GLN:H | 1:A:89:GLN:HG3 | 3 | 0.23 |
| (1,2690) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:52:GLU:HG3 | 16 | 0.23 |
| (1,2635) | 1:A:10:SEP:H | 1:A:82:LEU:H | 4 | 0.23 |
| (1,251) | 1:A:41:LYS:HG2 | 1:A:42:TYR:HD2 | 6 | 0.23 |
| (1,251) | 1:A:41:LYS:HG2 | 1:A:42:TYR:HD1 | 6 | 0.23 |
| (1,251) | 1:A:41:LYS:HG2 | 1:A:47:ASN:HD22 | 6 | 0.23 |
| (1,2432) | 1:A:94:ASN:HB3 | 1:A:90:PHE:HB2 | 19 | 0.23 |
| (1,2303) | 1:A:82:LEU:HB2 | 1:A:82:LEU:HD21 | 7 | 0.23 |
| (1,2303) | 1:A:82:LEU:HB2 | 1:A:82:LEU:HD22 | 7 | 0.23 |
| (1,2303) | 1:A:82:LEU:HB2 | 1:A:82:LEU:HD23 | 7 | 0.23 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG22 | 11 | 0.23 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG21 | 11 | 0.23 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG23 | 11 | 0.23 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG22 | 20 | 0.23 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG21 | 20 | 0.23 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG23 | 20 | 0.23 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD22 | 1 | 0.23 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD21 | 1 | 0.23 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD23 | 1 | 0.23 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD22 | 1 | 0.23 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD21 | 1 | 0.23 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD23 | 1 | 0.23 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD22 | 1 | 0.23 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD21 | 1 | 0.23 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD23 | 1 | 0.23 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD22 | 10 | 0.23 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD21 | 10 | 0.23 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD23 | 10 | 0.23 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD22 | 10 | 0.23 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD21 | 10 | 0.23 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD23 | 10 | 0.23 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD22 | 10 | 0.23 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD21 | 10 | 0.23 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD23 | 10 | 0.23 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD22 | 12 | 0.23 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD21 | 12 | 0.23 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD23 | 12 | 0.23 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD22 | 12 | 0.23 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD21 | 12 | 0.23 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD23 | 12 | 0.23 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD22 | 12 | 0.23 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD21 | 12 | 0.23 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD23 | 12 | 0.23 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD22 | 17 | 0.23 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD21 | 17 | 0.23 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD23 | 17 | 0.23 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD22 | 17 | 0.23 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD21 | 17 | 0.23 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD23 | 17 | 0.23 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD22 | 17 | 0.23 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD21 | 17 | 0.23 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD23 | 17 | 0.23 |
| (1,2006) | 1:A:78:LYS:HD2 | 1:A:75:ILE:HA | 15 | 0.23 |
| (1,1952) | 1:A:78:LYS:HG2 | 1:A:78:LYS:H | 15 | 0.23 |
| (1,1952) | 1:A:78:LYS:HG2 | 1:A:78:LYS:H | 16 | 0.23 |
| (1,1944) | 1:A:56:LYS:HD3 | 1:A:56:LYS:H | 15 | 0.23 |
| (1,1931) | 1:A:56:LYS:HB3 | 1:A:53:ALA:HA | 7 | 0.23 |
| (1,1793) | 1:A:48:PRO:HD2 | 1:A:48:PRO:HB2 | 1 | 0.23 |
| (1,1793) | 1:A:48:PRO:HD2 | 1:A:48:PRO:HB2 | 3 | 0.23 |
| (1,1793) | 1:A:48:PRO:HD2 | 1:A:48:PRO:HB2 | 4 | 0.23 |
| (1,1793) | 1:A:48:PRO:HD2 | 1:A:48:PRO:HB2 | 5 | 0.23 |
| (1,1793) | 1:A:48:PRO:HD2 | 1:A:48:PRO:HB2 | 6 | 0.23 |
| (1,1793) | 1:A:48:PRO:HD2 | 1:A:48:PRO:HB2 | 8 | 0.23 |
| (1,1793) | 1:A:48:PRO:HD2 | 1:A:48:PRO:HB2 | 10 | 0.23 |
| (1,1793) | 1:A:48:PRO:HD2 | 1:A:48:PRO:HB2 | 11 | 0.23 |
| (1,1793) | 1:A:48:PRO:HD2 | 1:A:48:PRO:HB2 | 12 | 0.23 |
| (1,1793) | 1:A:48:PRO:HD2 | 1:A:48:PRO:HB2 | 13 | 0.23 |
| (1,1793) | 1:A:48:PRO:HD2 | 1:A:48:PRO:HB2 | 15 | 0.23 |
| (1,1793) | 1:A:48:PRO:HD2 | 1:A:48:PRO:HB2 | 16 | 0.23 |
| (1,1793) | 1:A:48:PRO:HD2 | 1:A:48:PRO:HB2 | 18 | 0.23 |
| (1,1793) | 1:A:48:PRO:HD2 | 1:A:48:PRO:HB2 | 19 | 0.23 |
| (1,1793) | 1:A:48:PRO:HD2 | 1:A:48:PRO:HB2 | 20 | 0.23 |
| (1,1773) | 1:A:47:ASN:HA | 1:A:46:LYS:HB3 | 11 | 0.23 |
| (1,1753) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:HB2 | 2 | 0.23 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD11 | 13 | 0.23 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD12 | 13 | 0.23 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD13 | 13 | 0.23 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD11 | 14 | 0.23 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD12 | 14 | 0.23 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD13 | 14 | 0.23 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD11 | 15 | 0.23 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD12 | 15 | 0.23 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD13 | 15 | 0.23 |
| (1,1531) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:34:SER:HB3 | 18 | 0.23 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1427) | 1:A:26:ALA:HA | 1:A:30:ASP:H | 5 | 0.23 |
| (1,1427) | 1:A:26:ALA:HA | 1:A:30:ASP:H | 6 | 0.23 |
| (1,1412) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:23:ASP:HB3 | 7 | 0.23 |
| (1,1412) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:23:ASP:HB3 | 17 | 0.23 |
| (1,1373) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:31:ILE:H | 1 | 0.23 |
| (1,1373) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:31:ILE:H | 10 | 0.23 |
| (1,1373) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:31:ILE:H | 16 | 0.23 |
| (1,1373) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:31:ILE:H | 17 | 0.23 |
| (1,1373) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:31:ILE:H | 19 | 0.23 |
| (1,1368) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:25:ASN:HD22 | 10 | 0.23 |
| (1,1368) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:25:ASN:HD22 | 10 | 0.23 |
| (1,1368) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:25:ASN:HD22 | 10 | 0.23 |
| (1,993) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:6:GLN:HB2 | 9 | 0.22 |
| (1,989) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:82:LEU:HD12 | 18 | 0.22 |
| (1,989) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:82:LEU:HD11 | 18 | 0.22 |
| (1,989) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:82:LEU:HD13 | 18 | 0.22 |
| (1,915) | 1:A:46:LYS:HG3 | 1:A:46:LYS:HA | 4 | 0.22 |
| (1,877) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:25:ASN:HA | 19 | 0.22 |
| (1,877) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:25:ASN:HA | 20 | 0.22 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:24:LYS:HB2 | 7 | 0.22 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG21 | 7 | 0.22 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG22 | 7 | 0.22 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG23 | 7 | 0.22 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:67:LEU:HB2 | 7 | 0.22 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:24:LYS:HB2 | 14 | 0.22 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG21 | 14 | 0.22 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG22 | 14 | 0.22 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG23 | 14 | 0.22 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:67:LEU:HB2 | 14 | 0.22 |
| (1,657) | 1:A:78:LYS:H | 1:A:6:GLN:HG2 | 4 | 0.22 |
| (1,657) | 1:A:78:LYS:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 4 | 0.22 |
| (1,657) | 1:A:78:LYS:H | 1:A:92:GLU:HG2 | 4 | 0.22 |
| (1,657) | 1:A:78:LYS:H | 1:A:6:GLN:HG2 | 5 | 0.22 |
| (1,657) | 1:A:78:LYS:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 5 | 0.22 |
| (1,657) | 1:A:78:LYS:H | 1:A:92:GLU:HG2 | 5 | 0.22 |
| (1,652) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:6:GLN:HB2 | 5 | 0.22 |
| (1,652) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:84:LEU:HB2 | 5 | 0.22 |
| (1,644) | 1:A:84:LEU:H | 1:A:92:GLU:HG3 | 8 | 0.22 |
| (1,644) | 1:A:84:LEU:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 8 | 0.22 |
| (1,542) | 1:A:97:THR:HA | 1:A:96:ASN:HB3 | 10 | 0.22 |
| (1,542) | 1:A:97:THR:HB | 1:A:96:ASN:HB3 | 10 | 0.22 |
| (1,542) | 1:A:97:THR:HA | 1:A:96:ASN:HB2 | 10 | 0.22 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:79:TYR:HB3 | 9 | 0.22 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:72:LYS:HE2 | 9 | 0.22 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:72:LYS:HE3 | 9 | 0.22 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:79:TYR:HB3 | 15 | 0.22 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:72:LYS:HE2 | 15 | 0.22 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:72:LYS:HE3 | 15 | 0.22 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:79:TYR:HB3 | 18 | 0.22 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:72:LYS:HE2 | 18 | 0.22 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:72:LYS:HE3 | 18 | 0.22 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:72:LYS:HE3 | 14 | 0.22 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:76:TYR:HB2 | 14 | 0.22 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:76:TYR:HB3 | 14 | 0.22 |
| (1,3090) | 1:A:60:ILE:H | 1:A:59:GLU:HB3 | 19 | 0.22 |
| (1,2976) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:40:LEU:HA | 1 | 0.22 |
| (1,2888) | 1:A:25:ASN:HD22 | 1:A:25:ASN:HB2 | 2 | 0.22 |
| (1,2888) | 1:A:25:ASN:HD22 | 1:A:25:ASN:HB2 | 3 | 0.22 |
| (1,2888) | 1:A:25:ASN:HD22 | 1:A:25:ASN:HB2 | 6 | 0.22 |
| (1,2888) | 1:A:25:ASN:HD22 | 1:A:25:ASN:HB2 | 7 | 0.22 |
| (1,2888) | 1:A:25:ASN:HD22 | 1:A:25:ASN:HB2 | 11 | 0.22 |
| (1,2888) | 1:A:25:ASN:HD22 | 1:A:25:ASN:HB2 | 12 | 0.22 |
| (1,2888) | 1:A:25:ASN:HD22 | 1:A:25:ASN:HB2 | 14 | 0.22 |
| (1,2888) | 1:A:25:ASN:HD22 | 1:A:25:ASN:HB2 | 18 | 0.22 |
| (1,2888) | 1:A:25:ASN:HD22 | 1:A:25:ASN:HB2 | 20 | 0.22 |
| (1,2869) | 1:A:47:ASN:H | 1:A:46:LYS:HB3 | 1 | 0.22 |
| (1,2869) | 1:A:47:ASN:H | 1:A:46:LYS:HB3 | 6 | 0.22 |
| (1,2869) | 1:A:47:ASN:H | 1:A:46:LYS:HB3 | 18 | 0.22 |
| (1,2843) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:67:LEU:HB2 | 14 | 0.22 |
| (1,2813) | 1:A:89:GLN:H | 1:A:90:PHE:HB3 | 11 | 0.22 |
| (1,2539) | 1:A:96:ASN:HD21 | 1:A:96:ASN:HB2 | 5 | 0.22 |
| (1,2448) | 1:A:100:VAL:HB | 1:A:100:VAL:H | 11 | 0.22 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG22 | 5 | 0.22 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG21 | 5 | 0.22 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG23 | 5 | 0.22 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG22 | 13 | 0.22 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG21 | 13 | 0.22 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG23 | 13 | 0.22 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG22 | 14 | 0.22 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG21 | 14 | 0.22 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG23 | 14 | 0.22 |
| (1,2141) | 1:A:69:ASP:HB3 | 1:A:72:LYS:HD2 | 19 | 0.22 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD22 | 3 | 0.22 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD21 | 3 | 0.22 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD23 | 3 | 0.22 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD22 | 3 | 0.22 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD21 | 3 | 0.22 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD23 | 3 | 0.22 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD22 | 3 | 0.22 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD21 | 3 | 0.22 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD23 | 3 | 0.22 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD22 | 6 | 0.22 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD21 | 6 | 0.22 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD23 | 6 | 0.22 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD22 | 6 | 0.22 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD21 | 6 | 0.22 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD23 | 6 | 0.22 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD22 | 6 | 0.22 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD21 | 6 | 0.22 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD23 | 6 | 0.22 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD22 | 7 | 0.22 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD21 | 7 | 0.22 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD23 | 7 | 0.22 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD22 | 7 | 0.22 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD21 | 7 | 0.22 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD23 | 7 | 0.22 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD22 | 7 | 0.22 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD21 | 7 | 0.22 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD23 | 7 | 0.22 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD22 | 9 | 0.22 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD21 | 9 | 0.22 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD23 | 9 | 0.22 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD22 | 9 | 0.22 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD21 | 9 | 0.22 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD23 | 9 | 0.22 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD22 | 9 | 0.22 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD21 | 9 | 0.22 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD23 | 9 | 0.22 |
| (1,1984) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:60:ILE:HA | 12 | 0.22 |
| (1,1939) | 1:A:56:LYS:HD2 | 1:A:42:TYR:HD2 | 18 | 0.22 |
| (1,1939) | 1:A:56:LYS:HD2 | 1:A:42:TYR:HD1 | 18 | 0.22 |
| (1,182) | 1:A:29:ASP:H | 1:A:28:SER:HA | 15 | 0.22 |
| (1,182) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:28:SER:HA | 15 | 0.22 |
| (1,1793) | 1:A:48:PRO:HD2 | 1:A:48:PRO:HB2 | 9 | 0.22 |
| (1,1793) | 1:A:48:PRO:HD2 | 1:A:48:PRO:HB2 | 14 | 0.22 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD11 | 1 | 0.22 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD12 | 1 | 0.22 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD13 | 1 | 0.22 |
| (1,1427) | 1:A:26:ALA:HA | 1:A:30:ASP:H | 16 | 0.22 |
| (1,1421) | 1:A:25:ASN:HA | 1:A:25:ASN:HD22 | 3 | 0.22 |
| (1,1412) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:23:ASP:HB3 | 3 | 0.22 |
| (1,1412) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:23:ASP:HB3 | 6 | 0.22 |
| (1,1412) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:23:ASP:HB3 | 15 | 0.22 |
| (1,1373) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:31:ILE:H | 2 | 0.22 |
| (1,1373) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:31:ILE:H | 4 | 0.22 |
| (1,1373) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:31:ILE:H | 11 | 0.22 |
| (1,1373) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:31:ILE:H | 12 | 0.22 |
| (1,1373) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:31:ILE:H | 20 | 0.22 |
| (1,1197) | 1:A:67:LEU:HD22 | 1:A:73:ARG:HD3 | 20 | 0.22 |
| (1,1197) | 1:A:67:LEU:HD21 | 1:A:73:ARG:HD3 | 20 | 0.22 |
| (1,1197) | 1:A:67:LEU:HD23 | 1:A:73:ARG:HD3 | 20 | 0.22 |
| (1,1104) | 1:A:12:SER:HB2 | 1:A:14:GLU:H | 6 | 0.22 |
| (1,996) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:6:GLN:HG2 | 4 | 0.21 |
| (1,986) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:43:HIS:HD2 | 7 | 0.21 |
| (1,968) | 1:A:43:HIS:HB3 | 1:A:42:TYR:H | 10 | 0.21 |
| (1,968) | 1:A:43:HIS:HB3 | 1:A:42:TYR:H | 13 | 0.21 |
| (1,885) | 1:A:3:ASP:HB3 | 1:A:3:ASP:HA | 13 | 0.21 |
| (1,885) | 1:A:3:ASP:HB3 | 1:A:3:ASP:HA | 16 | 0.21 |
| (1,877) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:25:ASN:HA | 1 | 0.21 |
| (1,802) | 1:A:72:LYS:H | 1:A:75:ILE:HB | 7 | 0.21 |
| (1,802) | 1:A:72:LYS:H | 1:A:88:GLU:HB3 | 7 | 0.21 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HB2 | 17 | 0.21 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HB3 | 17 | 0.21 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HG2 | 17 | 0.21 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD11 | 8 | 0.21 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD13 | 8 | 0.21 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD12 | 8 | 0.21 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD13 | 8 | 0.21 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD11 | 8 | 0.21 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD12 | 8 | 0.21 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG21 | 8 | 0.21 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG23 | 8 | 0.21 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG22 | 8 | 0.21 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD11 | 14 | 0.21 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD13 | 14 | 0.21 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD12 | 14 | 0.21 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD13 | 14 | 0.21 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD11 | 14 | 0.21 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD12 | 14 | 0.21 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG21 | 14 | 0.21 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG23 | 14 | 0.21 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG22 | 14 | 0.21 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD11 | 18 | 0.21 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD13 | 18 | 0.21 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD12 | 18 | 0.21 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD13 | 18 | 0.21 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD11 | 18 | 0.21 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD12 | 18 | 0.21 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG21 | 18 | 0.21 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG23 | 18 | 0.21 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG22 | 18 | 0.21 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:24:LYS:HB2 | 1 | 0.21 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG21 | 1 | 0.21 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG22 | 1 | 0.21 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG23 | 1 | 0.21 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:67:LEU:HB2 | 1 | 0.21 |
| (1,652) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:6:GLN:HB2 | 1 | 0.21 |
| (1,652) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:84:LEU:HB2 | 1 | 0.21 |
| (1,652) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:6:GLN:HB2 | 19 | 0.21 |
| (1,652) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:84:LEU:HB2 | 19 | 0.21 |
| (1,644) | 1:A:84:LEU:H | 1:A:92:GLU:HG3 | 6 | 0.21 |
| (1,644) | 1:A:84:LEU:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 6 | 0.21 |
| (1,566) | 1:A:12:SER:H | 1:A:10:SEP:HB2 | 18 | 0.21 |
| (1,566) | 1:A:12:SER:H | 1:A:10:SEP:HB3 | 18 | 0.21 |
| (1,542) | 1:A:97:THR:HA | 1:A:96:ASN:HB3 | 3 | 0.21 |
| (1,542) | 1:A:97:THR:HB | 1:A:96:ASN:HB3 | 3 | 0.21 |
| (1,542) | 1:A:97:THR:HA | 1:A:96:ASN:HB2 | 3 | 0.21 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:79:TYR:HB3 | 20 | 0.21 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:72:LYS:HE2 | 20 | 0.21 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:72:LYS:HE3 | 20 | 0.21 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG22 | 1:A:84:LEU:HB3 | 17 | 0.21 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG21 | 1:A:84:LEU:HB3 | 17 | 0.21 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:84:LEU:HB3 | 17 | 0.21 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG22 | 1:A:72:LYS:HB3 | 17 | 0.21 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG21 | 1:A:72:LYS:HB3 | 17 | 0.21 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:72:LYS:HB3 | 17 | 0.21 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:69:ASP:HB2 | 6 | 0.21 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:69:ASP:HB2 | 6 | 0.21 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:69:ASP:HB2 | 6 | 0.21 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:73:ARG:HD3 | 6 | 0.21 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:73:ARG:HD3 | 6 | 0.21 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:73:ARG:HD3 | 6 | 0.21 |
| (1,3090) | 1:A:60:ILE:H | 1:A:59:GLU:HB3 | 12 | 0.21 |
| (1,2984) | 1:A:73:ARG:H | 1:A:73:ARG:HD3 | 16 | 0.21 |
| (1,2947) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:44:PRO:HB2 | 1 | 0.21 |
| (1,2888) | 1:A:25:ASN:HD22 | 1:A:25:ASN:HB2 | 4 | 0.21 |
| (1,2888) | 1:A:25:ASN:HD22 | 1:A:25:ASN:HB2 | 15 | 0.21 |
| (1,2837) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:41:LYS:HB2 | 18 | 0.21 |
| (1,2817) | 1:A:89:GLN:H | 1:A:89:GLN:HG3 | 16 | 0.21 |
| (1,2813) | 1:A:89:GLN:H | 1:A:90:PHE:HB3 | 5 | 0.21 |
| (1,2635) | 1:A:10:SEP:H | 1:A:82:LEU:H | 3 | 0.21 |
| (1,2635) | 1:A:10:SEP:H | 1:A:82:LEU:H | 8 | 0.21 |
| (1,2635) | 1:A:10:SEP:H | 1:A:82:LEU:H | 9 | 0.21 |
| (1,2635) | 1:A:10:SEP:H | 1:A:82:LEU:H | 11 | 0.21 |
| (1,2635) | 1:A:10:SEP:H | 1:A:82:LEU:H | 17 | 0.21 |
| (1,2405) | 1:A:90:PHE:H | 1:A:89:GLN:HG3 | 6 | 0.21 |
| (1,2405) | 1:A:90:PHE:H | 1:A:89:GLN:HG3 | 11 | 0.21 |
| (1,2405) | 1:A:90:PHE:H | 1:A:89:GLN:HG3 | 15 | 0.21 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG12 | 6 | 0.21 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG11 | 6 | 0.21 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG13 | 6 | 0.21 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG12 | 15 | 0.21 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG11 | 15 | 0.21 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG13 | 15 | 0.21 |
| (1,2265) | 1:A:81:SER:HA | 1:A:84:LEU:HB3 | 10 | 0.21 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG22 | 2 | 0.21 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG21 | 2 | 0.21 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG23 | 2 | 0.21 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG22 | 19 | 0.21 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG21 | 19 | 0.21 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG23 | 19 | 0.21 |
| (1,2203) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:73:ARG:HB2 | 11 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD22 | 2 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD21 | 2 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD23 | 2 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD22 | 2 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD21 | 2 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD23 | 2 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD22 | 2 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD21 | 2 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD23 | 2 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD22 | 5 | 0.21 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD21 | 5 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD23 | 5 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD22 | 5 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD21 | 5 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD23 | 5 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD22 | 5 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD21 | 5 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD23 | 5 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD22 | 8 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD21 | 8 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD23 | 8 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD22 | 8 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD21 | 8 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD23 | 8 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD22 | 8 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD21 | 8 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD23 | 8 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD22 | 13 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD21 | 13 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD23 | 13 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD22 | 13 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD21 | 13 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD23 | 13 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD22 | 13 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD21 | 13 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD23 | 13 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD22 | 19 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD21 | 19 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD23 | 19 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD22 | 19 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD21 | 19 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD23 | 19 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD22 | 19 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD21 | 19 | 0.21 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD23 | 19 | 0.21 |
| (1,1950) | 1:A:56:LYS:HG2 | 1:A:42:TYR:HE2 | 7 | 0.21 |
| (1,1950) | 1:A:56:LYS:HG2 | 1:A:42:TYR:HE1 | 7 | 0.21 |
| (1,1886) | 1:A:87:ALA:HB2 | 1:A:92:GLU:HB2 | 6 | 0.21 |
| (1,1886) | 1:A:87:ALA:HB1 | 1:A:92:GLU:HB2 | 6 | 0.21 |
| (1,1886) | 1:A:87:ALA:HB3 | 1:A:92:GLU:HB2 | 6 | 0.21 |
| (1,182) | 1:A:29:ASP:H | 1:A:28:SER:HA | 3 | 0.21 |
| (1,182) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:28:SER:HA | 3 | 0.21 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,182) | 1:A:29:ASP:H | 1:A:28:SER:HA | 4 | 0.21 |
| (1,182) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:28:SER:HA | 4 | 0.21 |
| (1,182) | 1:A:29:ASP:H | 1:A:28:SER:HA | 14 | 0.21 |
| (1,182) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:28:SER:HA | 14 | 0.21 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:68:THR:HB | 14 | 0.21 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:68:THR:HB | 14 | 0.21 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:68:THR:HB | 14 | 0.21 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:34:SER:HB3 | 14 | 0.21 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:34:SER:HB3 | 14 | 0.21 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:34:SER:HB3 | 14 | 0.21 |
| (1,1745) | 1:A:47:ASN:HD21 | 1:A:46:LYS:HB3 | 20 | 0.21 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD11 | 16 | 0.21 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD12 | 16 | 0.21 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD13 | 16 | 0.21 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD11 | 19 | 0.21 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD12 | 19 | 0.21 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD13 | 19 | 0.21 |
| (1,1501) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:35:TYR:HB2 | 3 | 0.21 |
| (1,1427) | 1:A:26:ALA:HA | 1:A:30:ASP:H | 4 | 0.21 |
| (1,1427) | 1:A:26:ALA:HA | 1:A:30:ASP:H | 7 | 0.21 |
| (1,1427) | 1:A:26:ALA:HA | 1:A:30:ASP:H | 12 | 0.21 |
| (1,1373) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:31:ILE:H | 14 | 0.21 |
| (1,1373) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:31:ILE:H | 18 | 0.21 |
| (1,1368) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:25:ASN:HD22 | 11 | 0.21 |
| (1,1368) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:25:ASN:HD22 | 11 | 0.21 |
| (1,1368) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:25:ASN:HD22 | 11 | 0.21 |
| (1,1368) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:25:ASN:HD22 | 16 | 0.21 |
| (1,1368) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:25:ASN:HD22 | 16 | 0.21 |
| (1,1368) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:25:ASN:HD22 | 16 | 0.21 |
| (1,1135) | 1:A:92:GLU:HG3 | 1:A:92:GLU:HA | 10 | 0.21 |
| (1,1112) | 1:A:12:SER:HB2 | 1:A:14:GLU:HG2 | 2 | 0.21 |
| (1,989) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:82:LEU:HD12 | 6 | 0.2 |
| (1,989) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:82:LEU:HD11 | 6 | 0.2 |
| (1,989) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:82:LEU:HD13 | 6 | 0.2 |
| (1,915) | 1:A:46:LYS:HG3 | 1:A:46:LYS:HA | 1 | 0.2 |
| (1,915) | 1:A:46:LYS:HG3 | 1:A:46:LYS:HA | 10 | 0.2 |
| (1,915) | 1:A:46:LYS:HG3 | 1:A:46:LYS:HA | 16 | 0.2 |
| (1,793) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:44:PRO:HB3 | 14 | 0.2 |
| (1,793) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:44:PRO:HD3 | 14 | 0.2 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HB2 | 10 | 0.2 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HB3 | 10 | 0.2 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HG2 | 10 | 0.2 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD11 | 1 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD13 | 1 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD12 | 1 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD13 | 1 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD11 | 1 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD12 | 1 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG21 | 1 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG23 | 1 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG22 | 1 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD11 | 2 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD13 | 2 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD12 | 2 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD13 | 2 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD11 | 2 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD12 | 2 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG21 | 2 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG23 | 2 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG22 | 2 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD11 | 7 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD13 | 7 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD12 | 7 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD13 | 7 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD11 | 7 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD12 | 7 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG21 | 7 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG23 | 7 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG22 | 7 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD11 | 10 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD13 | 10 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD12 | 10 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD13 | 10 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD11 | 10 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD12 | 10 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG21 | 10 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG23 | 10 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG22 | 10 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD11 | 13 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD13 | 13 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD12 | 13 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD13 | 13 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD11 | 13 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD12 | 13 | 0.2 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG21 | 13 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG23 | 13 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG22 | 13 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD11 | 19 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD13 | 19 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD12 | 19 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD13 | 19 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD11 | 19 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD12 | 19 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG21 | 19 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG23 | 19 | 0.2 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG22 | 19 | 0.2 |
| (1,739) | 1:A:47:ASN:HD22 | 1:A:46:LYS:HD3 | 6 | 0.2 |
| (1,739) | 1:A:47:ASN:HD22 | 1:A:53:ALA:HB2 | 6 | 0.2 |
| (1,739) | 1:A:47:ASN:HD22 | 1:A:53:ALA:HB1 | 6 | 0.2 |
| (1,739) | 1:A:47:ASN:HD22 | 1:A:53:ALA:HB3 | 6 | 0.2 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:24:LYS:HB2 | 5 | 0.2 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG21 | 5 | 0.2 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG22 | 5 | 0.2 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG23 | 5 | 0.2 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:67:LEU:HB2 | 5 | 0.2 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:24:LYS:HB2 | 10 | 0.2 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG21 | 10 | 0.2 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG22 | 10 | 0.2 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG23 | 10 | 0.2 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:67:LEU:HB2 | 10 | 0.2 |
| (1,604) | 1:A:8:SER:H | 1:A:7:ARG:HG2 | 1 | 0.2 |
| (1,604) | 1:A:8:SER:H | 1:A:7:ARG:HG3 | 1 | 0.2 |
| (1,566) | 1:A:12:SER:H | 1:A:10:SEP:HB2 | 8 | 0.2 |
| (1,566) | 1:A:12:SER:H | 1:A:10:SEP:HB3 | 8 | 0.2 |
| (1,566) | 1:A:12:SER:H | 1:A:10:SEP:HB2 | 10 | 0.2 |
| (1,566) | 1:A:12:SER:H | 1:A:10:SEP:HB3 | 10 | 0.2 |
| (1,565) | 1:A:85:TYR:H | 1:A:9:LEU:HD11 | 15 | 0.2 |
| (1,565) | 1:A:85:TYR:H | 1:A:9:LEU:HD13 | 15 | 0.2 |
| (1,565) | 1:A:85:TYR:H | 1:A:9:LEU:HD12 | 15 | 0.2 |
| (1,565) | 1:A:85:TYR:H | 1:A:66:ILE:HD13 | 15 | 0.2 |
| (1,565) | 1:A:85:TYR:H | 1:A:66:ILE:HD11 | 15 | 0.2 |
| (1,565) | 1:A:85:TYR:H | 1:A:66:ILE:HD12 | 15 | 0.2 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:79:TYR:HB3 | 1 | 0.2 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:72:LYS:HE2 | 1 | 0.2 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:72:LYS:HE3 | 1 | 0.2 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:79:TYR:HB3 | 13 | 0.2 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:72:LYS:HE2 | 13 | 0.2 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:72:LYS:HE3 | 13 | 0.2 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD13 | 2 | 0.2 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD11 | 2 | 0.2 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD12 | 2 | 0.2 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB1 | 1:A:61:ASN:HA | 2 | 0.2 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB2 | 1:A:61:ASN:HA | 2 | 0.2 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB3 | 1:A:61:ASN:HA | 2 | 0.2 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG21 | 2 | 0.2 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG23 | 2 | 0.2 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG22 | 2 | 0.2 |
| (1,422) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:73:ARG:HA | 10 | 0.2 |
| (1,422) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HA | 10 | 0.2 |
| (1,422) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:73:ARG:HA | 19 | 0.2 |
| (1,422) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HA | 19 | 0.2 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:72:LYS:HE3 | 11 | 0.2 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:76:TYR:HB2 | 11 | 0.2 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:76:TYR:HB3 | 11 | 0.2 |
| (1,2976) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:40:LEU:HA | 7 | 0.2 |
| (1,2976) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:40:LEU:HA | 20 | 0.2 |
| (1,2947) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:44:PRO:HB2 | 9 | 0.2 |
| (1,2843) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:67:LEU:HB2 | 20 | 0.2 |
| (1,2635) | 1:A:10:SEP:H | 1:A:82:LEU:H | 2 | 0.2 |
| (1,2635) | 1:A:10:SEP:H | 1:A:82:LEU:H | 5 | 0.2 |
| (1,2635) | 1:A:10:SEP:H | 1:A:82:LEU:H | 7 | 0.2 |
| (1,2635) | 1:A:10:SEP:H | 1:A:82:LEU:H | 12 | 0.2 |
| (1,2405) | 1:A:90:PHE:H | 1:A:89:GLN:HG3 | 4 | 0.2 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:89:GLN:HE21 | 1 | 0.2 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD12 | 1:A:89:GLN:HE21 | 1 | 0.2 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD13 | 1:A:89:GLN:HE21 | 1 | 0.2 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:89:GLN:HE22 | 1 | 0.2 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD12 | 1:A:89:GLN:HE22 | 1 | 0.2 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD13 | 1:A:89:GLN:HE22 | 1 | 0.2 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:89:GLN:HE21 | 16 | 0.2 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD12 | 1:A:89:GLN:HE21 | 16 | 0.2 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD13 | 1:A:89:GLN:HE21 | 16 | 0.2 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:89:GLN:HE22 | 16 | 0.2 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD12 | 1:A:89:GLN:HE22 | 16 | 0.2 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD13 | 1:A:89:GLN:HE22 | 16 | 0.2 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG22 | 4 | 0.2 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG21 | 4 | 0.2 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG23 | 4 | 0.2 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG22 | 10 | 0.2 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG21 | 10 | 0.2 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG23 | 10 | 0.2 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG22 | 17 | 0.2 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG21 | 17 | 0.2 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG23 | 17 | 0.2 |
| (1,1862) | 1:A:51:PRO:HG2 | 1:A:52:GLU:H | 10 | 0.2 |
| (1,182) | 1:A:29:ASP:H | 1:A:28:SER:HA | 1 | 0.2 |
| (1,182) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:28:SER:HA | 1 | 0.2 |
| (1,182) | 1:A:29:ASP:H | 1:A:28:SER:HA | 8 | 0.2 |
| (1,182) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:28:SER:HA | 8 | 0.2 |
| (1,182) | 1:A:29:ASP:H | 1:A:28:SER:HA | 16 | 0.2 |
| (1,182) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:28:SER:HA | 16 | 0.2 |
| (1,182) | 1:A:29:ASP:H | 1:A:28:SER:HA | 18 | 0.2 |
| (1,182) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:28:SER:HA | 18 | 0.2 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:68:THR:HB | 10 | 0.2 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:68:THR:HB | 10 | 0.2 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:68:THR:HB | 10 | 0.2 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:34:SER:HB3 | 10 | 0.2 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:34:SER:HB3 | 10 | 0.2 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:34:SER:HB3 | 10 | 0.2 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:68:THR:HB | 13 | 0.2 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:68:THR:HB | 13 | 0.2 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:68:THR:HB | 13 | 0.2 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:34:SER:HB3 | 13 | 0.2 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:34:SER:HB3 | 13 | 0.2 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:34:SER:HB3 | 13 | 0.2 |
| (1,1745) | 1:A:47:ASN:HD21 | 1:A:46:LYS:HB3 | 11 | 0.2 |
| (1,1667) | 1:A:41:LYS:HG3 | 1:A:38:LEU:HA | 3 | 0.2 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD11 | 10 | 0.2 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD12 | 10 | 0.2 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD13 | 10 | 0.2 |
| (1,1531) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:34:SER:HB3 | 2 | 0.2 |
| (1,1531) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:34:SER:HB3 | 5 | 0.2 |
| (1,1531) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:34:SER:HB3 | 10 | 0.2 |
| (1,1531) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:34:SER:HB3 | 11 | 0.2 |
| (1,1531) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:34:SER:HB3 | 14 | 0.2 |
| (1,1531) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:34:SER:HB3 | 17 | 0.2 |
| (1,1421) | 1:A:25:ASN:HA | 1:A:25:ASN:HD22 | 20 | 0.2 |
| (1,1413) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:25:ASN:HD22 | 18 | 0.2 |
| (1,1412) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:23:ASP:HB3 | 4 | 0.2 |
| (1,1412) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:23:ASP:HB3 | 9 | 0.2 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1412) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:23:ASP:HB3 | 12 | 0.2 |
| (1,1373) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:31:ILE:H | 3 | 0.2 |
| (1,1373) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:31:ILE:H | 7 | 0.2 |
| (1,1237) | 1:A:20:LEU:H | 1:A:18:HIS:HA | 10 | 0.2 |
| (1,996) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:6:GLN:HG2 | 7 | 0.19 |
| (1,996) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:6:GLN:HG2 | 19 | 0.19 |
| (1,968) | 1:A:43:HIS:HB3 | 1:A:42:TYR:H | 16 | 0.19 |
| (1,952) | 1:A:92:GLU:HB2 | 1:A:92:GLU:H | 9 | 0.19 |
| (1,885) | 1:A:3:ASP:HB3 | 1:A:3:ASP:HA | 4 | 0.19 |
| (1,802) | 1:A:72:LYS:H | 1:A:75:ILE:HB | 8 | 0.19 |
| (1,802) | 1:A:72:LYS:H | 1:A:88:GLU:HB3 | 8 | 0.19 |
| (1,802) | 1:A:72:LYS:H | 1:A:75:ILE:HB | 19 | 0.19 |
| (1,802) | 1:A:72:LYS:H | 1:A:88:GLU:HB3 | 19 | 0.19 |
| (1,802) | 1:A:72:LYS:H | 1:A:75:ILE:HB | 20 | 0.19 |
| (1,802) | 1:A:72:LYS:H | 1:A:88:GLU:HB3 | 20 | 0.19 |
| (1,793) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:44:PRO:HB3 | 20 | 0.19 |
| (1,793) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:44:PRO:HD3 | 20 | 0.19 |
| (1,79) | 1:A:11:THR:HG21 | 1:A:6:GLN:HB3 | 1 | 0.19 |
| (1,79) | 1:A:11:THR:HG22 | 1:A:6:GLN:HB3 | 1 | 0.19 |
| (1,79) | 1:A:11:THR:HG23 | 1:A:6:GLN:HB3 | 1 | 0.19 |
| (1,79) | 1:A:11:THR:HG21 | 1:A:82:LEU:HB2 | 1 | 0.19 |
| (1,79) | 1:A:11:THR:HG22 | 1:A:82:LEU:HB2 | 1 | 0.19 |
| (1,79) | 1:A:11:THR:HG23 | 1:A:82:LEU:HB2 | 1 | 0.19 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD11 | 11 | 0.19 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD13 | 11 | 0.19 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD12 | 11 | 0.19 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD13 | 11 | 0.19 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD11 | 11 | 0.19 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD12 | 11 | 0.19 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG21 | 11 | 0.19 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG23 | 11 | 0.19 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG22 | 11 | 0.19 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD11 | 15 | 0.19 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD13 | 15 | 0.19 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD12 | 15 | 0.19 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD13 | 15 | 0.19 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD11 | 15 | 0.19 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD12 | 15 | 0.19 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG21 | 15 | 0.19 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG23 | 15 | 0.19 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG22 | 15 | 0.19 |
| (1,652) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:6:GLN:HB2 | 9 | 0.19 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,652) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:84:LEU:HB2 | 9 | 0.19 |
| (1,574) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HG2 | 19 | 0.19 |
| (1,574) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HD2 | 19 | 0.19 |
| (1,542) | 1:A:97:THR:HA | 1:A:96:ASN:HB3 | 4 | 0.19 |
| (1,542) | 1:A:97:THR:HB | 1:A:96:ASN:HB3 | 4 | 0.19 |
| (1,542) | 1:A:97:THR:HA | 1:A:96:ASN:HB2 | 4 | 0.19 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:79:TYR:HB3 | 2 | 0.19 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:72:LYS:HE2 | 2 | 0.19 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:72:LYS:HE3 | 2 | 0.19 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD13 | 17 | 0.19 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD11 | 17 | 0.19 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD12 | 17 | 0.19 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB1 | 1:A:61:ASN:HA | 17 | 0.19 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB2 | 1:A:61:ASN:HA | 17 | 0.19 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB3 | 1:A:61:ASN:HA | 17 | 0.19 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG21 | 17 | 0.19 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG23 | 17 | 0.19 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG22 | 17 | 0.19 |
| (1,472) | 1:A:85:TYR:HA | 1:A:82:LEU:HD12 | 2 | 0.19 |
| (1,472) | 1:A:85:TYR:HA | 1:A:82:LEU:HD11 | 2 | 0.19 |
| (1,472) | 1:A:85:TYR:HA | 1:A:82:LEU:HD13 | 2 | 0.19 |
| (1,472) | 1:A:85:TYR:HA | 1:A:89:GLN:HB2 | 2 | 0.19 |
| (1,458) | 1:A:82:LEU:HD12 | 1:A:6:GLN:HG2 | 9 | 0.19 |
| (1,458) | 1:A:82:LEU:HD11 | 1:A:6:GLN:HG2 | 9 | 0.19 |
| (1,458) | 1:A:82:LEU:HD13 | 1:A:6:GLN:HG2 | 9 | 0.19 |
| (1,458) | 1:A:82:LEU:HD12 | 1:A:6:GLN:HG3 | 9 | 0.19 |
| (1,458) | 1:A:82:LEU:HD11 | 1:A:6:GLN:HG3 | 9 | 0.19 |
| (1,458) | 1:A:82:LEU:HD13 | 1:A:6:GLN:HG3 | 9 | 0.19 |
| (1,422) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:73:ARG:HA | 7 | 0.19 |
| (1,422) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HA | 7 | 0.19 |
| (1,422) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:73:ARG:HA | 8 | 0.19 |
| (1,422) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HA | 8 | 0.19 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:69:ASP:HB2 | 2 | 0.19 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:69:ASP:HB2 | 2 | 0.19 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:69:ASP:HB2 | 2 | 0.19 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:73:ARG:HD3 | 2 | 0.19 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:73:ARG:HD3 | 2 | 0.19 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:73:ARG:HD3 | 2 | 0.19 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:69:ASP:HB2 | 5 | 0.19 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:69:ASP:HB2 | 5 | 0.19 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:69:ASP:HB2 | 5 | 0.19 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:73:ARG:HD3 | 5 | 0.19 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:73:ARG:HD3 | 5 | 0.19 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:73:ARG:HD3 | 5 | 0.19 |
| (1,3103) | 1:A:80:GLY:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 19 | 0.19 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:55:ASP:HB2 | 3 | 0.19 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:56:LYS:HE2 | 3 | 0.19 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:56:LYS:HE3 | 3 | 0.19 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:55:ASP:HB2 | 15 | 0.19 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:56:LYS:HE2 | 15 | 0.19 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:56:LYS:HE3 | 15 | 0.19 |
| (1,3023) | 1:A:5:ARG:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 8 | 0.19 |
| (1,2869) | 1:A:47:ASN:H | 1:A:46:LYS:HB3 | 8 | 0.19 |
| (1,2843) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:67:LEU:HB2 | 18 | 0.19 |
| (1,2817) | 1:A:89:GLN:H | 1:A:89:GLN:HG3 | 20 | 0.19 |
| (1,2737) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:82:LEU:HD21 | 16 | 0.19 |
| (1,2737) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:82:LEU:HD22 | 16 | 0.19 |
| (1,2737) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:82:LEU:HD23 | 16 | 0.19 |
| (1,2635) | 1:A:10:SEP:H | 1:A:82:LEU:H | 13 | 0.19 |
| (1,2539) | 1:A:96:ASN:HD21 | 1:A:96:ASN:HB2 | 3 | 0.19 |
| (1,2539) | 1:A:96:ASN:HD21 | 1:A:96:ASN:HB2 | 4 | 0.19 |
| (1,2448) | 1:A:100:VAL:HB | 1:A:100:VAL:H | 12 | 0.19 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:89:GLN:HE21 | 18 | 0.19 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD12 | 1:A:89:GLN:HE21 | 18 | 0.19 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD13 | 1:A:89:GLN:HE21 | 18 | 0.19 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:89:GLN:HE22 | 18 | 0.19 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD12 | 1:A:89:GLN:HE22 | 18 | 0.19 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD13 | 1:A:89:GLN:HE22 | 18 | 0.19 |
| (1,226) | 1:A:36:ARG:HA | 1:A:36:ARG:HD2 | 19 | 0.19 |
| (1,226) | 1:A:36:ARG:HA | 1:A:36:ARG:HD3 | 19 | 0.19 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD22 | 11 | 0.19 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD21 | 11 | 0.19 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD23 | 11 | 0.19 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD22 | 11 | 0.19 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD21 | 11 | 0.19 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD23 | 11 | 0.19 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD22 | 11 | 0.19 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD21 | 11 | 0.19 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD23 | 11 | 0.19 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD22 | 15 | 0.19 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD21 | 15 | 0.19 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD23 | 15 | 0.19 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD22 | 15 | 0.19 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD21 | 15 | 0.19 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD23 | 15 | 0.19 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD22 | 15 | 0.19 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD21 | 15 | 0.19 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD23 | 15 | 0.19 |
| (1,2) | 1:A:61:ASN:HB3 | 1:A:61:ASN:HD22 | 4 | 0.19 |
| (1,2) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:61:ASN:HD22 | 4 | 0.19 |
| (1,2) | 1:A:61:ASN:HB3 | 1:A:61:ASN:HD22 | 6 | 0.19 |
| (1,2) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:61:ASN:HD22 | 6 | 0.19 |
| (1,2) | 1:A:61:ASN:HB3 | 1:A:61:ASN:HD22 | 8 | 0.19 |
| (1,2) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:61:ASN:HD22 | 8 | 0.19 |
| (1,2) | 1:A:61:ASN:HB3 | 1:A:61:ASN:HD22 | 13 | 0.19 |
| (1,2) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:61:ASN:HD22 | 13 | 0.19 |
| (1,182) | 1:A:29:ASP:H | 1:A:28:SER:HA | 5 | 0.19 |
| (1,182) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:28:SER:HA | 5 | 0.19 |
| (1,182) | 1:A:29:ASP:H | 1:A:28:SER:HA | 6 | 0.19 |
| (1,182) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:28:SER:HA | 6 | 0.19 |
| (1,182) | 1:A:29:ASP:H | 1:A:28:SER:HA | 20 | 0.19 |
| (1,182) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:28:SER:HA | 20 | 0.19 |
| (1,1773) | 1:A:47:ASN:HA | 1:A:46:LYS:HB3 | 20 | 0.19 |
| (1,1753) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:HB2 | 14 | 0.19 |
| (1,1753) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:HB2 | 20 | 0.19 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD11 | 4 | 0.19 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD12 | 4 | 0.19 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD13 | 4 | 0.19 |
| (1,1531) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:34:SER:HB3 | 13 | 0.19 |
| (1,1427) | 1:A:26:ALA:HA | 1:A:30:ASP:H | 2 | 0.19 |
| (1,1427) | 1:A:26:ALA:HA | 1:A:30:ASP:H | 3 | 0.19 |
| (1,1427) | 1:A:26:ALA:HA | 1:A:30:ASP:H | 11 | 0.19 |
| (1,1427) | 1:A:26:ALA:HA | 1:A:30:ASP:H | 18 | 0.19 |
| (1,1412) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:23:ASP:HB3 | 13 | 0.19 |
| (1,1407) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:25:ASN:HA | 1 | 0.19 |
| (1,1368) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:25:ASN:HD22 | 18 | 0.19 |
| (1,1368) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:25:ASN:HD22 | 18 | 0.19 |
| (1,1368) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:25:ASN:HD22 | 18 | 0.19 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD22 | 1 | 0.19 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD21 | 1 | 0.19 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD23 | 1 | 0.19 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:26:ALA:HA | 1 | 0.19 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:26:ALA:HA | 1 | 0.19 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:26:ALA:HA | 1 | 0.19 |
| (1,1104) | 1:A:12:SER:HB2 | 1:A:14:GLU:H | 15 | 0.19 |
| (1,1104) | 1:A:12:SER:HB2 | 1:A:14:GLU:H | 20 | 0.19 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,109) | 1:A:18:HIS:HB2 | 1:A:15:SER:HB3 | 2 | 0.19 |
| (1,109) | 1:A:18:HIS:HB3 | 1:A:15:SER:HB3 | 2 | 0.19 |
| (1,109) | 1:A:18:HIS:HB2 | 1:A:15:SER:HB3 | 12 | 0.19 |
| (1,109) | 1:A:18:HIS:HB3 | 1:A:15:SER:HB3 | 12 | 0.19 |
| (1,1071) | 1:A:99:PHE:HA | 1:A:99:PHE:HB2 | 3 | 0.19 |
| (1,1071) | 1:A:99:PHE:HA | 1:A:99:PHE:HB2 | 4 | 0.19 |
| (1,1071) | 1:A:99:PHE:HA | 1:A:99:PHE:HB2 | 8 | 0.19 |
| (1,1071) | 1:A:99:PHE:HA | 1:A:99:PHE:HB2 | 10 | 0.19 |
| (1,1071) | 1:A:99:PHE:HA | 1:A:99:PHE:HB2 | 17 | 0.19 |
| (1,1069) | 1:A:42:TYR:HA | 1:A:42:TYR:HD2 | 13 | 0.19 |
| (1,1069) | 1:A:42:TYR:HA | 1:A:42:TYR:HD1 | 13 | 0.19 |
| (1,986) | 1:A:44:PRO:HG3 | 1:A:43:HIS:HD2 | 14 | 0.18 |
| (1,984) | 1:A:5:ARG:HA | 1:A:5:ARG:HG2 | 19 | 0.18 |
| (1,980) | 1:A:5:ARG:HA | 1:A:5:ARG:HB2 | 5 | 0.18 |
| (1,980) | 1:A:5:ARG:HA | 1:A:5:ARG:HB2 | 9 | 0.18 |
| (1,980) | 1:A:5:ARG:HA | 1:A:5:ARG:HB2 | 20 | 0.18 |
| (1,974) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:3:ASP:HA | 16 | 0.18 |
| (1,912) | 1:A:46:LYS:HB3 | 1:A:43:HIS:HB3 | 18 | 0.18 |
| (1,884) | 1:A:3:ASP:HB2 | 1:A:3:ASP:HA | 3 | 0.18 |
| (1,884) | 1:A:3:ASP:HB2 | 1:A:3:ASP:HA | 15 | 0.18 |
| (1,802) | 1:A:72:LYS:H | 1:A:75:ILE:HB | 16 | 0.18 |
| (1,802) | 1:A:72:LYS:H | 1:A:88:GLU:HB3 | 16 | 0.18 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HB2 | 3 | 0.18 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HB3 | 3 | 0.18 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HG2 | 3 | 0.18 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HB2 | 8 | 0.18 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HB3 | 8 | 0.18 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HG2 | 8 | 0.18 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HB2 | 13 | 0.18 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HB3 | 13 | 0.18 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HG2 | 13 | 0.18 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:11:THR:H | 20 | 0.18 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:11:THR:H | 20 | 0.18 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:11:THR:H | 20 | 0.18 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:86:VAL:H | 20 | 0.18 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:86:VAL:H | 20 | 0.18 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:86:VAL:H | 20 | 0.18 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD22 | 1 | 0.18 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD21 | 1 | 0.18 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD23 | 1 | 0.18 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:39:ALA:HB1 | 1 | 0.18 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:39:ALA:HB2 | 1 | 0.18 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:39:ALA:HB3 | 1 | 0.18 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:24:LYS:HB2 | 8 | 0.18 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG21 | 8 | 0.18 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG22 | 8 | 0.18 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG23 | 8 | 0.18 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:67:LEU:HB2 | 8 | 0.18 |
| (1,652) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:6:GLN:HB2 | 20 | 0.18 |
| (1,652) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:84:LEU:HB2 | 20 | 0.18 |
| (1,644) | 1:A:84:LEU:H | 1:A:92:GLU:HG3 | 9 | 0.18 |
| (1,644) | 1:A:84:LEU:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 9 | 0.18 |
| (1,623) | 1:A:91:GLY:H | 1:A:92:GLU:HB2 | 9 | 0.18 |
| (1,623) | 1:A:91:GLY:H | 1:A:92:GLU:HB3 | 9 | 0.18 |
| (1,574) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HG2 | 9 | 0.18 |
| (1,574) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HD2 | 9 | 0.18 |
| (1,574) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HG2 | 12 | 0.18 |
| (1,574) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HD2 | 12 | 0.18 |
| (1,566) | 1:A:12:SER:H | 1:A:10:SEP:HB2 | 17 | 0.18 |
| (1,566) | 1:A:12:SER:H | 1:A:10:SEP:HB3 | 17 | 0.18 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:79:TYR:HB3 | 5 | 0.18 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:72:LYS:HE2 | 5 | 0.18 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:72:LYS:HE3 | 5 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD13 | 14 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD11 | 14 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD12 | 14 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB1 | 1:A:61:ASN:HA | 14 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB2 | 1:A:61:ASN:HA | 14 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB3 | 1:A:61:ASN:HA | 14 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG21 | 14 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG23 | 14 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG22 | 14 | 0.18 |
| (1,477) | 1:A:94:ASN:HD22 | 1:A:92:GLU:HB2 | 16 | 0.18 |
| (1,477) | 1:A:92:GLU:HB2 | 1:A:96:ASN:HD22 | 16 | 0.18 |
| (1,477) | 1:A:92:GLU:HB3 | 1:A:94:ASN:HD22 | 16 | 0.18 |
| (1,477) | 1:A:92:GLU:HB3 | 1:A:96:ASN:HD22 | 16 | 0.18 |
| (1,477) | 1:A:88:GLU:HB3 | 1:A:61:ASN:HD22 | 16 | 0.18 |
| (1,477) | 1:A:88:GLU:HB3 | 1:A:61:ASN:HD21 | 16 | 0.18 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG22 | 1:A:84:LEU:HB3 | 18 | 0.18 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG21 | 1:A:84:LEU:HB3 | 18 | 0.18 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:84:LEU:HB3 | 18 | 0.18 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG22 | 1:A:72:LYS:HB3 | 18 | 0.18 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG21 | 1:A:72:LYS:HB3 | 18 | 0.18 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:72:LYS:HB3 | 18 | 0.18 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,422) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:73:ARG:HA | 1 | 0.18 |
| (1,422) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HA | 1 | 0.18 |
| (1,422) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:73:ARG:HA | 2 | 0.18 |
| (1,422) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HA | 2 | 0.18 |
| (1,422) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:73:ARG:HA | 3 | 0.18 |
| (1,422) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HA | 3 | 0.18 |
| (1,422) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:73:ARG:HA | 6 | 0.18 |
| (1,422) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HA | 6 | 0.18 |
| (1,422) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:73:ARG:HA | 12 | 0.18 |
| (1,422) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HA | 12 | 0.18 |
| (1,422) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:73:ARG:HA | 13 | 0.18 |
| (1,422) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HA | 13 | 0.18 |
| (1,422) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:73:ARG:HA | 17 | 0.18 |
| (1,422) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HA | 17 | 0.18 |
| (1,422) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:73:ARG:HA | 18 | 0.18 |
| (1,422) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HA | 18 | 0.18 |
| (1,422) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:73:ARG:HA | 20 | 0.18 |
| (1,422) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HA | 20 | 0.18 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:69:ASP:HB2 | 4 | 0.18 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:69:ASP:HB2 | 4 | 0.18 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:69:ASP:HB2 | 4 | 0.18 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:73:ARG:HD3 | 4 | 0.18 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:73:ARG:HD3 | 4 | 0.18 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:73:ARG:HD3 | 4 | 0.18 |
| (1,307) | 1:A:52:GLU:HG2 | 1:A:52:GLU:HA | 10 | 0.18 |
| (1,307) | 1:A:52:GLU:HG3 | 1:A:52:GLU:HA | 10 | 0.18 |
| (1,2813) | 1:A:89:GLN:H | 1:A:90:PHE:HB3 | 8 | 0.18 |
| (1,2690) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:52:GLU:HG3 | 8 | 0.18 |
| (1,2512) | 1:A:55:ASP:HB3 | 1:A:55:ASP:HA | 1 | 0.18 |
| (1,2512) | 1:A:55:ASP:HB3 | 1:A:55:ASP:HA | 2 | 0.18 |
| (1,2512) | 1:A:55:ASP:HB3 | 1:A:55:ASP:HA | 3 | 0.18 |
| (1,2512) | 1:A:55:ASP:HB3 | 1:A:55:ASP:HA | 4 | 0.18 |
| (1,2512) | 1:A:55:ASP:HB3 | 1:A:55:ASP:HA | 5 | 0.18 |
| (1,2512) | 1:A:55:ASP:HB3 | 1:A:55:ASP:HA | 7 | 0.18 |
| (1,2512) | 1:A:55:ASP:HB3 | 1:A:55:ASP:HA | 8 | 0.18 |
| (1,2512) | 1:A:55:ASP:HB3 | 1:A:55:ASP:HA | 9 | 0.18 |
| (1,2512) | 1:A:55:ASP:HB3 | 1:A:55:ASP:HA | 10 | 0.18 |
| (1,2512) | 1:A:55:ASP:HB3 | 1:A:55:ASP:HA | 13 | 0.18 |
| (1,2512) | 1:A:55:ASP:HB3 | 1:A:55:ASP:HA | 14 | 0.18 |
| (1,2512) | 1:A:55:ASP:HB3 | 1:A:55:ASP:HA | 15 | 0.18 |
| (1,2512) | 1:A:55:ASP:HB3 | 1:A:55:ASP:HA | 17 | 0.18 |
| (1,2512) | 1:A:55:ASP:HB3 | 1:A:55:ASP:HA | 18 | 0.18 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2512) | 1:A:55:ASP:HB3 | 1:A:55:ASP:HA | 20 | 0.18 |
| (1,2386) | 1:A:94:ASN:HD22 | 1:A:93:GLU:HG2 | 13 | 0.18 |
| (1,2324) | 1:A:84:LEU:HB2 | 1:A:88:GLU:HB3 | 14 | 0.18 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG22 | 8 | 0.18 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG21 | 8 | 0.18 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG23 | 8 | 0.18 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG22 | 18 | 0.18 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG21 | 18 | 0.18 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG23 | 18 | 0.18 |
| (1,2068) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:63:ALA:HA | 6 | 0.18 |
| (1,2068) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:63:ALA:HA | 6 | 0.18 |
| (1,2068) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:63:ALA:HA | 6 | 0.18 |
| (1,2068) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:63:ALA:HA | 13 | 0.18 |
| (1,2068) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:63:ALA:HA | 13 | 0.18 |
| (1,2068) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:63:ALA:HA | 13 | 0.18 |
| (1,2) | 1:A:61:ASN:HB3 | 1:A:61:ASN:HD22 | 1 | 0.18 |
| (1,2) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:61:ASN:HD22 | 1 | 0.18 |
| (1,2) | 1:A:61:ASN:HB3 | 1:A:61:ASN:HD22 | 2 | 0.18 |
| (1,2) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:61:ASN:HD22 | 2 | 0.18 |
| (1,2) | 1:A:61:ASN:HB3 | 1:A:61:ASN:HD22 | 3 | 0.18 |
| (1,2) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:61:ASN:HD22 | 3 | 0.18 |
| (1,2) | 1:A:61:ASN:HB3 | 1:A:61:ASN:HD22 | 5 | 0.18 |
| (1,2) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:61:ASN:HD22 | 5 | 0.18 |
| (1,2) | 1:A:61:ASN:HB3 | 1:A:61:ASN:HD22 | 7 | 0.18 |
| (1,2) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:61:ASN:HD22 | 7 | 0.18 |
| (1,2) | 1:A:61:ASN:HB3 | 1:A:61:ASN:HD22 | 9 | 0.18 |
| (1,2) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:61:ASN:HD22 | 9 | 0.18 |
| (1,2) | 1:A:61:ASN:HB3 | 1:A:61:ASN:HD22 | 10 | 0.18 |
| (1,2) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:61:ASN:HD22 | 10 | 0.18 |
| (1,2) | 1:A:61:ASN:HB3 | 1:A:61:ASN:HD22 | 11 | 0.18 |
| (1,2) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:61:ASN:HD22 | 11 | 0.18 |
| (1,2) | 1:A:61:ASN:HB3 | 1:A:61:ASN:HD22 | 15 | 0.18 |
| (1,2) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:61:ASN:HD22 | 15 | 0.18 |
| (1,1952) | 1:A:78:LYS:HG2 | 1:A:78:LYS:H | 2 | 0.18 |
| (1,1952) | 1:A:78:LYS:HG2 | 1:A:78:LYS:H | 7 | 0.18 |
| (1,1944) | 1:A:56:LYS:HD3 | 1:A:56:LYS:H | 3 | 0.18 |
| (1,1886) | 1:A:87:ALA:HB2 | 1:A:92:GLU:HB2 | 9 | 0.18 |
| (1,1886) | 1:A:87:ALA:HB1 | 1:A:92:GLU:HB2 | 9 | 0.18 |
| (1,1886) | 1:A:87:ALA:HB3 | 1:A:92:GLU:HB2 | 9 | 0.18 |
| (1,182) | 1:A:29:ASP:H | 1:A:28:SER:HA | 11 | 0.18 |
| (1,182) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:28:SER:HA | 11 | 0.18 |
| (1,1753) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:HB2 | 9 | 0.18 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1753) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:HB2 | 12 | 0.18 |
| (1,1648) | 1:A:41:LYS:HD2 | 1:A:41:LYS:H | 13 | 0.18 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD11 | 17 | 0.18 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD12 | 17 | 0.18 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD13 | 17 | 0.18 |
| (1,1531) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:34:SER:HB3 | 4 | 0.18 |
| (1,1531) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:34:SER:HB3 | 6 | 0.18 |
| (1,1531) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:34:SER:HB3 | 9 | 0.18 |
| (1,1501) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:35:TYR:HB2 | 18 | 0.18 |
| (1,1421) | 1:A:25:ASN:HA | 1:A:25:ASN:HD22 | 6 | 0.18 |
| (1,1421) | 1:A:25:ASN:HA | 1:A:25:ASN:HD22 | 12 | 0.18 |
| (1,1413) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:25:ASN:HD22 | 3 | 0.18 |
| (1,1412) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:23:ASP:HB3 | 14 | 0.18 |
| (1,1408) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HA | 12 | 0.18 |
| (1,1408) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HA | 17 | 0.18 |
| (1,1386) | 1:A:23:ASP:HA | 1:A:23:ASP:HB3 | 2 | 0.18 |
| (1,1386) | 1:A:23:ASP:HA | 1:A:23:ASP:HB3 | 19 | 0.18 |
| (1,1386) | 1:A:23:ASP:HA | 1:A:23:ASP:HB3 | 20 | 0.18 |
| (1,1373) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:31:ILE:H | 5 | 0.18 |
| (1,1368) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:25:ASN:HD22 | 1 | 0.18 |
| (1,1368) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:25:ASN:HD22 | 1 | 0.18 |
| (1,1368) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:25:ASN:HD22 | 1 | 0.18 |
| (1,1197) | 1:A:67:LEU:HD22 | 1:A:73:ARG:HD3 | 17 | 0.18 |
| (1,1197) | 1:A:67:LEU:HD21 | 1:A:73:ARG:HD3 | 17 | 0.18 |
| (1,1197) | 1:A:67:LEU:HD23 | 1:A:73:ARG:HD3 | 17 | 0.18 |
| (1,1071) | 1:A:99:PHE:HA | 1:A:99:PHE:HB2 | 1 | 0.18 |
| (1,1071) | 1:A:99:PHE:HA | 1:A:99:PHE:HB2 | 12 | 0.18 |
| (1,1071) | 1:A:99:PHE:HA | 1:A:99:PHE:HB2 | 18 | 0.18 |
| (1,980) | 1:A:5:ARG:HA | 1:A:5:ARG:HB2 | 2 | 0.17 |
| (1,980) | 1:A:5:ARG:HA | 1:A:5:ARG:HB2 | 4 | 0.17 |
| (1,980) | 1:A:5:ARG:HA | 1:A:5:ARG:HB2 | 16 | 0.17 |
| (1,915) | 1:A:46:LYS:HG3 | 1:A:46:LYS:HA | 15 | 0.17 |
| (1,915) | 1:A:46:LYS:HG3 | 1:A:46:LYS:HA | 19 | 0.17 |
| (1,884) | 1:A:3:ASP:HB2 | 1:A:3:ASP:HA | 17 | 0.17 |
| (1,839) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:56:LYS:HB3 | 1 | 0.17 |
| (1,839) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:56:LYS:HG3 | 1 | 0.17 |
| (1,839) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:56:LYS:HB3 | 20 | 0.17 |
| (1,839) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:56:LYS:HG3 | 20 | 0.17 |
| (1,802) | 1:A:72:LYS:H | 1:A:75:ILE:HB | 15 | 0.17 |
| (1,802) | 1:A:72:LYS:H | 1:A:88:GLU:HB3 | 15 | 0.17 |
| (1,802) | 1:A:72:LYS:H | 1:A:75:ILE:HB | 17 | 0.17 |
| (1,802) | 1:A:72:LYS:H | 1:A:88:GLU:HB3 | 17 | 0.17 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,802) | 1:A:72:LYS:H | 1:A:75:ILE:HB | 18 | 0.17 |
| (1,802) | 1:A:72:LYS:H | 1:A:88:GLU:HB3 | 18 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD11 | 3 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD13 | 3 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD12 | 3 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD13 | 3 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD11 | 3 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD12 | 3 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG21 | 3 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG23 | 3 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG22 | 3 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD11 | 4 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD13 | 4 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD12 | 4 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD13 | 4 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD11 | 4 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD12 | 4 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG21 | 4 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG23 | 4 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG22 | 4 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD11 | 6 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD13 | 6 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD12 | 6 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD13 | 6 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD11 | 6 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD12 | 6 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG21 | 6 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG23 | 6 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG22 | 6 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD11 | 9 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD13 | 9 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD12 | 9 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD13 | 9 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD11 | 9 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD12 | 9 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG21 | 9 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG23 | 9 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG22 | 9 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD11 | 17 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD13 | 17 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD12 | 17 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD13 | 17 | 0.17 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD11 | 17 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD12 | 17 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG21 | 17 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG23 | 17 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG22 | 17 | 0.17 |
| (1,739) | 1:A:47:ASN:HD22 | 1:A:46:LYS:HD3 | 5 | 0.17 |
| (1,739) | 1:A:47:ASN:HD22 | 1:A:53:ALA:HB2 | 5 | 0.17 |
| (1,739) | 1:A:47:ASN:HD22 | 1:A:53:ALA:HB1 | 5 | 0.17 |
| (1,739) | 1:A:47:ASN:HD22 | 1:A:53:ALA:HB3 | 5 | 0.17 |
| (1,739) | 1:A:47:ASN:HD22 | 1:A:46:LYS:HD3 | 16 | 0.17 |
| (1,739) | 1:A:47:ASN:HD22 | 1:A:53:ALA:HB2 | 16 | 0.17 |
| (1,739) | 1:A:47:ASN:HD22 | 1:A:53:ALA:HB1 | 16 | 0.17 |
| (1,739) | 1:A:47:ASN:HD22 | 1:A:53:ALA:HB3 | 16 | 0.17 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:11:THR:H | 2 | 0.17 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:11:THR:H | 2 | 0.17 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:11:THR:H | 2 | 0.17 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:86:VAL:H | 2 | 0.17 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:86:VAL:H | 2 | 0.17 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:86:VAL:H | 2 | 0.17 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:11:THR:H | 9 | 0.17 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:11:THR:H | 9 | 0.17 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:11:THR:H | 9 | 0.17 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:86:VAL:H | 9 | 0.17 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:86:VAL:H | 9 | 0.17 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:86:VAL:H | 9 | 0.17 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD22 | 8 | 0.17 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD21 | 8 | 0.17 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD23 | 8 | 0.17 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:39:ALA:HB1 | 8 | 0.17 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:39:ALA:HB2 | 8 | 0.17 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:39:ALA:HB3 | 8 | 0.17 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD22 | 16 | 0.17 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD21 | 16 | 0.17 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD23 | 16 | 0.17 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:39:ALA:HB1 | 16 | 0.17 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:39:ALA:HB2 | 16 | 0.17 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:39:ALA:HB3 | 16 | 0.17 |
| (1,686) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:38:LEU:HD11 | 2 | 0.17 |
| (1,686) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:38:LEU:HD12 | 2 | 0.17 |
| (1,686) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:38:LEU:HD13 | 2 | 0.17 |
| (1,686) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:39:ALA:HB1 | 2 | 0.17 |
| (1,686) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:39:ALA:HB2 | 2 | 0.17 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,686) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:39:ALA:HB3 | 2 | 0.17 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:24:LYS:HB2 | 11 | 0.17 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG21 | 11 | 0.17 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG22 | 11 | 0.17 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG23 | 11 | 0.17 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:67:LEU:HB2 | 11 | 0.17 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:24:LYS:HB2 | 20 | 0.17 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG21 | 20 | 0.17 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG22 | 20 | 0.17 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG23 | 20 | 0.17 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:67:LEU:HB2 | 20 | 0.17 |
| (1,652) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:6:GLN:HB2 | 8 | 0.17 |
| (1,652) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:84:LEU:HB2 | 8 | 0.17 |
| (1,652) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:6:GLN:HB2 | 14 | 0.17 |
| (1,652) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:84:LEU:HB2 | 14 | 0.17 |
| (1,652) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:6:GLN:HB2 | 18 | 0.17 |
| (1,652) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:84:LEU:HB2 | 18 | 0.17 |
| (1,551) | 1:A:77:ASP:H | 1:A:73:ARG:HB2 | 9 | 0.17 |
| (1,551) | 1:A:77:ASP:H | 1:A:73:ARG:HB3 | 9 | 0.17 |
| (1,551) | 1:A:77:ASP:H | 1:A:73:ARG:HB2 | 10 | 0.17 |
| (1,551) | 1:A:77:ASP:H | 1:A:73:ARG:HB3 | 10 | 0.17 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD13 | 11 | 0.17 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD11 | 11 | 0.17 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD12 | 11 | 0.17 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB1 | 1:A:61:ASN:HA | 11 | 0.17 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB2 | 1:A:61:ASN:HA | 11 | 0.17 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB3 | 1:A:61:ASN:HA | 11 | 0.17 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG21 | 11 | 0.17 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG23 | 11 | 0.17 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG22 | 11 | 0.17 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD13 | 12 | 0.17 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD11 | 12 | 0.17 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD12 | 12 | 0.17 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB1 | 1:A:61:ASN:HA | 12 | 0.17 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB2 | 1:A:61:ASN:HA | 12 | 0.17 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB3 | 1:A:61:ASN:HA | 12 | 0.17 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG21 | 12 | 0.17 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG23 | 12 | 0.17 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG22 | 12 | 0.17 |
| (1,458) | 1:A:82:LEU:HD12 | 1:A:6:GLN:HG2 | 2 | 0.17 |
| (1,458) | 1:A:82:LEU:HD11 | 1:A:6:GLN:HG2 | 2 | 0.17 |
| (1,458) | 1:A:82:LEU:HD13 | 1:A:6:GLN:HG2 | 2 | 0.17 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,458) | 1:A:82:LEU:HD12 | 1:A:6:GLN:HG3 | 2 | 0.17 |
| (1,458) | 1:A:82:LEU:HD11 | 1:A:6:GLN:HG3 | 2 | 0.17 |
| (1,458) | 1:A:82:LEU:HD13 | 1:A:6:GLN:HG3 | 2 | 0.17 |
| (1,422) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:73:ARG:HA | 9 | 0.17 |
| (1,422) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HA | 9 | 0.17 |
| (1,422) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:73:ARG:HA | 11 | 0.17 |
| (1,422) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HA | 11 | 0.17 |
| (1,422) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:73:ARG:HA | 16 | 0.17 |
| (1,422) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HA | 16 | 0.17 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:69:ASP:HB2 | 13 | 0.17 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:69:ASP:HB2 | 13 | 0.17 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:69:ASP:HB2 | 13 | 0.17 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:73:ARG:HD3 | 13 | 0.17 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:73:ARG:HD3 | 13 | 0.17 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:73:ARG:HD3 | 13 | 0.17 |
| (1,370) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:72:LYS:HD2 | 1 | 0.17 |
| (1,370) | 1:A:72:LYS:HG2 | 1:A:66:ILE:HA | 1 | 0.17 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:72:LYS:HE3 | 6 | 0.17 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:76:TYR:HB2 | 6 | 0.17 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:76:TYR:HB3 | 6 | 0.17 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:72:LYS:HE3 | 9 | 0.17 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:76:TYR:HB2 | 9 | 0.17 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:76:TYR:HB3 | 9 | 0.17 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:72:LYS:HE3 | 13 | 0.17 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:76:TYR:HB2 | 13 | 0.17 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:76:TYR:HB3 | 13 | 0.17 |
| (1,311) | 1:A:54:ALA:HB1 | 1:A:58:LYS:HE2 | 17 | 0.17 |
| (1,311) | 1:A:54:ALA:HB2 | 1:A:58:LYS:HE2 | 17 | 0.17 |
| (1,311) | 1:A:54:ALA:HB3 | 1:A:58:LYS:HE2 | 17 | 0.17 |
| (1,311) | 1:A:54:ALA:HB1 | 1:A:58:LYS:HE3 | 17 | 0.17 |
| (1,311) | 1:A:54:ALA:HB2 | 1:A:58:LYS:HE3 | 17 | 0.17 |
| (1,311) | 1:A:54:ALA:HB3 | 1:A:58:LYS:HE3 | 17 | 0.17 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:55:ASP:HB2 | 10 | 0.17 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:56:LYS:HE2 | 10 | 0.17 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:56:LYS:HE3 | 10 | 0.17 |
| (1,2947) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:44:PRO:HB2 | 4 | 0.17 |
| (1,2813) | 1:A:89:GLN:H | 1:A:90:PHE:HB3 | 16 | 0.17 |
| (1,2787) | 1:A:57:PHE:H | 1:A:42:TYR:HD2 | 6 | 0.17 |
| (1,2787) | 1:A:57:PHE:H | 1:A:42:TYR:HD1 | 6 | 0.17 |
| (1,2747) | 1:A:78:LYS:H | 1:A:6:GLN:HE22 | 10 | 0.17 |
| (1,2635) | 1:A:10:SEP:H | 1:A:82:LEU:H | 14 | 0.17 |
| (1,2635) | 1:A:10:SEP:H | 1:A:82:LEU:H | 19 | 0.17 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2635) | 1:A:10:SEP:H | 1:A:82:LEU:H | 20 | 0.17 |
| (1,2519) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:72:LYS:H | 6 | 0.17 |
| (1,2519) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:72:LYS:H | 6 | 0.17 |
| (1,2519) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:72:LYS:H | 6 | 0.17 |
| (1,2512) | 1:A:55:ASP:HB3 | 1:A:55:ASP:HA | 6 | 0.17 |
| (1,2512) | 1:A:55:ASP:HB3 | 1:A:55:ASP:HA | 11 | 0.17 |
| (1,2512) | 1:A:55:ASP:HB3 | 1:A:55:ASP:HA | 12 | 0.17 |
| (1,2512) | 1:A:55:ASP:HB3 | 1:A:55:ASP:HA | 16 | 0.17 |
| (1,2512) | 1:A:55:ASP:HB3 | 1:A:55:ASP:HA | 19 | 0.17 |
| (1,2453) | 1:A:100:VAL:HG21 | 1:A:100:VAL:H | 7 | 0.17 |
| (1,2453) | 1:A:100:VAL:HG22 | 1:A:100:VAL:H | 7 | 0.17 |
| (1,2453) | 1:A:100:VAL:HG23 | 1:A:100:VAL:H | 7 | 0.17 |
| (1,2405) | 1:A:90:PHE:H | 1:A:89:GLN:HG3 | 9 | 0.17 |
| (1,2405) | 1:A:90:PHE:H | 1:A:89:GLN:HG3 | 13 | 0.17 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:89:GLN:HE21 | 3 | 0.17 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD12 | 1:A:89:GLN:HE21 | 3 | 0.17 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD13 | 1:A:89:GLN:HE21 | 3 | 0.17 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:89:GLN:HE22 | 3 | 0.17 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD12 | 1:A:89:GLN:HE22 | 3 | 0.17 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD13 | 1:A:89:GLN:HE22 | 3 | 0.17 |
| (1,2387) | 1:A:94:ASN:HD22 | 1:A:93:GLU:HG3 | 19 | 0.17 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG12 | 1 | 0.17 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG11 | 1 | 0.17 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG13 | 1 | 0.17 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG12 | 7 | 0.17 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG11 | 7 | 0.17 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG13 | 7 | 0.17 |
| (1,2324) | 1:A:84:LEU:HB2 | 1:A:88:GLU:HB3 | 10 | 0.17 |
| (1,2265) | 1:A:81:SER:HA | 1:A:84:LEU:HB3 | 3 | 0.17 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG22 | 3 | 0.17 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG21 | 3 | 0.17 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG23 | 3 | 0.17 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD22 | 14 | 0.17 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD21 | 14 | 0.17 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:67:LEU:HD23 | 14 | 0.17 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD22 | 14 | 0.17 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD21 | 14 | 0.17 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:67:LEU:HD23 | 14 | 0.17 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD22 | 14 | 0.17 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD21 | 14 | 0.17 |
| (1,2130) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:67:LEU:HD23 | 14 | 0.17 |
| (1,2113) | 1:A:67:LEU:HD11 | 1:A:17:TYR:HA | 16 | 0.17 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2113) | 1:A:67:LEU:HD12 | 1:A:17:TYR:HA | 16 | 0.17 |
| (1,2113) | 1:A:67:LEU:HD13 | 1:A:17:TYR:HA | 16 | 0.17 |
| (1,206) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:32:LYS:HE3 | 8 | 0.17 |
| (1,206) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:32:LYS:HE2 | 8 | 0.17 |
| (1,2) | 1:A:61:ASN:HB3 | 1:A:61:ASN:HD22 | 12 | 0.17 |
| (1,2) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:61:ASN:HD22 | 12 | 0.17 |
| (1,2) | 1:A:61:ASN:HB3 | 1:A:61:ASN:HD22 | 16 | 0.17 |
| (1,2) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:61:ASN:HD22 | 16 | 0.17 |
| (1,2) | 1:A:61:ASN:HB3 | 1:A:61:ASN:HD22 | 18 | 0.17 |
| (1,2) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:61:ASN:HD22 | 18 | 0.17 |
| (1,1974) | 1:A:59:GLU:HA | 1:A:58:LYS:HG3 | 15 | 0.17 |
| (1,1952) | 1:A:78:LYS:HG2 | 1:A:78:LYS:H | 3 | 0.17 |
| (1,182) | 1:A:29:ASP:H | 1:A:28:SER:HA | 7 | 0.17 |
| (1,182) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:28:SER:HA | 7 | 0.17 |
| (1,182) | 1:A:29:ASP:H | 1:A:28:SER:HA | 17 | 0.17 |
| (1,182) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:28:SER:HA | 17 | 0.17 |
| (1,1773) | 1:A:47:ASN:HA | 1:A:46:LYS:HB3 | 7 | 0.17 |
| (1,1773) | 1:A:47:ASN:HA | 1:A:46:LYS:HB3 | 14 | 0.17 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:68:THR:HB | 12 | 0.17 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:68:THR:HB | 12 | 0.17 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:68:THR:HB | 12 | 0.17 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:34:SER:HB3 | 12 | 0.17 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:34:SER:HB3 | 12 | 0.17 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:34:SER:HB3 | 12 | 0.17 |
| (1,1754) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:HB3 | 15 | 0.17 |
| (1,1753) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:HB2 | 11 | 0.17 |
| (1,1750) | 1:A:46:LYS:HD3 | 1:A:46:LYS:HB2 | 2 | 0.17 |
| (1,1650) | 1:A:41:LYS:HD3 | 1:A:42:TYR:HE2 | 6 | 0.17 |
| (1,1650) | 1:A:41:LYS:HD3 | 1:A:42:TYR:HE1 | 6 | 0.17 |
| (1,1609) | 1:A:39:ALA:HA | 1:A:41:LYS:H | 3 | 0.17 |
| (1,1450) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:27:THR:HG21 | 9 | 0.17 |
| (1,1450) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:27:THR:HG22 | 9 | 0.17 |
| (1,1450) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:27:THR:HG23 | 9 | 0.17 |
| (1,1427) | 1:A:26:ALA:HA | 1:A:30:ASP:H | 8 | 0.17 |
| (1,1427) | 1:A:26:ALA:HA | 1:A:30:ASP:H | 9 | 0.17 |
| (1,1427) | 1:A:26:ALA:HA | 1:A:30:ASP:H | 17 | 0.17 |
| (1,1421) | 1:A:25:ASN:HA | 1:A:25:ASN:HD22 | 8 | 0.17 |
| (1,1421) | 1:A:25:ASN:HA | 1:A:25:ASN:HD22 | 11 | 0.17 |
| (1,1411) | 1:A:23:ASP:HB2 | 1:A:24:LYS:HG3 | 9 | 0.17 |
| (1,1408) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HA | 13 | 0.17 |
| (1,1373) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:31:ILE:H | 13 | 0.17 |
| (1,1368) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:25:ASN:HD22 | 12 | 0.17 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1368) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:25:ASN:HD22 | 12 | 0.17 |
| (1,1368) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:25:ASN:HD22 | 12 | 0.17 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD22 | 3 | 0.17 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD21 | 3 | 0.17 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD23 | 3 | 0.17 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:26:ALA:HA | 3 | 0.17 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:26:ALA:HA | 3 | 0.17 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:26:ALA:HA | 3 | 0.17 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD22 | 18 | 0.17 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD21 | 18 | 0.17 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD23 | 18 | 0.17 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:26:ALA:HA | 18 | 0.17 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:26:ALA:HA | 18 | 0.17 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:26:ALA:HA | 18 | 0.17 |
| (1,1266) | 1:A:95:VAL:HG21 | 1:A:94:ASN:HA | 9 | 0.17 |
| (1,1266) | 1:A:95:VAL:HG22 | 1:A:94:ASN:HA | 9 | 0.17 |
| (1,1266) | 1:A:95:VAL:HG23 | 1:A:94:ASN:HA | 9 | 0.17 |
| (1,1237) | 1:A:20:LEU:H | 1:A:18:HIS:HA | 9 | 0.17 |
| (1,1237) | 1:A:20:LEU:H | 1:A:18:HIS:HA | 12 | 0.17 |
| (1,1237) | 1:A:20:LEU:H | 1:A:18:HIS:HA | 14 | 0.17 |
| (1,1197) | 1:A:67:LEU:HD22 | 1:A:73:ARG:HD3 | 7 | 0.17 |
| (1,1197) | 1:A:67:LEU:HD21 | 1:A:73:ARG:HD3 | 7 | 0.17 |
| (1,1197) | 1:A:67:LEU:HD23 | 1:A:73:ARG:HD3 | 7 | 0.17 |
| (1,1112) | 1:A:12:SER:HB2 | 1:A:14:GLU:HG2 | 9 | 0.17 |
| (1,1112) | 1:A:12:SER:HB2 | 1:A:14:GLU:HG2 | 15 | 0.17 |
| (1,1071) | 1:A:99:PHE:HA | 1:A:99:PHE:HB2 | 6 | 0.17 |
| (1,1071) | 1:A:99:PHE:HA | 1:A:99:PHE:HB2 | 11 | 0.17 |
| (1,1071) | 1:A:99:PHE:HA | 1:A:99:PHE:HB2 | 14 | 0.17 |
| (1,1071) | 1:A:99:PHE:HA | 1:A:99:PHE:HB2 | 16 | 0.17 |
| (1,1069) | 1:A:42:TYR:HA | 1:A:42:TYR:HD2 | 11 | 0.17 |
| (1,1069) | 1:A:42:TYR:HA | 1:A:42:TYR:HD1 | 11 | 0.17 |
| (1,996) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:6:GLN:HG2 | 17 | 0.16 |
| (1,984) | 1:A:5:ARG:HA | 1:A:5:ARG:HG2 | 11 | 0.16 |
| (1,980) | 1:A:5:ARG:HA | 1:A:5:ARG:HB2 | 12 | 0.16 |
| (1,968) | 1:A:43:HIS:HB3 | 1:A:42:TYR:H | 1 | 0.16 |
| (1,915) | 1:A:46:LYS:HG3 | 1:A:46:LYS:HA | 5 | 0.16 |
| (1,802) | 1:A:72:LYS:H | 1:A:75:ILE:HB | 3 | 0.16 |
| (1,802) | 1:A:72:LYS:H | 1:A:88:GLU:HB3 | 3 | 0.16 |
| (1,802) | 1:A:72:LYS:H | 1:A:75:ILE:HB | 4 | 0.16 |
| (1,802) | 1:A:72:LYS:H | 1:A:88:GLU:HB3 | 4 | 0.16 |
| (1,802) | 1:A:72:LYS:H | 1:A:75:ILE:HB | 5 | 0.16 |
| (1,802) | 1:A:72:LYS:H | 1:A:88:GLU:HB3 | 5 | 0.16 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,793) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:44:PRO:HB3 | 1 | 0.16 |
| (1,793) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:44:PRO:HD3 | 1 | 0.16 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HB2 | 7 | 0.16 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HB3 | 7 | 0.16 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HG2 | 7 | 0.16 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HB2 | 16 | 0.16 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HB3 | 16 | 0.16 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HG2 | 16 | 0.16 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD11 | 12 | 0.16 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD13 | 12 | 0.16 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD12 | 12 | 0.16 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD13 | 12 | 0.16 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD11 | 12 | 0.16 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD12 | 12 | 0.16 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG21 | 12 | 0.16 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG23 | 12 | 0.16 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG22 | 12 | 0.16 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD11 | 16 | 0.16 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD13 | 16 | 0.16 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD12 | 16 | 0.16 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD13 | 16 | 0.16 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD11 | 16 | 0.16 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD12 | 16 | 0.16 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG21 | 16 | 0.16 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG23 | 16 | 0.16 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG22 | 16 | 0.16 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD11 | 20 | 0.16 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD13 | 20 | 0.16 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:20:LEU:HD12 | 20 | 0.16 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD13 | 20 | 0.16 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD11 | 20 | 0.16 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:84:LEU:HD12 | 20 | 0.16 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG21 | 20 | 0.16 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG23 | 20 | 0.16 |
| (1,747) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:60:ILE:HG22 | 20 | 0.16 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:11:THR:H | 4 | 0.16 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:11:THR:H | 4 | 0.16 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:11:THR:H | 4 | 0.16 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:86:VAL:H | 4 | 0.16 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:86:VAL:H | 4 | 0.16 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:86:VAL:H | 4 | 0.16 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:11:THR:H | 13 | 0.16 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:11:THR:H | 13 | 0.16 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:11:THR:H | 13 | 0.16 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:86:VAL:H | 13 | 0.16 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:86:VAL:H | 13 | 0.16 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:86:VAL:H | 13 | 0.16 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:11:THR:H | 14 | 0.16 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:11:THR:H | 14 | 0.16 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:11:THR:H | 14 | 0.16 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:86:VAL:H | 14 | 0.16 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:86:VAL:H | 14 | 0.16 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:86:VAL:H | 14 | 0.16 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD22 | 7 | 0.16 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD21 | 7 | 0.16 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD23 | 7 | 0.16 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:39:ALA:HB1 | 7 | 0.16 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:39:ALA:HB2 | 7 | 0.16 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:39:ALA:HB3 | 7 | 0.16 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD22 | 20 | 0.16 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD21 | 20 | 0.16 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD23 | 20 | 0.16 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:39:ALA:HB1 | 20 | 0.16 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:39:ALA:HB2 | 20 | 0.16 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:39:ALA:HB3 | 20 | 0.16 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:24:LYS:HB2 | 6 | 0.16 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG21 | 6 | 0.16 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG22 | 6 | 0.16 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG23 | 6 | 0.16 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:67:LEU:HB2 | 6 | 0.16 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:24:LYS:HB2 | 13 | 0.16 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG21 | 13 | 0.16 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG22 | 13 | 0.16 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG23 | 13 | 0.16 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:67:LEU:HB2 | 13 | 0.16 |
| (1,655) | 1:A:78:LYS:H | 1:A:76:TYR:HB2 | 15 | 0.16 |
| (1,655) | 1:A:78:LYS:H | 1:A:76:TYR:HB3 | 15 | 0.16 |
| (1,655) | 1:A:78:LYS:H | 1:A:79:TYR:HB3 | 15 | 0.16 |
| (1,644) | 1:A:84:LEU:H | 1:A:92:GLU:HG3 | 10 | 0.16 |
| (1,644) | 1:A:84:LEU:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 10 | 0.16 |
| (1,604) | 1:A:8:SER:H | 1:A:7:ARG:HG2 | 14 | 0.16 |
| (1,604) | 1:A:8:SER:H | 1:A:7:ARG:HG3 | 14 | 0.16 |
| (1,574) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HG2 | 6 | 0.16 |
| (1,574) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HD2 | 6 | 0.16 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,574) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HG2 | 20 | 0.16 |
| (1,574) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HD2 | 20 | 0.16 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD13 | 15 | 0.16 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD11 | 15 | 0.16 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD12 | 15 | 0.16 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB1 | 1:A:61:ASN:HA | 15 | 0.16 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB2 | 1:A:61:ASN:HA | 15 | 0.16 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB3 | 1:A:61:ASN:HA | 15 | 0.16 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG21 | 15 | 0.16 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG23 | 15 | 0.16 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG22 | 15 | 0.16 |
| (1,494) | 1:A:97:THR:HA | 1:A:96:ASN:HB3 | 12 | 0.16 |
| (1,494) | 1:A:97:THR:HA | 1:A:96:ASN:HB2 | 12 | 0.16 |
| (1,471) | 1:A:84:LEU:HB2 | 1:A:85:TYR:HA | 17 | 0.16 |
| (1,471) | 1:A:85:TYR:HA | 1:A:88:GLU:HG3 | 17 | 0.16 |
| (1,422) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:73:ARG:HA | 15 | 0.16 |
| (1,422) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HA | 15 | 0.16 |
| (1,370) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:72:LYS:HD2 | 3 | 0.16 |
| (1,370) | 1:A:72:LYS:HG2 | 1:A:66:ILE:HA | 3 | 0.16 |
| (1,370) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:72:LYS:HD2 | 4 | 0.16 |
| (1,370) | 1:A:72:LYS:HG2 | 1:A:66:ILE:HA | 4 | 0.16 |
| (1,370) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:72:LYS:HD2 | 9 | 0.16 |
| (1,370) | 1:A:72:LYS:HG2 | 1:A:66:ILE:HA | 9 | 0.16 |
| (1,370) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:72:LYS:HD2 | 10 | 0.16 |
| (1,370) | 1:A:72:LYS:HG2 | 1:A:66:ILE:HA | 10 | 0.16 |
| (1,370) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:72:LYS:HD2 | 15 | 0.16 |
| (1,370) | 1:A:72:LYS:HG2 | 1:A:66:ILE:HA | 15 | 0.16 |
| (1,3117) | 1:A:50:ASN:HD22 | 1:A:50:ASN:HB3 | 14 | 0.16 |
| (1,3117) | 1:A:50:ASN:HD22 | 1:A:50:ASN:HB3 | 19 | 0.16 |
| (1,3097) | 1:A:80:GLY:H | 1:A:13:GLY:H | 17 | 0.16 |
| (1,3023) | 1:A:5:ARG:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 13 | 0.16 |
| (1,2976) | 1:A:42:TYR:H | 1:A:40:LEU:HA | 16 | 0.16 |
| (1,2947) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:44:PRO:HB2 | 10 | 0.16 |
| (1,2869) | 1:A:47:ASN:H | 1:A:46:LYS:HB3 | 5 | 0.16 |
| (1,2843) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:67:LEU:HB2 | 10 | 0.16 |
| (1,2837) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:41:LYS:HB2 | 4 | 0.16 |
| (1,2813) | 1:A:89:GLN:H | 1:A:90:PHE:HB3 | 2 | 0.16 |
| (1,2813) | 1:A:89:GLN:H | 1:A:90:PHE:HB3 | 19 | 0.16 |
| (1,2787) | 1:A:57:PHE:H | 1:A:42:TYR:HD2 | 5 | 0.16 |
| (1,2787) | 1:A:57:PHE:H | 1:A:42:TYR:HD1 | 5 | 0.16 |
| (1,2787) | 1:A:57:PHE:H | 1:A:42:TYR:HD2 | 8 | 0.16 |
| (1,2787) | 1:A:57:PHE:H | 1:A:42:TYR:HD1 | 8 | 0.16 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2635) | 1:A:10:SEP:H | 1:A:82:LEU:H | 10 | 0.16 |
| (1,2635) | 1:A:10:SEP:H | 1:A:82:LEU:H | 18 | 0.16 |
| (1,2539) | 1:A:96:ASN:HD21 | 1:A:96:ASN:HB2 | 10 | 0.16 |
| (1,2530) | 1:A:93:GLU:HA | 1:A:92:GLU:HA | 19 | 0.16 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:89:GLN:HE21 | 20 | 0.16 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD12 | 1:A:89:GLN:HE21 | 20 | 0.16 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD13 | 1:A:89:GLN:HE21 | 20 | 0.16 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:89:GLN:HE22 | 20 | 0.16 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD12 | 1:A:89:GLN:HE22 | 20 | 0.16 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD13 | 1:A:89:GLN:HE22 | 20 | 0.16 |
| (1,2386) | 1:A:94:ASN:HD22 | 1:A:93:GLU:HG2 | 14 | 0.16 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG12 | 12 | 0.16 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG11 | 12 | 0.16 |
| (1,2345) | 1:A:85:TYR:HB2 | 1:A:86:VAL:HG13 | 12 | 0.16 |
| (1,2324) | 1:A:84:LEU:HB2 | 1:A:88:GLU:HB3 | 1 | 0.16 |
| (1,2324) | 1:A:84:LEU:HB2 | 1:A:88:GLU:HB3 | 11 | 0.16 |
| (1,2313) | 1:A:83:GLY:HA2 | 1:A:85:TYR:HD2 | 1 | 0.16 |
| (1,2313) | 1:A:83:GLY:HA2 | 1:A:85:TYR:HD1 | 1 | 0.16 |
| (1,2265) | 1:A:81:SER:HA | 1:A:84:LEU:HB3 | 7 | 0.16 |
| (1,2145) | 1:A:74:ASN:HB2 | 1:A:70:ALA:HA | 4 | 0.16 |
| (1,2092) | 1:A:66:ILE:HG21 | 1:A:72:LYS:H | 7 | 0.16 |
| (1,2092) | 1:A:66:ILE:HG22 | 1:A:72:LYS:H | 7 | 0.16 |
| (1,2092) | 1:A:66:ILE:HG23 | 1:A:72:LYS:H | 7 | 0.16 |
| (1,2) | 1:A:61:ASN:HB3 | 1:A:61:ASN:HD22 | 14 | 0.16 |
| (1,2) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:61:ASN:HD22 | 14 | 0.16 |
| (1,2) | 1:A:61:ASN:HB3 | 1:A:61:ASN:HD22 | 17 | 0.16 |
| (1,2) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:61:ASN:HD22 | 17 | 0.16 |
| (1,2) | 1:A:61:ASN:HB3 | 1:A:61:ASN:HD22 | 20 | 0.16 |
| (1,2) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:61:ASN:HD22 | 20 | 0.16 |
| (1,1939) | 1:A:56:LYS:HD2 | 1:A:42:TYR:HD2 | 2 | 0.16 |
| (1,1939) | 1:A:56:LYS:HD2 | 1:A:42:TYR:HD1 | 2 | 0.16 |
| (1,182) | 1:A:29:ASP:H | 1:A:28:SER:HA | 12 | 0.16 |
| (1,182) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:28:SER:HA | 12 | 0.16 |
| (1,182) | 1:A:29:ASP:H | 1:A:28:SER:HA | 13 | 0.16 |
| (1,182) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:28:SER:HA | 13 | 0.16 |
| (1,1773) | 1:A:47:ASN:HA | 1:A:46:LYS:HB3 | 19 | 0.16 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:68:THR:HB | 18 | 0.16 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:68:THR:HB | 18 | 0.16 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:68:THR:HB | 18 | 0.16 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:34:SER:HB3 | 18 | 0.16 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:34:SER:HB3 | 18 | 0.16 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:34:SER:HB3 | 18 | 0.16 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1754) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:HB3 | 13 | 0.16 |
| (1,1655) | 1:A:41:LYS:HD3 | 1:A:41:LYS:HB2 | 18 | 0.16 |
| (1,1571) | 1:A:58:LYS:HG2 | 1:A:58:LYS:HA | 7 | 0.16 |
| (1,1450) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:27:THR:HG21 | 19 | 0.16 |
| (1,1450) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:27:THR:HG22 | 19 | 0.16 |
| (1,1450) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:27:THR:HG23 | 19 | 0.16 |
| (1,1427) | 1:A:26:ALA:HA | 1:A:30:ASP:H | 20 | 0.16 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD22 | 13 | 0.16 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD21 | 13 | 0.16 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD23 | 13 | 0.16 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:26:ALA:HA | 13 | 0.16 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:26:ALA:HA | 13 | 0.16 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:26:ALA:HA | 13 | 0.16 |
| (1,1280) | 1:A:95:VAL:HG21 | 1:A:90:PHE:HB2 | 1 | 0.16 |
| (1,1280) | 1:A:95:VAL:HG22 | 1:A:90:PHE:HB2 | 1 | 0.16 |
| (1,1280) | 1:A:95:VAL:HG23 | 1:A:90:PHE:HB2 | 1 | 0.16 |
| (1,1280) | 1:A:95:VAL:HG21 | 1:A:90:PHE:HB2 | 8 | 0.16 |
| (1,1280) | 1:A:95:VAL:HG22 | 1:A:90:PHE:HB2 | 8 | 0.16 |
| (1,1280) | 1:A:95:VAL:HG23 | 1:A:90:PHE:HB2 | 8 | 0.16 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG21 | 1:A:26:ALA:HA | 13 | 0.16 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG22 | 1:A:26:ALA:HA | 13 | 0.16 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG23 | 1:A:26:ALA:HA | 13 | 0.16 |
| (1,1266) | 1:A:95:VAL:HG21 | 1:A:94:ASN:HA | 20 | 0.16 |
| (1,1266) | 1:A:95:VAL:HG22 | 1:A:94:ASN:HA | 20 | 0.16 |
| (1,1266) | 1:A:95:VAL:HG23 | 1:A:94:ASN:HA | 20 | 0.16 |
| (1,1237) | 1:A:20:LEU:H | 1:A:18:HIS:HA | 3 | 0.16 |
| (1,1237) | 1:A:20:LEU:H | 1:A:18:HIS:HA | 4 | 0.16 |
| (1,1237) | 1:A:20:LEU:H | 1:A:18:HIS:HA | 6 | 0.16 |
| (1,1237) | 1:A:20:LEU:H | 1:A:18:HIS:HA | 11 | 0.16 |
| (1,1237) | 1:A:20:LEU:H | 1:A:18:HIS:HA | 17 | 0.16 |
| (1,1237) | 1:A:20:LEU:H | 1:A:18:HIS:HA | 20 | 0.16 |
| (1,1104) | 1:A:12:SER:HB2 | 1:A:14:GLU:H | 9 | 0.16 |
| (1,109) | 1:A:18:HIS:HB2 | 1:A:15:SER:HB3 | 5 | 0.16 |
| (1,109) | 1:A:18:HIS:HB3 | 1:A:15:SER:HB3 | 5 | 0.16 |
| (1,109) | 1:A:18:HIS:HB2 | 1:A:15:SER:HB3 | 16 | 0.16 |
| (1,109) | 1:A:18:HIS:HB3 | 1:A:15:SER:HB3 | 16 | 0.16 |
| (1,1071) | 1:A:99:PHE:HA | 1:A:99:PHE:HB2 | 5 | 0.16 |
| (1,1008) | 1:A:8:SER:HA | 1:A:9:LEU:HD11 | 12 | 0.16 |
| (1,1008) | 1:A:8:SER:HA | 1:A:9:LEU:HD13 | 12 | 0.16 |
| (1,1008) | 1:A:8:SER:HA | 1:A:9:LEU:HD12 | 12 | 0.16 |
| (1,984) | 1:A:5:ARG:HA | 1:A:5:ARG:HG2 | 12 | 0.15 |
| (1,980) | 1:A:5:ARG:HA | 1:A:5:ARG:HB2 | 1 | 0.15 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,980) | 1:A:5:ARG:HA | 1:A:5:ARG:HB2 | 10 | 0.15 |
| (1,980) | 1:A:5:ARG:HA | 1:A:5:ARG:HB2 | 14 | 0.15 |
| (1,915) | 1:A:46:LYS:HG3 | 1:A:46:LYS:HA | 13 | 0.15 |
| (1,915) | 1:A:46:LYS:HG3 | 1:A:46:LYS:HA | 18 | 0.15 |
| (1,827) | 1:A:31:ILE:H | 1:A:32:LYS:HA | 10 | 0.15 |
| (1,827) | 1:A:31:ILE:H | 1:A:34:SER:HB3 | 10 | 0.15 |
| (1,827) | 1:A:31:ILE:H | 1:A:68:THR:HB | 10 | 0.15 |
| (1,827) | 1:A:31:ILE:H | 1:A:32:LYS:HA | 18 | 0.15 |
| (1,827) | 1:A:31:ILE:H | 1:A:34:SER:HB3 | 18 | 0.15 |
| (1,827) | 1:A:31:ILE:H | 1:A:68:THR:HB | 18 | 0.15 |
| (1,807) | 1:A:43:HIS:H | 1:A:38:LEU:HD11 | 20 | 0.15 |
| (1,807) | 1:A:43:HIS:H | 1:A:38:LEU:HD12 | 20 | 0.15 |
| (1,807) | 1:A:43:HIS:H | 1:A:38:LEU:HD13 | 20 | 0.15 |
| (1,807) | 1:A:43:HIS:H | 1:A:38:LEU:HD22 | 20 | 0.15 |
| (1,807) | 1:A:43:HIS:H | 1:A:38:LEU:HD21 | 20 | 0.15 |
| (1,807) | 1:A:43:HIS:H | 1:A:38:LEU:HD23 | 20 | 0.15 |
| (1,807) | 1:A:43:HIS:H | 1:A:39:ALA:HB1 | 20 | 0.15 |
| (1,807) | 1:A:43:HIS:H | 1:A:39:ALA:HB2 | 20 | 0.15 |
| (1,807) | 1:A:43:HIS:H | 1:A:39:ALA:HB3 | 20 | 0.15 |
| (1,802) | 1:A:72:LYS:H | 1:A:75:ILE:HB | 2 | 0.15 |
| (1,802) | 1:A:72:LYS:H | 1:A:88:GLU:HB3 | 2 | 0.15 |
| (1,793) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:44:PRO:HB3 | 9 | 0.15 |
| (1,793) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:44:PRO:HD3 | 9 | 0.15 |
| (1,793) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:44:PRO:HB3 | 11 | 0.15 |
| (1,793) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:44:PRO:HD3 | 11 | 0.15 |
| (1,793) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:44:PRO:HB3 | 12 | 0.15 |
| (1,793) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:44:PRO:HD3 | 12 | 0.15 |
| (1,793) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:44:PRO:HB3 | 15 | 0.15 |
| (1,793) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:44:PRO:HD3 | 15 | 0.15 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HB2 | 1 | 0.15 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HB3 | 1 | 0.15 |
| (1,767) | 1:A:40:LEU:H | 1:A:36:ARG:HG2 | 1 | 0.15 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:11:THR:H | 16 | 0.15 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:11:THR:H | 16 | 0.15 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:11:THR:H | 16 | 0.15 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:86:VAL:H | 16 | 0.15 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:86:VAL:H | 16 | 0.15 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:86:VAL:H | 16 | 0.15 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD22 | 18 | 0.15 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD21 | 18 | 0.15 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD23 | 18 | 0.15 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:39:ALA:HB1 | 18 | 0.15 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:39:ALA:HB2 | 18 | 0.15 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:39:ALA:HB3 | 18 | 0.15 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:24:LYS:HB2 | 3 | 0.15 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG21 | 3 | 0.15 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG22 | 3 | 0.15 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG23 | 3 | 0.15 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:67:LEU:HB2 | 3 | 0.15 |
| (1,652) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:6:GLN:HB2 | 10 | 0.15 |
| (1,652) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:84:LEU:HB2 | 10 | 0.15 |
| (1,652) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:6:GLN:HB2 | 16 | 0.15 |
| (1,652) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:84:LEU:HB2 | 16 | 0.15 |
| (1,644) | 1:A:84:LEU:H | 1:A:92:GLU:HG3 | 18 | 0.15 |
| (1,644) | 1:A:84:LEU:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 18 | 0.15 |
| (1,604) | 1:A:8:SER:H | 1:A:7:ARG:HG2 | 19 | 0.15 |
| (1,604) | 1:A:8:SER:H | 1:A:7:ARG:HG3 | 19 | 0.15 |
| (1,596) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:3:ASP:HB2 | 10 | 0.15 |
| (1,596) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:3:ASP:HB3 | 10 | 0.15 |
| (1,574) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HG2 | 7 | 0.15 |
| (1,574) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HD2 | 7 | 0.15 |
| (1,574) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HG2 | 18 | 0.15 |
| (1,574) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HD2 | 18 | 0.15 |
| (1,551) | 1:A:77:ASP:H | 1:A:73:ARG:HB2 | 1 | 0.15 |
| (1,551) | 1:A:77:ASP:H | 1:A:73:ARG:HB3 | 1 | 0.15 |
| (1,551) | 1:A:77:ASP:H | 1:A:73:ARG:HB2 | 2 | 0.15 |
| (1,551) | 1:A:77:ASP:H | 1:A:73:ARG:HB3 | 2 | 0.15 |
| (1,543) | 1:A:96:ASN:HB3 | 1:A:87:ALA:HA | 3 | 0.15 |
| (1,543) | 1:A:96:ASN:HB3 | 1:A:95:VAL:HA | 3 | 0.15 |
| (1,543) | 1:A:96:ASN:HB2 | 1:A:87:ALA:HA | 3 | 0.15 |
| (1,502) | 1:A:34:SER:HB3 | 1:A:33:LYS:HB2 | 19 | 0.15 |
| (1,502) | 1:A:34:SER:HB3 | 1:A:33:LYS:HB3 | 19 | 0.15 |
| (1,502) | 1:A:33:LYS:HB3 | 1:A:34:SER:HB2 | 19 | 0.15 |
| (1,502) | 1:A:37:LYS:HB2 | 1:A:38:LEU:HA | 19 | 0.15 |
| (1,502) | 1:A:37:LYS:HB3 | 1:A:38:LEU:HA | 19 | 0.15 |
| (1,458) | 1:A:82:LEU:HD12 | 1:A:6:GLN:HG2 | 4 | 0.15 |
| (1,458) | 1:A:82:LEU:HD11 | 1:A:6:GLN:HG2 | 4 | 0.15 |
| (1,458) | 1:A:82:LEU:HD13 | 1:A:6:GLN:HG2 | 4 | 0.15 |
| (1,458) | 1:A:82:LEU:HD12 | 1:A:6:GLN:HG3 | 4 | 0.15 |
| (1,458) | 1:A:82:LEU:HD11 | 1:A:6:GLN:HG3 | 4 | 0.15 |
| (1,458) | 1:A:82:LEU:HD13 | 1:A:6:GLN:HG3 | 4 | 0.15 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG22 | 1:A:84:LEU:HB3 | 10 | 0.15 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG21 | 1:A:84:LEU:HB3 | 10 | 0.15 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:84:LEU:HB3 | 10 | 0.15 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG22 | 1:A:72:LYS:HB3 | 10 | 0.15 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG21 | 1:A:72:LYS:HB3 | 10 | 0.15 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:72:LYS:HB3 | 10 | 0.15 |
| (1,422) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:73:ARG:HA | 4 | 0.15 |
| (1,422) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HA | 4 | 0.15 |
| (1,422) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:73:ARG:HA | 14 | 0.15 |
| (1,422) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HA | 14 | 0.15 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:69:ASP:HB2 | 12 | 0.15 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:69:ASP:HB2 | 12 | 0.15 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:69:ASP:HB2 | 12 | 0.15 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:73:ARG:HD3 | 12 | 0.15 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:73:ARG:HD3 | 12 | 0.15 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:73:ARG:HD3 | 12 | 0.15 |
| (1,370) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:72:LYS:HD2 | 12 | 0.15 |
| (1,370) | 1:A:72:LYS:HG2 | 1:A:66:ILE:HA | 12 | 0.15 |
| (1,370) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:72:LYS:HD2 | 13 | 0.15 |
| (1,370) | 1:A:72:LYS:HG2 | 1:A:66:ILE:HA | 13 | 0.15 |
| (1,370) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:72:LYS:HD2 | 18 | 0.15 |
| (1,370) | 1:A:72:LYS:HG2 | 1:A:66:ILE:HA | 18 | 0.15 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:72:LYS:HE3 | 1 | 0.15 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:76:TYR:HB2 | 1 | 0.15 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:76:TYR:HB3 | 1 | 0.15 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:72:LYS:HE3 | 4 | 0.15 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:76:TYR:HB2 | 4 | 0.15 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:76:TYR:HB3 | 4 | 0.15 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:72:LYS:HE3 | 15 | 0.15 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:76:TYR:HB2 | 15 | 0.15 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:76:TYR:HB3 | 15 | 0.15 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:72:LYS:HE3 | 16 | 0.15 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:76:TYR:HB2 | 16 | 0.15 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:76:TYR:HB3 | 16 | 0.15 |
| (1,3117) | 1:A:50:ASN:HD22 | 1:A:50:ASN:HB3 | 2 | 0.15 |
| (1,3117) | 1:A:50:ASN:HD22 | 1:A:50:ASN:HB3 | 7 | 0.15 |
| (1,3117) | 1:A:50:ASN:HD22 | 1:A:50:ASN:HB3 | 18 | 0.15 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:55:ASP:HB2 | 19 | 0.15 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:56:LYS:HE2 | 19 | 0.15 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:56:LYS:HE3 | 19 | 0.15 |
| (1,3022) | 1:A:5:ARG:H | 1:A:4:GLN:HB2 | 8 | 0.15 |
| (1,2984) | 1:A:73:ARG:H | 1:A:73:ARG:HD3 | 19 | 0.15 |
| (1,2947) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:44:PRO:HB2 | 7 | 0.15 |
| (1,2869) | 1:A:47:ASN:H | 1:A:46:LYS:HB3 | 17 | 0.15 |
| (1,2843) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:67:LEU:HB2 | 11 | 0.15 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2817) | 1:A:89:GLN:H | 1:A:89:GLN:HG3 | 1 | 0.15 |
| (1,2813) | 1:A:89:GLN:H | 1:A:90:PHE:HB3 | 9 | 0.15 |
| (1,2813) | 1:A:89:GLN:H | 1:A:90:PHE:HB3 | 10 | 0.15 |
| (1,2787) | 1:A:57:PHE:H | 1:A:42:TYR:HD2 | 11 | 0.15 |
| (1,2787) | 1:A:57:PHE:H | 1:A:42:TYR:HD1 | 11 | 0.15 |
| (1,2787) | 1:A:57:PHE:H | 1:A:42:TYR:HD2 | 12 | 0.15 |
| (1,2787) | 1:A:57:PHE:H | 1:A:42:TYR:HD1 | 12 | 0.15 |
| (1,2787) | 1:A:57:PHE:H | 1:A:42:TYR:HD2 | 20 | 0.15 |
| (1,2787) | 1:A:57:PHE:H | 1:A:42:TYR:HD1 | 20 | 0.15 |
| (1,2760) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:29:ASP:HB3 | 12 | 0.15 |
| (1,2578) | 1:A:12:SER:H | 1:A:80:GLY:HA2 | 18 | 0.15 |
| (1,2549) | 1:A:50:ASN:HD21 | 1:A:52:GLU:HB3 | 10 | 0.15 |
| (1,2525) | 1:A:79:TYR:HA | 1:A:83:GLY:HA3 | 10 | 0.15 |
| (1,2525) | 1:A:79:TYR:HA | 1:A:83:GLY:HA3 | 18 | 0.15 |
| (1,251) | 1:A:41:LYS:HG2 | 1:A:42:TYR:HD2 | 5 | 0.15 |
| (1,251) | 1:A:41:LYS:HG2 | 1:A:42:TYR:HD1 | 5 | 0.15 |
| (1,251) | 1:A:41:LYS:HG2 | 1:A:47:ASN:HD22 | 5 | 0.15 |
| (1,2462) | 1:A:75:ILE:HA | 1:A:75:ILE:HG12 | 1 | 0.15 |
| (1,2462) | 1:A:75:ILE:HA | 1:A:75:ILE:HG12 | 4 | 0.15 |
| (1,2462) | 1:A:75:ILE:HA | 1:A:75:ILE:HG12 | 8 | 0.15 |
| (1,2462) | 1:A:75:ILE:HA | 1:A:75:ILE:HG12 | 9 | 0.15 |
| (1,2462) | 1:A:75:ILE:HA | 1:A:75:ILE:HG12 | 18 | 0.15 |
| (1,2378) | 1:A:87:ALA:HB2 | 1:A:91:GLY:HA3 | 17 | 0.15 |
| (1,2378) | 1:A:87:ALA:HB1 | 1:A:91:GLY:HA3 | 17 | 0.15 |
| (1,2378) | 1:A:87:ALA:HB3 | 1:A:91:GLY:HA3 | 17 | 0.15 |
| (1,2324) | 1:A:84:LEU:HB2 | 1:A:88:GLU:HB3 | 12 | 0.15 |
| (1,2313) | 1:A:83:GLY:HA2 | 1:A:85:TYR:HD2 | 7 | 0.15 |
| (1,2313) | 1:A:83:GLY:HA2 | 1:A:85:TYR:HD1 | 7 | 0.15 |
| (1,2313) | 1:A:83:GLY:HA2 | 1:A:85:TYR:HD2 | 10 | 0.15 |
| (1,2313) | 1:A:83:GLY:HA2 | 1:A:85:TYR:HD1 | 10 | 0.15 |
| (1,2313) | 1:A:83:GLY:HA2 | 1:A:85:TYR:HD2 | 12 | 0.15 |
| (1,2313) | 1:A:83:GLY:HA2 | 1:A:85:TYR:HD1 | 12 | 0.15 |
| (1,2265) | 1:A:81:SER:HA | 1:A:84:LEU:HB3 | 11 | 0.15 |
| (1,2265) | 1:A:81:SER:HA | 1:A:84:LEU:HB3 | 14 | 0.15 |
| (1,225) | 1:A:36:ARG:HA | 1:A:89:GLN:HE21 | 13 | 0.15 |
| (1,225) | 1:A:36:ARG:HA | 1:A:89:GLN:HE22 | 13 | 0.15 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG22 | 12 | 0.15 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG21 | 12 | 0.15 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG23 | 12 | 0.15 |
| (1,2190) | 1:A:73:ARG:HD3 | 1:A:73:ARG:HB3 | 5 | 0.15 |
| (1,2190) | 1:A:73:ARG:HD3 | 1:A:73:ARG:HB3 | 6 | 0.15 |
| (1,2190) | 1:A:73:ARG:HD3 | 1:A:73:ARG:HB3 | 12 | 0.15 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,206) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:32:LYS:HE3 | 3 | 0.15 |
| (1,206) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:32:LYS:HE2 | 3 | 0.15 |
| (1,2006) | 1:A:78:LYS:HD2 | 1:A:75:ILE:HA | 12 | 0.15 |
| (1,1939) | 1:A:56:LYS:HD2 | 1:A:42:TYR:HD2 | 3 | 0.15 |
| (1,1939) | 1:A:56:LYS:HD2 | 1:A:42:TYR:HD1 | 3 | 0.15 |
| (1,1939) | 1:A:56:LYS:HD2 | 1:A:42:TYR:HD2 | 12 | 0.15 |
| (1,1939) | 1:A:56:LYS:HD2 | 1:A:42:TYR:HD1 | 12 | 0.15 |
| (1,1939) | 1:A:56:LYS:HD2 | 1:A:42:TYR:HD2 | 17 | 0.15 |
| (1,1939) | 1:A:56:LYS:HD2 | 1:A:42:TYR:HD1 | 17 | 0.15 |
| (1,1773) | 1:A:47:ASN:HA | 1:A:46:LYS:HB3 | 12 | 0.15 |
| (1,1754) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:HB3 | 10 | 0.15 |
| (1,1745) | 1:A:47:ASN:HD21 | 1:A:46:LYS:HB3 | 7 | 0.15 |
| (1,1745) | 1:A:47:ASN:HD21 | 1:A:46:LYS:HB3 | 14 | 0.15 |
| (1,1700) | 1:A:44:PRO:HB2 | 1:A:44:PRO:HD2 | 14 | 0.15 |
| (1,1700) | 1:A:44:PRO:HB2 | 1:A:44:PRO:HD2 | 20 | 0.15 |
| (1,1687) | 1:A:74:ASN:HB3 | 1:A:74:ASN:HD22 | 2 | 0.15 |
| (1,1687) | 1:A:74:ASN:HB3 | 1:A:74:ASN:HD22 | 10 | 0.15 |
| (1,1687) | 1:A:74:ASN:HB3 | 1:A:74:ASN:HD22 | 19 | 0.15 |
| (1,1648) | 1:A:41:LYS:HD2 | 1:A:41:LYS:H | 4 | 0.15 |
| (1,1599) | 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:42:TYR:HE2 | 13 | 0.15 |
| (1,1599) | 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:42:TYR:HE1 | 13 | 0.15 |
| (1,1599) | 1:A:38:LEU:HD12 | 1:A:42:TYR:HE2 | 13 | 0.15 |
| (1,1599) | 1:A:38:LEU:HD12 | 1:A:42:TYR:HE1 | 13 | 0.15 |
| (1,1599) | 1:A:38:LEU:HD13 | 1:A:42:TYR:HE2 | 13 | 0.15 |
| (1,1599) | 1:A:38:LEU:HD13 | 1:A:42:TYR:HE1 | 13 | 0.15 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD11 | 18 | 0.15 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD12 | 18 | 0.15 |
| (1,1595) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:38:LEU:HD13 | 18 | 0.15 |
| (1,1556) | 1:A:36:ARG:HG3 | 1:A:37:LYS:H | 10 | 0.15 |
| (1,1421) | 1:A:25:ASN:HA | 1:A:25:ASN:HD22 | 5 | 0.15 |
| (1,1421) | 1:A:25:ASN:HA | 1:A:25:ASN:HD22 | 10 | 0.15 |
| (1,1421) | 1:A:25:ASN:HA | 1:A:25:ASN:HD22 | 16 | 0.15 |
| (1,1421) | 1:A:25:ASN:HA | 1:A:25:ASN:HD22 | 18 | 0.15 |
| (1,1408) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HA | 2 | 0.15 |
| (1,138) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:30:ASP:HB3 | 16 | 0.15 |
| (1,138) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:30:ASP:HB3 | 16 | 0.15 |
| (1,138) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:30:ASP:HB3 | 16 | 0.15 |
| (1,138) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:30:ASP:HB2 | 16 | 0.15 |
| (1,138) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:30:ASP:HB2 | 16 | 0.15 |
| (1,138) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:30:ASP:HB2 | 16 | 0.15 |
| (1,1368) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:25:ASN:HD22 | 2 | 0.15 |
| (1,1368) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:25:ASN:HD22 | 2 | 0.15 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1368) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:25:ASN:HD22 | 2 | 0.15 |
| (1,1280) | 1:A:95:VAL:HG21 | 1:A:90:PHE:HB2 | 16 | 0.15 |
| (1,1280) | 1:A:95:VAL:HG22 | 1:A:90:PHE:HB2 | 16 | 0.15 |
| (1,1280) | 1:A:95:VAL:HG23 | 1:A:90:PHE:HB2 | 16 | 0.15 |
| (1,1266) | 1:A:95:VAL:HG21 | 1:A:94:ASN:HA | 19 | 0.15 |
| (1,1266) | 1:A:95:VAL:HG22 | 1:A:94:ASN:HA | 19 | 0.15 |
| (1,1266) | 1:A:95:VAL:HG23 | 1:A:94:ASN:HA | 19 | 0.15 |
| (1,1264) | 1:A:95:VAL:HG21 | 1:A:92:GLU:HA | 16 | 0.15 |
| (1,1264) | 1:A:95:VAL:HG22 | 1:A:92:GLU:HA | 16 | 0.15 |
| (1,1264) | 1:A:95:VAL:HG23 | 1:A:92:GLU:HA | 16 | 0.15 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG12 | 1:A:82:LEU:HA | 2 | 0.15 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG11 | 1:A:82:LEU:HA | 2 | 0.15 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG13 | 1:A:82:LEU:HA | 2 | 0.15 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG12 | 1:A:85:TYR:HA | 2 | 0.15 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG11 | 1:A:85:TYR:HA | 2 | 0.15 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG13 | 1:A:85:TYR:HA | 2 | 0.15 |
| (1,1237) | 1:A:20:LEU:H | 1:A:18:HIS:HA | 1 | 0.15 |
| (1,1237) | 1:A:20:LEU:H | 1:A:18:HIS:HA | 7 | 0.15 |
| (1,1237) | 1:A:20:LEU:H | 1:A:18:HIS:HA | 13 | 0.15 |
| (1,1237) | 1:A:20:LEU:H | 1:A:18:HIS:HA | 15 | 0.15 |
| (1,109) | 1:A:18:HIS:HB2 | 1:A:15:SER:HB3 | 4 | 0.15 |
| (1,109) | 1:A:18:HIS:HB3 | 1:A:15:SER:HB3 | 4 | 0.15 |
| (1,1069) | 1:A:42:TYR:HA | 1:A:42:TYR:HD2 | 4 | 0.15 |
| (1,1069) | 1:A:42:TYR:HA | 1:A:42:TYR:HD1 | 4 | 0.15 |
| (1,1069) | 1:A:42:TYR:HA | 1:A:42:TYR:HD2 | 17 | 0.15 |
| (1,1069) | 1:A:42:TYR:HA | 1:A:42:TYR:HD1 | 17 | 0.15 |
| (1,996) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:6:GLN:HG2 | 2 | 0.14 |
| (1,984) | 1:A:5:ARG:HA | 1:A:5:ARG:HG2 | 2 | 0.14 |
| (1,980) | 1:A:5:ARG:HA | 1:A:5:ARG:HB2 | 11 | 0.14 |
| (1,943) | 1:A:81:SER:HB3 | 1:A:10:SEP:H | 18 | 0.14 |
| (1,86) | 1:A:92:GLU:HG3 | 1:A:92:GLU:H | 11 | 0.14 |
| (1,86) | 1:A:92:GLU:HG2 | 1:A:92:GLU:H | 11 | 0.14 |
| (1,802) | 1:A:72:LYS:H | 1:A:75:ILE:HB | 10 | 0.14 |
| (1,802) | 1:A:72:LYS:H | 1:A:88:GLU:HB3 | 10 | 0.14 |
| (1,758) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:44:PRO:HA | 11 | 0.14 |
| (1,758) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:51:PRO:HD2 | 11 | 0.14 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:11:THR:H | 5 | 0.14 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:11:THR:H | 5 | 0.14 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:11:THR:H | 5 | 0.14 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:86:VAL:H | 5 | 0.14 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:86:VAL:H | 5 | 0.14 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:86:VAL:H | 5 | 0.14 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:11:THR:H | 18 | 0.14 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:11:THR:H | 18 | 0.14 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:11:THR:H | 18 | 0.14 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:86:VAL:H | 18 | 0.14 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:86:VAL:H | 18 | 0.14 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:86:VAL:H | 18 | 0.14 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:11:THR:H | 19 | 0.14 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:11:THR:H | 19 | 0.14 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:11:THR:H | 19 | 0.14 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:86:VAL:H | 19 | 0.14 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:86:VAL:H | 19 | 0.14 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:86:VAL:H | 19 | 0.14 |
| (1,686) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:38:LEU:HD11 | 5 | 0.14 |
| (1,686) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:38:LEU:HD12 | 5 | 0.14 |
| (1,686) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:38:LEU:HD13 | 5 | 0.14 |
| (1,686) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:39:ALA:HB1 | 5 | 0.14 |
| (1,686) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:39:ALA:HB2 | 5 | 0.14 |
| (1,686) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:39:ALA:HB3 | 5 | 0.14 |
| (1,686) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:38:LEU:HD11 | 6 | 0.14 |
| (1,686) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:38:LEU:HD12 | 6 | 0.14 |
| (1,686) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:38:LEU:HD13 | 6 | 0.14 |
| (1,686) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:39:ALA:HB1 | 6 | 0.14 |
| (1,686) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:39:ALA:HB2 | 6 | 0.14 |
| (1,686) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:39:ALA:HB3 | 6 | 0.14 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:24:LYS:HB2 | 17 | 0.14 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG21 | 17 | 0.14 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG22 | 17 | 0.14 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG23 | 17 | 0.14 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:67:LEU:HB2 | 17 | 0.14 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:24:LYS:HB2 | 19 | 0.14 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG21 | 19 | 0.14 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG22 | 19 | 0.14 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG23 | 19 | 0.14 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:67:LEU:HB2 | 19 | 0.14 |
| (1,623) | 1:A:91:GLY:H | 1:A:92:GLU:HB2 | 11 | 0.14 |
| (1,623) | 1:A:91:GLY:H | 1:A:92:GLU:HB3 | 11 | 0.14 |
| (1,623) | 1:A:91:GLY:H | 1:A:92:GLU:HB2 | 16 | 0.14 |
| (1,623) | 1:A:91:GLY:H | 1:A:92:GLU:HB3 | 16 | 0.14 |
| (1,604) | 1:A:8:SER:H | 1:A:7:ARG:HG2 | 3 | 0.14 |
| (1,604) | 1:A:8:SER:H | 1:A:7:ARG:HG3 | 3 | 0.14 |
| (1,604) | 1:A:8:SER:H | 1:A:7:ARG:HG2 | 16 | 0.14 |
| (1,604) | 1:A:8:SER:H | 1:A:7:ARG:HG3 | 16 | 0.14 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,596) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:3:ASP:HB2 | 12 | 0.14 |
| (1,596) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:3:ASP:HB3 | 12 | 0.14 |
| (1,493) | 1:A:96:ASN:HB2 | 1:A:95:VAL:HG21 | 10 | 0.14 |
| (1,493) | 1:A:96:ASN:HB2 | 1:A:95:VAL:HG22 | 10 | 0.14 |
| (1,493) | 1:A:96:ASN:HB2 | 1:A:95:VAL:HG23 | 10 | 0.14 |
| (1,493) | 1:A:96:ASN:HB3 | 1:A:95:VAL:HG21 | 10 | 0.14 |
| (1,493) | 1:A:96:ASN:HB3 | 1:A:95:VAL:HG22 | 10 | 0.14 |
| (1,493) | 1:A:96:ASN:HB3 | 1:A:95:VAL:HG23 | 10 | 0.14 |
| (1,440) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:39:ALA:HA | 9 | 0.14 |
| (1,440) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:58:LYS:HA | 9 | 0.14 |
| (1,440) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:88:GLU:HA | 9 | 0.14 |
| (1,439) | 1:A:59:GLU:HA | 1:A:62:ASN:HA | 19 | 0.14 |
| (1,439) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HA | 19 | 0.14 |
| (1,439) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:57:PHE:HA | 19 | 0.14 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:69:ASP:HB2 | 9 | 0.14 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:69:ASP:HB2 | 9 | 0.14 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:69:ASP:HB2 | 9 | 0.14 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:73:ARG:HD3 | 9 | 0.14 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:73:ARG:HD3 | 9 | 0.14 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:73:ARG:HD3 | 9 | 0.14 |
| (1,370) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:72:LYS:HD2 | 2 | 0.14 |
| (1,370) | 1:A:72:LYS:HG2 | 1:A:66:ILE:HA | 2 | 0.14 |
| (1,370) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:72:LYS:HD2 | 5 | 0.14 |
| (1,370) | 1:A:72:LYS:HG2 | 1:A:66:ILE:HA | 5 | 0.14 |
| (1,370) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:72:LYS:HD2 | 8 | 0.14 |
| (1,370) | 1:A:72:LYS:HG2 | 1:A:66:ILE:HA | 8 | 0.14 |
| (1,370) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:72:LYS:HD2 | 14 | 0.14 |
| (1,370) | 1:A:72:LYS:HG2 | 1:A:66:ILE:HA | 14 | 0.14 |
| (1,370) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:72:LYS:HD2 | 17 | 0.14 |
| (1,370) | 1:A:72:LYS:HG2 | 1:A:66:ILE:HA | 17 | 0.14 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:72:LYS:HE3 | 3 | 0.14 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:76:TYR:HB2 | 3 | 0.14 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:76:TYR:HB3 | 3 | 0.14 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:72:LYS:HE3 | 17 | 0.14 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:76:TYR:HB2 | 17 | 0.14 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:76:TYR:HB3 | 17 | 0.14 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:72:LYS:HE3 | 20 | 0.14 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:76:TYR:HB2 | 20 | 0.14 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:76:TYR:HB3 | 20 | 0.14 |
| (1,313) | 1:A:87:ALA:HB2 | 1:A:92:GLU:HG3 | 10 | 0.14 |
| (1,313) | 1:A:87:ALA:HB1 | 1:A:92:GLU:HG3 | 10 | 0.14 |
| (1,313) | 1:A:87:ALA:HB3 | 1:A:92:GLU:HG3 | 10 | 0.14 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,313) | 1:A:87:ALA:HB2 | 1:A:92:GLU:HG2 | 10 | 0.14 |
| (1,313) | 1:A:87:ALA:HB1 | 1:A:92:GLU:HG2 | 10 | 0.14 |
| (1,313) | 1:A:87:ALA:HB3 | 1:A:92:GLU:HG2 | 10 | 0.14 |
| (1,3117) | 1:A:50:ASN:HD22 | 1:A:50:ASN:HB3 | 9 | 0.14 |
| (1,3117) | 1:A:50:ASN:HD22 | 1:A:50:ASN:HB3 | 11 | 0.14 |
| (1,3117) | 1:A:50:ASN:HD22 | 1:A:50:ASN:HB3 | 12 | 0.14 |
| (1,3117) | 1:A:50:ASN:HD22 | 1:A:50:ASN:HB3 | 17 | 0.14 |
| (1,311) | 1:A:54:ALA:HB1 | 1:A:58:LYS:HE2 | 9 | 0.14 |
| (1,311) | 1:A:54:ALA:HB2 | 1:A:58:LYS:HE2 | 9 | 0.14 |
| (1,311) | 1:A:54:ALA:HB3 | 1:A:58:LYS:HE2 | 9 | 0.14 |
| (1,311) | 1:A:54:ALA:HB1 | 1:A:58:LYS:HE3 | 9 | 0.14 |
| (1,311) | 1:A:54:ALA:HB2 | 1:A:58:LYS:HE3 | 9 | 0.14 |
| (1,311) | 1:A:54:ALA:HB3 | 1:A:58:LYS:HE3 | 9 | 0.14 |
| (1,2984) | 1:A:73:ARG:H | 1:A:73:ARG:HD3 | 8 | 0.14 |
| (1,2843) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:67:LEU:HB2 | 6 | 0.14 |
| (1,2813) | 1:A:89:GLN:H | 1:A:90:PHE:HB3 | 1 | 0.14 |
| (1,2813) | 1:A:89:GLN:H | 1:A:90:PHE:HB3 | 7 | 0.14 |
| (1,2813) | 1:A:89:GLN:H | 1:A:90:PHE:HB3 | 15 | 0.14 |
| (1,2813) | 1:A:89:GLN:H | 1:A:90:PHE:HB3 | 20 | 0.14 |
| (1,2787) | 1:A:57:PHE:H | 1:A:42:TYR:HD2 | 2 | 0.14 |
| (1,2787) | 1:A:57:PHE:H | 1:A:42:TYR:HD1 | 2 | 0.14 |
| (1,2787) | 1:A:57:PHE:H | 1:A:42:TYR:HD2 | 9 | 0.14 |
| (1,2787) | 1:A:57:PHE:H | 1:A:42:TYR:HD1 | 9 | 0.14 |
| (1,276) | 1:A:99:PHE:HB3 | 1:A:96:ASN:HA | 13 | 0.14 |
| (1,276) | 1:A:49:ASP:HB3 | 1:A:49:ASP:HA | 13 | 0.14 |
| (1,2690) | 1:A:52:GLU:H | 1:A:52:GLU:HG3 | 4 | 0.14 |
| (1,2578) | 1:A:12:SER:H | 1:A:80:GLY:HA2 | 10 | 0.14 |
| (1,2550) | 1:A:7:ARG:H | 1:A:6:GLN:HB2 | 10 | 0.14 |
| (1,2525) | 1:A:79:TYR:HA | 1:A:83:GLY:HA3 | 5 | 0.14 |
| (1,2519) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:72:LYS:H | 2 | 0.14 |
| (1,2519) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:72:LYS:H | 2 | 0.14 |
| (1,2519) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:72:LYS:H | 2 | 0.14 |
| (1,2519) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:72:LYS:H | 11 | 0.14 |
| (1,2519) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:72:LYS:H | 11 | 0.14 |
| (1,2519) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:72:LYS:H | 11 | 0.14 |
| (1,2478) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:62:ASN:HA | 18 | 0.14 |
| (1,2462) | 1:A:75:ILE:HA | 1:A:75:ILE:HG12 | 2 | 0.14 |
| (1,2462) | 1:A:75:ILE:HA | 1:A:75:ILE:HG12 | 3 | 0.14 |
| (1,2462) | 1:A:75:ILE:HA | 1:A:75:ILE:HG12 | 5 | 0.14 |
| (1,2462) | 1:A:75:ILE:HA | 1:A:75:ILE:HG12 | 6 | 0.14 |
| (1,2462) | 1:A:75:ILE:HA | 1:A:75:ILE:HG12 | 10 | 0.14 |
| (1,2462) | 1:A:75:ILE:HA | 1:A:75:ILE:HG12 | 11 | 0.14 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2462) | 1:A:75:ILE:HA | 1:A:75:ILE:HG12 | 12 | 0.14 |
| (1,2462) | 1:A:75:ILE:HA | 1:A:75:ILE:HG12 | 13 | 0.14 |
| (1,2462) | 1:A:75:ILE:HA | 1:A:75:ILE:HG12 | 14 | 0.14 |
| (1,2462) | 1:A:75:ILE:HA | 1:A:75:ILE:HG12 | 15 | 0.14 |
| (1,2462) | 1:A:75:ILE:HA | 1:A:75:ILE:HG12 | 16 | 0.14 |
| (1,2462) | 1:A:75:ILE:HA | 1:A:75:ILE:HG12 | 17 | 0.14 |
| (1,2462) | 1:A:75:ILE:HA | 1:A:75:ILE:HG12 | 19 | 0.14 |
| (1,2462) | 1:A:75:ILE:HA | 1:A:75:ILE:HG12 | 20 | 0.14 |
| (1,2432) | 1:A:94:ASN:HB3 | 1:A:90:PHE:HB2 | 13 | 0.14 |
| (1,2426) | 1:A:97:THR:H | 1:A:94:ASN:HA | 6 | 0.14 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:89:GLN:HE21 | 8 | 0.14 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD12 | 1:A:89:GLN:HE21 | 8 | 0.14 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD13 | 1:A:89:GLN:HE21 | 8 | 0.14 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:89:GLN:HE22 | 8 | 0.14 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD12 | 1:A:89:GLN:HE22 | 8 | 0.14 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD13 | 1:A:89:GLN:HE22 | 8 | 0.14 |
| (1,2386) | 1:A:94:ASN:HD22 | 1:A:93:GLU:HG2 | 20 | 0.14 |
| (1,2324) | 1:A:84:LEU:HB2 | 1:A:88:GLU:HB3 | 6 | 0.14 |
| (1,2324) | 1:A:84:LEU:HB2 | 1:A:88:GLU:HB3 | 13 | 0.14 |
| (1,2324) | 1:A:84:LEU:HB2 | 1:A:88:GLU:HB3 | 16 | 0.14 |
| (1,2324) | 1:A:84:LEU:HB2 | 1:A:88:GLU:HB3 | 19 | 0.14 |
| (1,226) | 1:A:36:ARG:HA | 1:A:36:ARG:HD2 | 16 | 0.14 |
| (1,226) | 1:A:36:ARG:HA | 1:A:36:ARG:HD3 | 16 | 0.14 |
| (1,2190) | 1:A:73:ARG:HD3 | 1:A:73:ARG:HB3 | 10 | 0.14 |
| (1,2190) | 1:A:73:ARG:HD3 | 1:A:73:ARG:HB3 | 13 | 0.14 |
| (1,2190) | 1:A:73:ARG:HD3 | 1:A:73:ARG:HB3 | 14 | 0.14 |
| (1,2145) | 1:A:74:ASN:HB2 | 1:A:70:ALA:HA | 10 | 0.14 |
| (1,2145) | 1:A:74:ASN:HB2 | 1:A:70:ALA:HA | 15 | 0.14 |
| (1,2113) | 1:A:67:LEU:HD11 | 1:A:17:TYR:HA | 9 | 0.14 |
| (1,2113) | 1:A:67:LEU:HD12 | 1:A:17:TYR:HA | 9 | 0.14 |
| (1,2113) | 1:A:67:LEU:HD13 | 1:A:17:TYR:HA | 9 | 0.14 |
| (1,2092) | 1:A:66:ILE:HG21 | 1:A:72:LYS:H | 5 | 0.14 |
| (1,2092) | 1:A:66:ILE:HG22 | 1:A:72:LYS:H | 5 | 0.14 |
| (1,2092) | 1:A:66:ILE:HG23 | 1:A:72:LYS:H | 5 | 0.14 |
| (1,2092) | 1:A:66:ILE:HG21 | 1:A:72:LYS:H | 18 | 0.14 |
| (1,2092) | 1:A:66:ILE:HG22 | 1:A:72:LYS:H | 18 | 0.14 |
| (1,2092) | 1:A:66:ILE:HG23 | 1:A:72:LYS:H | 18 | 0.14 |
| (1,2092) | 1:A:66:ILE:HG21 | 1:A:72:LYS:H | 19 | 0.14 |
| (1,2092) | 1:A:66:ILE:HG22 | 1:A:72:LYS:H | 19 | 0.14 |
| (1,2092) | 1:A:66:ILE:HG23 | 1:A:72:LYS:H | 19 | 0.14 |
| (1,206) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:32:LYS:HE3 | 5 | 0.14 |
| (1,206) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:32:LYS:HE2 | 5 | 0.14 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,206) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:32:LYS:HE3 | 7 | 0.14 |
| (1,206) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:32:LYS:HE2 | 7 | 0.14 |
| (1,206) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:32:LYS:HE3 | 18 | 0.14 |
| (1,206) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:32:LYS:HE2 | 18 | 0.14 |
| (1,206) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:32:LYS:HE3 | 20 | 0.14 |
| (1,206) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:32:LYS:HE2 | 20 | 0.14 |
| (1,2) | 1:A:61:ASN:HB3 | 1:A:61:ASN:HD22 | 19 | 0.14 |
| (1,2) | 1:A:61:ASN:HB2 | 1:A:61:ASN:HD22 | 19 | 0.14 |
| (1,1939) | 1:A:56:LYS:HD2 | 1:A:42:TYR:HD2 | 4 | 0.14 |
| (1,1939) | 1:A:56:LYS:HD2 | 1:A:42:TYR:HD1 | 4 | 0.14 |
| (1,1939) | 1:A:56:LYS:HD2 | 1:A:42:TYR:HD2 | 14 | 0.14 |
| (1,1939) | 1:A:56:LYS:HD2 | 1:A:42:TYR:HD1 | 14 | 0.14 |
| (1,1931) | 1:A:56:LYS:HB3 | 1:A:53:ALA:HA | 10 | 0.14 |
| (1,1862) | 1:A:51:PRO:HG2 | 1:A:52:GLU:H | 1 | 0.14 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:68:THR:HB | 5 | 0.14 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:68:THR:HB | 5 | 0.14 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:68:THR:HB | 5 | 0.14 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:34:SER:HB3 | 5 | 0.14 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:34:SER:HB3 | 5 | 0.14 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:34:SER:HB3 | 5 | 0.14 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:68:THR:HB | 9 | 0.14 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:68:THR:HB | 9 | 0.14 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:68:THR:HB | 9 | 0.14 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:34:SER:HB3 | 9 | 0.14 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:34:SER:HB3 | 9 | 0.14 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:34:SER:HB3 | 9 | 0.14 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:68:THR:HB | 19 | 0.14 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:68:THR:HB | 19 | 0.14 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:68:THR:HB | 19 | 0.14 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:34:SER:HB3 | 19 | 0.14 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:34:SER:HB3 | 19 | 0.14 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:34:SER:HB3 | 19 | 0.14 |
| (1,1750) | 1:A:46:LYS:HD3 | 1:A:46:LYS:HB2 | 6 | 0.14 |
| (1,1750) | 1:A:46:LYS:HD3 | 1:A:46:LYS:HB2 | 17 | 0.14 |
| (1,1700) | 1:A:44:PRO:HB2 | 1:A:44:PRO:HD2 | 1 | 0.14 |
| (1,1700) | 1:A:44:PRO:HB2 | 1:A:44:PRO:HD2 | 3 | 0.14 |
| (1,1700) | 1:A:44:PRO:HB2 | 1:A:44:PRO:HD2 | 5 | 0.14 |
| (1,1700) | 1:A:44:PRO:HB2 | 1:A:44:PRO:HD2 | 9 | 0.14 |
| (1,1700) | 1:A:44:PRO:HB2 | 1:A:44:PRO:HD2 | 10 | 0.14 |
| (1,1700) | 1:A:44:PRO:HB2 | 1:A:44:PRO:HD2 | 11 | 0.14 |
| (1,1700) | 1:A:44:PRO:HB2 | 1:A:44:PRO:HD2 | 12 | 0.14 |
| (1,1700) | 1:A:44:PRO:HB2 | 1:A:44:PRO:HD2 | 13 | 0.14 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1700) | 1:A:44:PRO:HB2 | 1:A:44:PRO:HD2 | 15 | 0.14 |
| (1,1501) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:35:TYR:HB2 | 20 | 0.14 |
| (1,1450) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:27:THR:HG21 | 10 | 0.14 |
| (1,1450) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:27:THR:HG22 | 10 | 0.14 |
| (1,1450) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:27:THR:HG23 | 10 | 0.14 |
| (1,1450) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:27:THR:HG21 | 12 | 0.14 |
| (1,1450) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:27:THR:HG22 | 12 | 0.14 |
| (1,1450) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:27:THR:HG23 | 12 | 0.14 |
| (1,1427) | 1:A:26:ALA:HA | 1:A:30:ASP:H | 19 | 0.14 |
| (1,1408) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HA | 4 | 0.14 |
| (1,1408) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HA | 6 | 0.14 |
| (1,1368) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:25:ASN:HD22 | 5 | 0.14 |
| (1,1368) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:25:ASN:HD22 | 5 | 0.14 |
| (1,1368) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:25:ASN:HD22 | 5 | 0.14 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD22 | 15 | 0.14 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD21 | 15 | 0.14 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD23 | 15 | 0.14 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:26:ALA:HA | 15 | 0.14 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:26:ALA:HA | 15 | 0.14 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:26:ALA:HA | 15 | 0.14 |
| (1,1280) | 1:A:95:VAL:HG21 | 1:A:90:PHE:HB2 | 2 | 0.14 |
| (1,1280) | 1:A:95:VAL:HG22 | 1:A:90:PHE:HB2 | 2 | 0.14 |
| (1,1280) | 1:A:95:VAL:HG23 | 1:A:90:PHE:HB2 | 2 | 0.14 |
| (1,1280) | 1:A:95:VAL:HG21 | 1:A:90:PHE:HB2 | 18 | 0.14 |
| (1,1280) | 1:A:95:VAL:HG22 | 1:A:90:PHE:HB2 | 18 | 0.14 |
| (1,1280) | 1:A:95:VAL:HG23 | 1:A:90:PHE:HB2 | 18 | 0.14 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG21 | 1:A:26:ALA:HA | 5 | 0.14 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG22 | 1:A:26:ALA:HA | 5 | 0.14 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG23 | 1:A:26:ALA:HA | 5 | 0.14 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG21 | 1:A:26:ALA:HA | 6 | 0.14 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG22 | 1:A:26:ALA:HA | 6 | 0.14 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG23 | 1:A:26:ALA:HA | 6 | 0.14 |
| (1,1266) | 1:A:95:VAL:HG21 | 1:A:94:ASN:HA | 14 | 0.14 |
| (1,1266) | 1:A:95:VAL:HG22 | 1:A:94:ASN:HA | 14 | 0.14 |
| (1,1266) | 1:A:95:VAL:HG23 | 1:A:94:ASN:HA | 14 | 0.14 |
| (1,1262) | 1:A:19:VAL:HG12 | 1:A:59:GLU:HA | 5 | 0.14 |
| (1,1262) | 1:A:19:VAL:HG11 | 1:A:59:GLU:HA | 5 | 0.14 |
| (1,1262) | 1:A:19:VAL:HG13 | 1:A:59:GLU:HA | 5 | 0.14 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG12 | 1:A:82:LEU:HA | 19 | 0.14 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG11 | 1:A:82:LEU:HA | 19 | 0.14 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG13 | 1:A:82:LEU:HA | 19 | 0.14 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG12 | 1:A:85:TYR:HA | 19 | 0.14 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG11 | 1:A:85:TYR:HA | 19 | 0.14 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG13 | 1:A:85:TYR:HA | 19 | 0.14 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG12 | 1:A:82:LEU:HA | 20 | 0.14 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG11 | 1:A:82:LEU:HA | 20 | 0.14 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG13 | 1:A:82:LEU:HA | 20 | 0.14 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG12 | 1:A:85:TYR:HA | 20 | 0.14 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG11 | 1:A:85:TYR:HA | 20 | 0.14 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG13 | 1:A:85:TYR:HA | 20 | 0.14 |
| (1,1197) | 1:A:67:LEU:HD22 | 1:A:73:ARG:HD3 | 3 | 0.14 |
| (1,1197) | 1:A:67:LEU:HD21 | 1:A:73:ARG:HD3 | 3 | 0.14 |
| (1,1197) | 1:A:67:LEU:HD23 | 1:A:73:ARG:HD3 | 3 | 0.14 |
| (1,1189) | 1:A:16:LEU:HD11 | 1:A:63:ALA:HA | 15 | 0.14 |
| (1,1189) | 1:A:16:LEU:HD13 | 1:A:63:ALA:HA | 15 | 0.14 |
| (1,1189) | 1:A:16:LEU:HD12 | 1:A:63:ALA:HA | 15 | 0.14 |
| (1,980) | 1:A:5:ARG:HA | 1:A:5:ARG:HB2 | 8 | 0.13 |
| (1,980) | 1:A:5:ARG:HA | 1:A:5:ARG:HB2 | 13 | 0.13 |
| (1,980) | 1:A:5:ARG:HA | 1:A:5:ARG:HB2 | 19 | 0.13 |
| (1,943) | 1:A:81:SER:HB3 | 1:A:10:SEP:H | 1 | 0.13 |
| (1,943) | 1:A:81:SER:HB3 | 1:A:10:SEP:H | 7 | 0.13 |
| (1,943) | 1:A:81:SER:HB3 | 1:A:10:SEP:H | 20 | 0.13 |
| (1,882) | 1:A:41:LYS:HE2 | 1:A:41:LYS:HG3 | 2 | 0.13 |
| (1,849) | 1:A:96:ASN:HD21 | 1:A:75:ILE:HG22 | 5 | 0.13 |
| (1,849) | 1:A:96:ASN:HD21 | 1:A:75:ILE:HG21 | 5 | 0.13 |
| (1,849) | 1:A:96:ASN:HD21 | 1:A:75:ILE:HG23 | 5 | 0.13 |
| (1,849) | 1:A:96:ASN:HD21 | 1:A:95:VAL:HG21 | 5 | 0.13 |
| (1,849) | 1:A:96:ASN:HD21 | 1:A:95:VAL:HG22 | 5 | 0.13 |
| (1,849) | 1:A:96:ASN:HD21 | 1:A:95:VAL:HG23 | 5 | 0.13 |
| (1,802) | 1:A:72:LYS:H | 1:A:75:ILE:HB | 1 | 0.13 |
| (1,802) | 1:A:72:LYS:H | 1:A:88:GLU:HB3 | 1 | 0.13 |
| (1,802) | 1:A:72:LYS:H | 1:A:75:ILE:HB | 11 | 0.13 |
| (1,802) | 1:A:72:LYS:H | 1:A:88:GLU:HB3 | 11 | 0.13 |
| (1,802) | 1:A:72:LYS:H | 1:A:75:ILE:HB | 12 | 0.13 |
| (1,802) | 1:A:72:LYS:H | 1:A:88:GLU:HB3 | 12 | 0.13 |
| (1,793) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:44:PRO:HB3 | 3 | 0.13 |
| (1,793) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:44:PRO:HD3 | 3 | 0.13 |
| (1,711) | 1:A:53:ALA:H | 1:A:52:GLU:HG2 | 3 | 0.13 |
| (1,711) | 1:A:53:ALA:H | 1:A:52:GLU:HG3 | 3 | 0.13 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD22 | 19 | 0.13 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD21 | 19 | 0.13 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:38:LEU:HD23 | 19 | 0.13 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:39:ALA:HB1 | 19 | 0.13 |
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:39:ALA:HB2 | 19 | 0.13 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,706) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:39:ALA:HB3 | 19 | 0.13 |
| (1,67) | 1:A:6:GLN:HG2 | 1:A:8:SER:H | 1 | 0.13 |
| (1,67) | 1:A:6:GLN:HG3 | 1:A:8:SER:H | 1 | 0.13 |
| (1,655) | 1:A:78:LYS:H | 1:A:76:TYR:HB2 | 20 | 0.13 |
| (1,655) | 1:A:78:LYS:H | 1:A:76:TYR:HB3 | 20 | 0.13 |
| (1,655) | 1:A:78:LYS:H | 1:A:79:TYR:HB3 | 20 | 0.13 |
| (1,652) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:6:GLN:HB2 | 11 | 0.13 |
| (1,652) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:84:LEU:HB2 | 11 | 0.13 |
| (1,623) | 1:A:91:GLY:H | 1:A:92:GLU:HB2 | 6 | 0.13 |
| (1,623) | 1:A:91:GLY:H | 1:A:92:GLU:HB3 | 6 | 0.13 |
| (1,607) | 1:A:96:ASN:H | 1:A:95:VAL:HG12 | 14 | 0.13 |
| (1,607) | 1:A:96:ASN:H | 1:A:95:VAL:HG11 | 14 | 0.13 |
| (1,607) | 1:A:96:ASN:H | 1:A:95:VAL:HG13 | 14 | 0.13 |
| (1,607) | 1:A:96:ASN:H | 1:A:97:THR:HG22 | 14 | 0.13 |
| (1,607) | 1:A:96:ASN:H | 1:A:97:THR:HG21 | 14 | 0.13 |
| (1,607) | 1:A:96:ASN:H | 1:A:97:THR:HG23 | 14 | 0.13 |
| (1,596) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:3:ASP:HB2 | 2 | 0.13 |
| (1,596) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:3:ASP:HB3 | 2 | 0.13 |
| (1,574) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HG2 | 2 | 0.13 |
| (1,574) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HD2 | 2 | 0.13 |
| (1,574) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HG2 | 5 | 0.13 |
| (1,574) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HD2 | 5 | 0.13 |
| (1,574) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HG2 | 16 | 0.13 |
| (1,574) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HD2 | 16 | 0.13 |
| (1,551) | 1:A:77:ASP:H | 1:A:73:ARG:HB2 | 3 | 0.13 |
| (1,551) | 1:A:77:ASP:H | 1:A:73:ARG:HB3 | 3 | 0.13 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:79:TYR:HB3 | 3 | 0.13 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:72:LYS:HE2 | 3 | 0.13 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:72:LYS:HE3 | 3 | 0.13 |
| (1,531) | 1:A:40:LEU:HD22 | 1:A:46:LYS:HE2 | 3 | 0.13 |
| (1,531) | 1:A:40:LEU:HD21 | 1:A:46:LYS:HE2 | 3 | 0.13 |
| (1,531) | 1:A:40:LEU:HD23 | 1:A:46:LYS:HE2 | 3 | 0.13 |
| (1,531) | 1:A:40:LEU:HD22 | 1:A:46:LYS:HE3 | 3 | 0.13 |
| (1,531) | 1:A:40:LEU:HD21 | 1:A:46:LYS:HE3 | 3 | 0.13 |
| (1,531) | 1:A:40:LEU:HD23 | 1:A:46:LYS:HE3 | 3 | 0.13 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD13 | 4 | 0.13 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD11 | 4 | 0.13 |
| (1,514) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HD12 | 4 | 0.13 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB1 | 1:A:61:ASN:HA | 4 | 0.13 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB2 | 1:A:61:ASN:HA | 4 | 0.13 |
| (1,514) | 1:A:39:ALA:HB3 | 1:A:61:ASN:HA | 4 | 0.13 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG21 | 4 | 0.13 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG23 | 4 | 0.13 |
| (1,514) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:60:ILE:HG22 | 4 | 0.13 |
| (1,494) | 1:A:97:THR:HA | 1:A:96:ASN:HB3 | 2 | 0.13 |
| (1,494) | 1:A:97:THR:HA | 1:A:96:ASN:HB2 | 2 | 0.13 |
| (1,440) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:39:ALA:HA | 11 | 0.13 |
| (1,440) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:58:LYS:HA | 11 | 0.13 |
| (1,440) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:88:GLU:HA | 11 | 0.13 |
| (1,440) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:39:ALA:HA | 13 | 0.13 |
| (1,440) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:58:LYS:HA | 13 | 0.13 |
| (1,440) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:88:GLU:HA | 13 | 0.13 |
| (1,435) | 1:A:75:ILE:HG22 | 1:A:92:GLU:HG3 | 9 | 0.13 |
| (1,435) | 1:A:75:ILE:HG21 | 1:A:92:GLU:HG3 | 9 | 0.13 |
| (1,435) | 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:92:GLU:HG3 | 9 | 0.13 |
| (1,435) | 1:A:75:ILE:HG22 | 1:A:92:GLU:HG2 | 9 | 0.13 |
| (1,435) | 1:A:75:ILE:HG21 | 1:A:92:GLU:HG2 | 9 | 0.13 |
| (1,435) | 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:92:GLU:HG2 | 9 | 0.13 |
| (1,422) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:73:ARG:HA | 5 | 0.13 |
| (1,422) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HA | 5 | 0.13 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:69:ASP:HB2 | 14 | 0.13 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:69:ASP:HB2 | 14 | 0.13 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:69:ASP:HB2 | 14 | 0.13 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:73:ARG:HD3 | 14 | 0.13 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:73:ARG:HD3 | 14 | 0.13 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:73:ARG:HD3 | 14 | 0.13 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:72:LYS:HE3 | 10 | 0.13 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:76:TYR:HB2 | 10 | 0.13 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:76:TYR:HB3 | 10 | 0.13 |
| (1,313) | 1:A:87:ALA:HB2 | 1:A:92:GLU:HG3 | 8 | 0.13 |
| (1,313) | 1:A:87:ALA:HB1 | 1:A:92:GLU:HG3 | 8 | 0.13 |
| (1,313) | 1:A:87:ALA:HB3 | 1:A:92:GLU:HG3 | 8 | 0.13 |
| (1,313) | 1:A:87:ALA:HB2 | 1:A:92:GLU:HG2 | 8 | 0.13 |
| (1,313) | 1:A:87:ALA:HB1 | 1:A:92:GLU:HG2 | 8 | 0.13 |
| (1,313) | 1:A:87:ALA:HB3 | 1:A:92:GLU:HG2 | 8 | 0.13 |
| (1,313) | 1:A:87:ALA:HB2 | 1:A:92:GLU:HG3 | 17 | 0.13 |
| (1,313) | 1:A:87:ALA:HB1 | 1:A:92:GLU:HG3 | 17 | 0.13 |
| (1,313) | 1:A:87:ALA:HB3 | 1:A:92:GLU:HG3 | 17 | 0.13 |
| (1,313) | 1:A:87:ALA:HB2 | 1:A:92:GLU:HG2 | 17 | 0.13 |
| (1,313) | 1:A:87:ALA:HB1 | 1:A:92:GLU:HG2 | 17 | 0.13 |
| (1,313) | 1:A:87:ALA:HB3 | 1:A:92:GLU:HG2 | 17 | 0.13 |
| (1,3117) | 1:A:50:ASN:HD22 | 1:A:50:ASN:HB3 | 1 | 0.13 |
| (1,3117) | 1:A:50:ASN:HD22 | 1:A:50:ASN:HB3 | 4 | 0.13 |
| (1,3117) | 1:A:50:ASN:HD22 | 1:A:50:ASN:HB3 | 5 | 0.13 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,3117) | 1:A:50:ASN:HD22 | 1:A:50:ASN:HB3 | 6 | 0.13 |
| (1,3117) | 1:A:50:ASN:HD22 | 1:A:50:ASN:HB3 | 8 | 0.13 |
| (1,3117) | 1:A:50:ASN:HD22 | 1:A:50:ASN:HB3 | 13 | 0.13 |
| (1,3117) | 1:A:50:ASN:HD22 | 1:A:50:ASN:HB3 | 15 | 0.13 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:55:ASP:HB2 | 17 | 0.13 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:56:LYS:HE2 | 17 | 0.13 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:56:LYS:HE3 | 17 | 0.13 |
| (1,3097) | 1:A:80:GLY:H | 1:A:13:GLY:H | 1 | 0.13 |
| (1,3097) | 1:A:80:GLY:H | 1:A:13:GLY:H | 3 | 0.13 |
| (1,3048) | 1:A:23:ASP:H | 1:A:68:THR:H | 3 | 0.13 |
| (1,303) | 1:A:97:THR:H | 1:A:95:VAL:HB | 19 | 0.13 |
| (1,303) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:53:ALA:H | 19 | 0.13 |
| (1,303) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:54:ALA:H | 19 | 0.13 |
| (1,303) | 1:A:97:THR:H | 1:A:95:VAL:HB | 20 | 0.13 |
| (1,303) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:53:ALA:H | 20 | 0.13 |
| (1,303) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:54:ALA:H | 20 | 0.13 |
| (1,2984) | 1:A:73:ARG:H | 1:A:73:ARG:HD3 | 1 | 0.13 |
| (1,2984) | 1:A:73:ARG:H | 1:A:73:ARG:HD3 | 15 | 0.13 |
| (1,2947) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:44:PRO:HB2 | 8 | 0.13 |
| (1,2813) | 1:A:89:GLN:H | 1:A:90:PHE:HB3 | 18 | 0.13 |
| (1,2787) | 1:A:57:PHE:H | 1:A:42:TYR:HD2 | 1 | 0.13 |
| (1,2787) | 1:A:57:PHE:H | 1:A:42:TYR:HD1 | 1 | 0.13 |
| (1,2787) | 1:A:57:PHE:H | 1:A:42:TYR:HD2 | 14 | 0.13 |
| (1,2787) | 1:A:57:PHE:H | 1:A:42:TYR:HD1 | 14 | 0.13 |
| (1,2761) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:22:LEU:HD22 | 8 | 0.13 |
| (1,2761) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:22:LEU:HD21 | 8 | 0.13 |
| (1,2761) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:22:LEU:HD23 | 8 | 0.13 |
| (1,2747) | 1:A:78:LYS:H | 1:A:6:GLN:HE22 | 3 | 0.13 |
| (1,2747) | 1:A:78:LYS:H | 1:A:6:GLN:HE22 | 4 | 0.13 |
| (1,272) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:44:PRO:HB3 | 14 | 0.13 |
| (1,272) | 1:A:47:ASN:H | 1:A:44:PRO:HB3 | 14 | 0.13 |
| (1,2677) | 1:A:82:LEU:H | 1:A:62:ASN:HD22 | 13 | 0.13 |
| (1,2631) | 1:A:10:SEP:H | 1:A:9:LEU:HB2 | 3 | 0.13 |
| (1,2631) | 1:A:10:SEP:H | 1:A:9:LEU:HB2 | 11 | 0.13 |
| (1,2578) | 1:A:12:SER:H | 1:A:80:GLY:HA2 | 17 | 0.13 |
| (1,2530) | 1:A:93:GLU:HA | 1:A:92:GLU:HA | 2 | 0.13 |
| (1,2525) | 1:A:79:TYR:HA | 1:A:83:GLY:HA3 | 1 | 0.13 |
| (1,2525) | 1:A:79:TYR:HA | 1:A:83:GLY:HA3 | 15 | 0.13 |
| (1,2525) | 1:A:79:TYR:HA | 1:A:83:GLY:HA3 | 17 | 0.13 |
| (1,2519) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:72:LYS:H | 5 | 0.13 |
| (1,2519) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:72:LYS:H | 5 | 0.13 |
| (1,2519) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:72:LYS:H | 5 | 0.13 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2491) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:30:ASP:H | 20 | 0.13 |
| (1,2462) | 1:A:75:ILE:HA | 1:A:75:ILE:HG12 | 7 | 0.13 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:89:GLN:HE21 | 7 | 0.13 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD12 | 1:A:89:GLN:HE21 | 7 | 0.13 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD13 | 1:A:89:GLN:HE21 | 7 | 0.13 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:89:GLN:HE22 | 7 | 0.13 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD12 | 1:A:89:GLN:HE22 | 7 | 0.13 |
| (1,240) | 1:A:38:LEU:HD13 | 1:A:89:GLN:HE22 | 7 | 0.13 |
| (1,2391) | 1:A:93:GLU:HG3 | 1:A:94:ASN:HA | 19 | 0.13 |
| (1,2324) | 1:A:84:LEU:HB2 | 1:A:88:GLU:HB3 | 7 | 0.13 |
| (1,2324) | 1:A:84:LEU:HB2 | 1:A:88:GLU:HB3 | 8 | 0.13 |
| (1,2324) | 1:A:84:LEU:HB2 | 1:A:88:GLU:HB3 | 9 | 0.13 |
| (1,2313) | 1:A:83:GLY:HA2 | 1:A:85:TYR:HD2 | 19 | 0.13 |
| (1,2313) | 1:A:83:GLY:HA2 | 1:A:85:TYR:HD1 | 19 | 0.13 |
| (1,2307) | 1:A:82:LEU:HD21 | 1:A:9:LEU:HD11 | 15 | 0.13 |
| (1,2307) | 1:A:82:LEU:HD21 | 1:A:9:LEU:HD13 | 15 | 0.13 |
| (1,2307) | 1:A:82:LEU:HD21 | 1:A:9:LEU:HD12 | 15 | 0.13 |
| (1,2307) | 1:A:82:LEU:HD22 | 1:A:9:LEU:HD11 | 15 | 0.13 |
| (1,2307) | 1:A:82:LEU:HD22 | 1:A:9:LEU:HD13 | 15 | 0.13 |
| (1,2307) | 1:A:82:LEU:HD22 | 1:A:9:LEU:HD12 | 15 | 0.13 |
| (1,2307) | 1:A:82:LEU:HD23 | 1:A:9:LEU:HD11 | 15 | 0.13 |
| (1,2307) | 1:A:82:LEU:HD23 | 1:A:9:LEU:HD13 | 15 | 0.13 |
| (1,2307) | 1:A:82:LEU:HD23 | 1:A:9:LEU:HD12 | 15 | 0.13 |
| (1,2265) | 1:A:81:SER:HA | 1:A:84:LEU:HB3 | 8 | 0.13 |
| (1,225) | 1:A:36:ARG:HA | 1:A:89:GLN:HE21 | 5 | 0.13 |
| (1,225) | 1:A:36:ARG:HA | 1:A:89:GLN:HE22 | 5 | 0.13 |
| (1,2204) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HD11 | 12 | 0.13 |
| (1,2204) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HD12 | 12 | 0.13 |
| (1,2204) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HD13 | 12 | 0.13 |
| (1,2204) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HD11 | 16 | 0.13 |
| (1,2204) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HD12 | 16 | 0.13 |
| (1,2204) | 1:A:74:ASN:HA | 1:A:75:ILE:HD13 | 16 | 0.13 |
| (1,2190) | 1:A:73:ARG:HD3 | 1:A:73:ARG:HB3 | 2 | 0.13 |
| (1,2190) | 1:A:73:ARG:HD3 | 1:A:73:ARG:HB3 | 3 | 0.13 |
| (1,2190) | 1:A:73:ARG:HD3 | 1:A:73:ARG:HB3 | 4 | 0.13 |
| (1,2092) | 1:A:66:ILE:HG21 | 1:A:72:LYS:H | 2 | 0.13 |
| (1,2092) | 1:A:66:ILE:HG22 | 1:A:72:LYS:H | 2 | 0.13 |
| (1,2092) | 1:A:66:ILE:HG23 | 1:A:72:LYS:H | 2 | 0.13 |
| (1,2068) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:63:ALA:HA | 2 | 0.13 |
| (1,2068) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:63:ALA:HA | 2 | 0.13 |
| (1,2068) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:63:ALA:HA | 2 | 0.13 |
| (1,206) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:32:LYS:HE3 | 1 | 0.13 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,206) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:32:LYS:HE2 | 1 | 0.13 |
| (1,206) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:32:LYS:HE3 | 15 | 0.13 |
| (1,206) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:32:LYS:HE2 | 15 | 0.13 |
| (1,206) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:32:LYS:HE3 | 16 | 0.13 |
| (1,206) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:32:LYS:HE2 | 16 | 0.13 |
| (1,1980) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:19:VAL:HG12 | 15 | 0.13 |
| (1,1980) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:19:VAL:HG11 | 15 | 0.13 |
| (1,1980) | 1:A:59:GLU:HG2 | 1:A:19:VAL:HG13 | 15 | 0.13 |
| (1,1952) | 1:A:78:LYS:HG2 | 1:A:78:LYS:H | 20 | 0.13 |
| (1,1944) | 1:A:56:LYS:HD3 | 1:A:56:LYS:H | 4 | 0.13 |
| (1,1862) | 1:A:51:PRO:HG2 | 1:A:52:GLU:H | 2 | 0.13 |
| (1,1862) | 1:A:51:PRO:HG2 | 1:A:52:GLU:H | 19 | 0.13 |
| (1,182) | 1:A:29:ASP:H | 1:A:28:SER:HA | 10 | 0.13 |
| (1,182) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:28:SER:HA | 10 | 0.13 |
| (1,1801) | 1:A:48:PRO:HD2 | 1:A:47:ASN:H | 17 | 0.13 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:68:THR:HB | 1 | 0.13 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:68:THR:HB | 1 | 0.13 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:68:THR:HB | 1 | 0.13 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:34:SER:HB3 | 1 | 0.13 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:34:SER:HB3 | 1 | 0.13 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:34:SER:HB3 | 1 | 0.13 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:68:THR:HB | 7 | 0.13 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:68:THR:HB | 7 | 0.13 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:68:THR:HB | 7 | 0.13 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:34:SER:HB3 | 7 | 0.13 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:34:SER:HB3 | 7 | 0.13 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:34:SER:HB3 | 7 | 0.13 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:68:THR:HB | 17 | 0.13 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:68:THR:HB | 17 | 0.13 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:68:THR:HB | 17 | 0.13 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:34:SER:HB3 | 17 | 0.13 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:34:SER:HB3 | 17 | 0.13 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:34:SER:HB3 | 17 | 0.13 |
| (1,1750) | 1:A:46:LYS:HD3 | 1:A:46:LYS:HB2 | 1 | 0.13 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:30:ASP:HB2 | 6 | 0.13 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:30:ASP:HB2 | 6 | 0.13 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:30:ASP:HB2 | 6 | 0.13 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:30:ASP:HB3 | 6 | 0.13 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:30:ASP:HB3 | 6 | 0.13 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:30:ASP:HB3 | 6 | 0.13 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:30:ASP:HB2 | 14 | 0.13 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:30:ASP:HB2 | 14 | 0.13 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:30:ASP:HB2 | 14 | 0.13 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:30:ASP:HB3 | 14 | 0.13 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:30:ASP:HB3 | 14 | 0.13 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:30:ASP:HB3 | 14 | 0.13 |
| (1,1700) | 1:A:44:PRO:HB2 | 1:A:44:PRO:HD2 | 2 | 0.13 |
| (1,1700) | 1:A:44:PRO:HB2 | 1:A:44:PRO:HD2 | 4 | 0.13 |
| (1,1700) | 1:A:44:PRO:HB2 | 1:A:44:PRO:HD2 | 6 | 0.13 |
| (1,1700) | 1:A:44:PRO:HB2 | 1:A:44:PRO:HD2 | 7 | 0.13 |
| (1,1700) | 1:A:44:PRO:HB2 | 1:A:44:PRO:HD2 | 8 | 0.13 |
| (1,1700) | 1:A:44:PRO:HB2 | 1:A:44:PRO:HD2 | 16 | 0.13 |
| (1,1700) | 1:A:44:PRO:HB2 | 1:A:44:PRO:HD2 | 17 | 0.13 |
| (1,1700) | 1:A:44:PRO:HB2 | 1:A:44:PRO:HD2 | 18 | 0.13 |
| (1,1700) | 1:A:44:PRO:HB2 | 1:A:44:PRO:HD2 | 19 | 0.13 |
| (1,1674) | 1:A:42:TYR:HB2 | 1:A:56:LYS:HB3 | 20 | 0.13 |
| (1,1648) | 1:A:41:LYS:HD2 | 1:A:41:LYS:H | 11 | 0.13 |
| (1,1599) | 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:42:TYR:HE2 | 11 | 0.13 |
| (1,1599) | 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:42:TYR:HE1 | 11 | 0.13 |
| (1,1599) | 1:A:38:LEU:HD12 | 1:A:42:TYR:HE2 | 11 | 0.13 |
| (1,1599) | 1:A:38:LEU:HD12 | 1:A:42:TYR:HE1 | 11 | 0.13 |
| (1,1599) | 1:A:38:LEU:HD13 | 1:A:42:TYR:HE2 | 11 | 0.13 |
| (1,1599) | 1:A:38:LEU:HD13 | 1:A:42:TYR:HE1 | 11 | 0.13 |
| (1,1450) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:27:THR:HG21 | 1 | 0.13 |
| (1,1450) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:27:THR:HG22 | 1 | 0.13 |
| (1,1450) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:27:THR:HG23 | 1 | 0.13 |
| (1,1450) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:27:THR:HG21 | 2 | 0.13 |
| (1,1450) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:27:THR:HG22 | 2 | 0.13 |
| (1,1450) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:27:THR:HG23 | 2 | 0.13 |
| (1,1450) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:27:THR:HG21 | 3 | 0.13 |
| (1,1450) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:27:THR:HG22 | 3 | 0.13 |
| (1,1450) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:27:THR:HG23 | 3 | 0.13 |
| (1,1450) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:27:THR:HG21 | 15 | 0.13 |
| (1,1450) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:27:THR:HG22 | 15 | 0.13 |
| (1,1450) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:27:THR:HG23 | 15 | 0.13 |
| (1,1450) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:27:THR:HG21 | 18 | 0.13 |
| (1,1450) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:27:THR:HG22 | 18 | 0.13 |
| (1,1450) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:27:THR:HG23 | 18 | 0.13 |
| (1,1427) | 1:A:26:ALA:HA | 1:A:30:ASP:H | 15 | 0.13 |
| (1,1421) | 1:A:25:ASN:HA | 1:A:25:ASN:HD22 | 17 | 0.13 |
| (1,1421) | 1:A:25:ASN:HA | 1:A:25:ASN:HD22 | 19 | 0.13 |
| (1,1408) | 1:A:24:LYS:HE2 | 1:A:24:LYS:HA | 3 | 0.13 |
| (1,138) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:30:ASP:HB3 | 6 | 0.13 |
| (1,138) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:30:ASP:HB3 | 6 | 0.13 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,138) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:30:ASP:HB3 | 6 | 0.13 |
| (1,138) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:30:ASP:HB2 | 6 | 0.13 |
| (1,138) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:30:ASP:HB2 | 6 | 0.13 |
| (1,138) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:30:ASP:HB2 | 6 | 0.13 |
| (1,138) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:30:ASP:HB3 | 15 | 0.13 |
| (1,138) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:30:ASP:HB3 | 15 | 0.13 |
| (1,138) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:30:ASP:HB3 | 15 | 0.13 |
| (1,138) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:30:ASP:HB2 | 15 | 0.13 |
| (1,138) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:30:ASP:HB2 | 15 | 0.13 |
| (1,138) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:30:ASP:HB2 | 15 | 0.13 |
| (1,138) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:30:ASP:HB3 | 18 | 0.13 |
| (1,138) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:30:ASP:HB3 | 18 | 0.13 |
| (1,138) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:30:ASP:HB3 | 18 | 0.13 |
| (1,138) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:30:ASP:HB2 | 18 | 0.13 |
| (1,138) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:30:ASP:HB2 | 18 | 0.13 |
| (1,138) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:30:ASP:HB2 | 18 | 0.13 |
| (1,1368) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:25:ASN:HD22 | 13 | 0.13 |
| (1,1368) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:25:ASN:HD22 | 13 | 0.13 |
| (1,1368) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:25:ASN:HD22 | 13 | 0.13 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD22 | 5 | 0.13 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD21 | 5 | 0.13 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD23 | 5 | 0.13 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:26:ALA:HA | 5 | 0.13 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:26:ALA:HA | 5 | 0.13 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:26:ALA:HA | 5 | 0.13 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD22 | 6 | 0.13 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD21 | 6 | 0.13 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD23 | 6 | 0.13 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:26:ALA:HA | 6 | 0.13 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:26:ALA:HA | 6 | 0.13 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:26:ALA:HA | 6 | 0.13 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD22 | 12 | 0.13 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD21 | 12 | 0.13 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD23 | 12 | 0.13 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:26:ALA:HA | 12 | 0.13 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:26:ALA:HA | 12 | 0.13 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:26:ALA:HA | 12 | 0.13 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD22 | 14 | 0.13 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD21 | 14 | 0.13 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD23 | 14 | 0.13 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:26:ALA:HA | 14 | 0.13 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:26:ALA:HA | 14 | 0.13 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:26:ALA:HA | 14 | 0.13 |
| (1,1280) | 1:A:95:VAL:HG21 | 1:A:90:PHE:HB2 | 10 | 0.13 |
| (1,1280) | 1:A:95:VAL:HG22 | 1:A:90:PHE:HB2 | 10 | 0.13 |
| (1,1280) | 1:A:95:VAL:HG23 | 1:A:90:PHE:HB2 | 10 | 0.13 |
| (1,1280) | 1:A:95:VAL:HG21 | 1:A:90:PHE:HB2 | 15 | 0.13 |
| (1,1280) | 1:A:95:VAL:HG22 | 1:A:90:PHE:HB2 | 15 | 0.13 |
| (1,1280) | 1:A:95:VAL:HG23 | 1:A:90:PHE:HB2 | 15 | 0.13 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG21 | 1:A:26:ALA:HA | 11 | 0.13 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG22 | 1:A:26:ALA:HA | 11 | 0.13 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG23 | 1:A:26:ALA:HA | 11 | 0.13 |
| (1,1266) | 1:A:95:VAL:HG21 | 1:A:94:ASN:HA | 13 | 0.13 |
| (1,1266) | 1:A:95:VAL:HG22 | 1:A:94:ASN:HA | 13 | 0.13 |
| (1,1266) | 1:A:95:VAL:HG23 | 1:A:94:ASN:HA | 13 | 0.13 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG12 | 1:A:82:LEU:HA | 5 | 0.13 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG11 | 1:A:82:LEU:HA | 5 | 0.13 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG13 | 1:A:82:LEU:HA | 5 | 0.13 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG12 | 1:A:85:TYR:HA | 5 | 0.13 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG11 | 1:A:85:TYR:HA | 5 | 0.13 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG13 | 1:A:85:TYR:HA | 5 | 0.13 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG12 | 1:A:82:LEU:HA | 6 | 0.13 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG11 | 1:A:82:LEU:HA | 6 | 0.13 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG13 | 1:A:82:LEU:HA | 6 | 0.13 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG12 | 1:A:85:TYR:HA | 6 | 0.13 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG11 | 1:A:85:TYR:HA | 6 | 0.13 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG13 | 1:A:85:TYR:HA | 6 | 0.13 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG12 | 1:A:82:LEU:HA | 9 | 0.13 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG11 | 1:A:82:LEU:HA | 9 | 0.13 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG13 | 1:A:82:LEU:HA | 9 | 0.13 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG12 | 1:A:85:TYR:HA | 9 | 0.13 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG11 | 1:A:85:TYR:HA | 9 | 0.13 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG13 | 1:A:85:TYR:HA | 9 | 0.13 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG12 | 1:A:82:LEU:HA | 12 | 0.13 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG11 | 1:A:82:LEU:HA | 12 | 0.13 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG13 | 1:A:82:LEU:HA | 12 | 0.13 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG12 | 1:A:85:TYR:HA | 12 | 0.13 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG11 | 1:A:85:TYR:HA | 12 | 0.13 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG13 | 1:A:85:TYR:HA | 12 | 0.13 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG12 | 1:A:82:LEU:HA | 14 | 0.13 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG11 | 1:A:82:LEU:HA | 14 | 0.13 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG13 | 1:A:82:LEU:HA | 14 | 0.13 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG12 | 1:A:85:TYR:HA | 14 | 0.13 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG11 | 1:A:85:TYR:HA | 14 | 0.13 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG13 | 1:A:85:TYR:HA | 14 | 0.13 |
| (1,1197) | 1:A:67:LEU:HD22 | 1:A:73:ARG:HD3 | 2 | 0.13 |
| (1,1197) | 1:A:67:LEU:HD21 | 1:A:73:ARG:HD3 | 2 | 0.13 |
| (1,1197) | 1:A:67:LEU:HD23 | 1:A:73:ARG:HD3 | 2 | 0.13 |
| (1,1197) | 1:A:67:LEU:HD22 | 1:A:73:ARG:HD3 | 13 | 0.13 |
| (1,1197) | 1:A:67:LEU:HD21 | 1:A:73:ARG:HD3 | 13 | 0.13 |
| (1,1197) | 1:A:67:LEU:HD23 | 1:A:73:ARG:HD3 | 13 | 0.13 |
| (1,114) | 1:A:19:VAL:H | 1:A:19:VAL:HG12 | 1 | 0.13 |
| (1,114) | 1:A:19:VAL:H | 1:A:19:VAL:HG11 | 1 | 0.13 |
| (1,114) | 1:A:19:VAL:H | 1:A:19:VAL:HG13 | 1 | 0.13 |
| (1,114) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:19:VAL:HG12 | 1 | 0.13 |
| (1,114) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:19:VAL:HG11 | 1 | 0.13 |
| (1,114) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:19:VAL:HG13 | 1 | 0.13 |
| (1,114) | 1:A:19:VAL:H | 1:A:19:VAL:HG12 | 16 | 0.13 |
| (1,114) | 1:A:19:VAL:H | 1:A:19:VAL:HG11 | 16 | 0.13 |
| (1,114) | 1:A:19:VAL:H | 1:A:19:VAL:HG13 | 16 | 0.13 |
| (1,114) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:19:VAL:HG12 | 16 | 0.13 |
| (1,114) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:19:VAL:HG11 | 16 | 0.13 |
| (1,114) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:19:VAL:HG13 | 16 | 0.13 |
| (1,1115) | 1:A:13:GLY:HA2 | 1:A:14:GLU:HA | 9 | 0.13 |
| (1,100) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:72:LYS:HB3 | 6 | 0.13 |
| (1,100) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:72:LYS:HB3 | 6 | 0.13 |
| (1,100) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:72:LYS:HB3 | 6 | 0.13 |
| (1,100) | 1:A:16:LEU:HD22 | 1:A:84:LEU:HB3 | 6 | 0.13 |
| (1,100) | 1:A:16:LEU:HD21 | 1:A:84:LEU:HB3 | 6 | 0.13 |
| (1,100) | 1:A:16:LEU:HD23 | 1:A:84:LEU:HB3 | 6 | 0.13 |
| (1,984) | 1:A:5:ARG:HA | 1:A:5:ARG:HG2 | 8 | 0.12 |
| (1,984) | 1:A:5:ARG:HA | 1:A:5:ARG:HG2 | 18 | 0.12 |
| (1,980) | 1:A:5:ARG:HA | 1:A:5:ARG:HB2 | 3 | 0.12 |
| (1,980) | 1:A:5:ARG:HA | 1:A:5:ARG:HB2 | 6 | 0.12 |
| (1,980) | 1:A:5:ARG:HA | 1:A:5:ARG:HB2 | 7 | 0.12 |
| (1,915) | 1:A:46:LYS:HG3 | 1:A:46:LYS:HA | 7 | 0.12 |
| (1,839) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:56:LYS:HB3 | 7 | 0.12 |
| (1,839) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:56:LYS:HG3 | 7 | 0.12 |
| (1,839) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:56:LYS:HB3 | 15 | 0.12 |
| (1,839) | 1:A:55:ASP:H | 1:A:56:LYS:HG3 | 15 | 0.12 |
| (1,802) | 1:A:72:LYS:H | 1:A:75:ILE:HB | 14 | 0.12 |
| (1,802) | 1:A:72:LYS:H | 1:A:88:GLU:HB3 | 14 | 0.12 |
| (1,793) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:44:PRO:HB3 | 5 | 0.12 |
| (1,793) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:44:PRO:HD3 | 5 | 0.12 |
| (1,758) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:44:PRO:HA | 1 | 0.12 |
| (1,758) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:51:PRO:HD2 | 1 | 0.12 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:11:THR:H | 10 | 0.12 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:11:THR:H | 10 | 0.12 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:11:THR:H | 10 | 0.12 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:86:VAL:H | 10 | 0.12 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:86:VAL:H | 10 | 0.12 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:86:VAL:H | 10 | 0.12 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:11:THR:H | 12 | 0.12 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:11:THR:H | 12 | 0.12 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:11:THR:H | 12 | 0.12 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:86:VAL:H | 12 | 0.12 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:86:VAL:H | 12 | 0.12 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:86:VAL:H | 12 | 0.12 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:11:THR:H | 17 | 0.12 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:11:THR:H | 17 | 0.12 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:11:THR:H | 17 | 0.12 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:86:VAL:H | 17 | 0.12 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:86:VAL:H | 17 | 0.12 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:86:VAL:H | 17 | 0.12 |
| (1,711) | 1:A:53:ALA:H | 1:A:52:GLU:HG2 | 15 | 0.12 |
| (1,711) | 1:A:53:ALA:H | 1:A:52:GLU:HG3 | 15 | 0.12 |
| (1,686) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:38:LEU:HD11 | 13 | 0.12 |
| (1,686) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:38:LEU:HD12 | 13 | 0.12 |
| (1,686) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:38:LEU:HD13 | 13 | 0.12 |
| (1,686) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:39:ALA:HB1 | 13 | 0.12 |
| (1,686) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:39:ALA:HB2 | 13 | 0.12 |
| (1,686) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:39:ALA:HB3 | 13 | 0.12 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:24:LYS:HB2 | 15 | 0.12 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG21 | 15 | 0.12 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG22 | 15 | 0.12 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:27:THR:HG23 | 15 | 0.12 |
| (1,659) | 1:A:26:ALA:H | 1:A:67:LEU:HB2 | 15 | 0.12 |
| (1,652) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:6:GLN:HB2 | 13 | 0.12 |
| (1,652) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:84:LEU:HB2 | 13 | 0.12 |
| (1,644) | 1:A:84:LEU:H | 1:A:92:GLU:HG3 | 4 | 0.12 |
| (1,644) | 1:A:84:LEU:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 4 | 0.12 |
| (1,623) | 1:A:91:GLY:H | 1:A:92:GLU:HB2 | 15 | 0.12 |
| (1,623) | 1:A:91:GLY:H | 1:A:92:GLU:HB3 | 15 | 0.12 |
| (1,551) | 1:A:77:ASP:H | 1:A:73:ARG:HB2 | 4 | 0.12 |
| (1,551) | 1:A:77:ASP:H | 1:A:73:ARG:HB3 | 4 | 0.12 |
| (1,539) | 1:A:93:GLU:HA | 1:A:96:ASN:HB2 | 14 | 0.12 |
| (1,539) | 1:A:93:GLU:HA | 1:A:96:ASN:HB3 | 14 | 0.12 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:79:TYR:HB3 | 8 | 0.12 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:72:LYS:HE2 | 8 | 0.12 |
| (1,534) | 1:A:84:LEU:HA | 1:A:72:LYS:HE3 | 8 | 0.12 |
| (1,494) | 1:A:97:THR:HA | 1:A:96:ASN:HB3 | 11 | 0.12 |
| (1,494) | 1:A:97:THR:HA | 1:A:96:ASN:HB2 | 11 | 0.12 |
| (1,494) | 1:A:97:THR:HA | 1:A:96:ASN:HB3 | 16 | 0.12 |
| (1,494) | 1:A:97:THR:HA | 1:A:96:ASN:HB2 | 16 | 0.12 |
| (1,472) | 1:A:85:TYR:HA | 1:A:82:LEU:HD12 | 12 | 0.12 |
| (1,472) | 1:A:85:TYR:HA | 1:A:82:LEU:HD11 | 12 | 0.12 |
| (1,472) | 1:A:85:TYR:HA | 1:A:82:LEU:HD13 | 12 | 0.12 |
| (1,472) | 1:A:85:TYR:HA | 1:A:89:GLN:HB2 | 12 | 0.12 |
| (1,472) | 1:A:85:TYR:HA | 1:A:82:LEU:HD12 | 16 | 0.12 |
| (1,472) | 1:A:85:TYR:HA | 1:A:82:LEU:HD11 | 16 | 0.12 |
| (1,472) | 1:A:85:TYR:HA | 1:A:82:LEU:HD13 | 16 | 0.12 |
| (1,472) | 1:A:85:TYR:HA | 1:A:89:GLN:HB2 | 16 | 0.12 |
| (1,440) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:39:ALA:HA | 6 | 0.12 |
| (1,440) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:58:LYS:HA | 6 | 0.12 |
| (1,440) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:88:GLU:HA | 6 | 0.12 |
| (1,440) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:39:ALA:HA | 10 | 0.12 |
| (1,440) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:58:LYS:HA | 10 | 0.12 |
| (1,440) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:88:GLU:HA | 10 | 0.12 |
| (1,440) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:39:ALA:HA | 12 | 0.12 |
| (1,440) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:58:LYS:HA | 12 | 0.12 |
| (1,440) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:88:GLU:HA | 12 | 0.12 |
| (1,440) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:39:ALA:HA | 14 | 0.12 |
| (1,440) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:58:LYS:HA | 14 | 0.12 |
| (1,440) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:88:GLU:HA | 14 | 0.12 |
| (1,440) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:39:ALA:HA | 17 | 0.12 |
| (1,440) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:58:LYS:HA | 17 | 0.12 |
| (1,440) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:88:GLU:HA | 17 | 0.12 |
| (1,440) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:39:ALA:HA | 18 | 0.12 |
| (1,440) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:58:LYS:HA | 18 | 0.12 |
| (1,440) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:88:GLU:HA | 18 | 0.12 |
| (1,435) | 1:A:75:ILE:HG22 | 1:A:92:GLU:HG3 | 10 | 0.12 |
| (1,435) | 1:A:75:ILE:HG21 | 1:A:92:GLU:HG3 | 10 | 0.12 |
| (1,435) | 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:92:GLU:HG3 | 10 | 0.12 |
| (1,435) | 1:A:75:ILE:HG22 | 1:A:92:GLU:HG2 | 10 | 0.12 |
| (1,435) | 1:A:75:ILE:HG21 | 1:A:92:GLU:HG2 | 10 | 0.12 |
| (1,435) | 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:92:GLU:HG2 | 10 | 0.12 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG22 | 1:A:84:LEU:HB3 | 8 | 0.12 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG21 | 1:A:84:LEU:HB3 | 8 | 0.12 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:84:LEU:HB3 | 8 | 0.12 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG22 | 1:A:72:LYS:HB3 | 8 | 0.12 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG21 | 1:A:72:LYS:HB3 | 8 | 0.12 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:72:LYS:HB3 | 8 | 0.12 |
| (1,400) | 1:A:97:THR:HB | 1:A:96:ASN:HB2 | 8 | 0.12 |
| (1,400) | 1:A:97:THR:HB | 1:A:96:ASN:HB3 | 8 | 0.12 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:69:ASP:HB2 | 10 | 0.12 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:69:ASP:HB2 | 10 | 0.12 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:69:ASP:HB2 | 10 | 0.12 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:73:ARG:HD3 | 10 | 0.12 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:73:ARG:HD3 | 10 | 0.12 |
| (1,375) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:73:ARG:HD3 | 10 | 0.12 |
| (1,370) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:72:LYS:HD2 | 6 | 0.12 |
| (1,370) | 1:A:72:LYS:HG2 | 1:A:66:ILE:HA | 6 | 0.12 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:72:LYS:HE3 | 5 | 0.12 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:76:TYR:HB2 | 5 | 0.12 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:76:TYR:HB3 | 5 | 0.12 |
| (1,313) | 1:A:87:ALA:HB2 | 1:A:92:GLU:HG3 | 1 | 0.12 |
| (1,313) | 1:A:87:ALA:HB1 | 1:A:92:GLU:HG3 | 1 | 0.12 |
| (1,313) | 1:A:87:ALA:HB3 | 1:A:92:GLU:HG3 | 1 | 0.12 |
| (1,313) | 1:A:87:ALA:HB2 | 1:A:92:GLU:HG2 | 1 | 0.12 |
| (1,313) | 1:A:87:ALA:HB1 | 1:A:92:GLU:HG2 | 1 | 0.12 |
| (1,313) | 1:A:87:ALA:HB3 | 1:A:92:GLU:HG2 | 1 | 0.12 |
| (1,313) | 1:A:87:ALA:HB2 | 1:A:92:GLU:HG3 | 18 | 0.12 |
| (1,313) | 1:A:87:ALA:HB1 | 1:A:92:GLU:HG3 | 18 | 0.12 |
| (1,313) | 1:A:87:ALA:HB3 | 1:A:92:GLU:HG3 | 18 | 0.12 |
| (1,313) | 1:A:87:ALA:HB2 | 1:A:92:GLU:HG2 | 18 | 0.12 |
| (1,313) | 1:A:87:ALA:HB1 | 1:A:92:GLU:HG2 | 18 | 0.12 |
| (1,313) | 1:A:87:ALA:HB3 | 1:A:92:GLU:HG2 | 18 | 0.12 |
| (1,3117) | 1:A:50:ASN:HD22 | 1:A:50:ASN:HB3 | 3 | 0.12 |
| (1,3117) | 1:A:50:ASN:HD22 | 1:A:50:ASN:HB3 | 20 | 0.12 |
| (1,3097) | 1:A:80:GLY:H | 1:A:13:GLY:H | 4 | 0.12 |
| (1,3083) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:42:TYR:HD2 | 12 | 0.12 |
| (1,3083) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:42:TYR:HD1 | 12 | 0.12 |
| (1,303) | 1:A:97:THR:H | 1:A:95:VAL:HB | 9 | 0.12 |
| (1,303) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:53:ALA:H | 9 | 0.12 |
| (1,303) | 1:A:51:PRO:HB3 | 1:A:54:ALA:H | 9 | 0.12 |
| (1,3023) | 1:A:5:ARG:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 5 | 0.12 |
| (1,3023) | 1:A:5:ARG:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 19 | 0.12 |
| (1,2947) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:44:PRO:HB2 | 14 | 0.12 |
| (1,2947) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:44:PRO:HB2 | 18 | 0.12 |
| (1,2843) | 1:A:24:LYS:H | 1:A:67:LEU:HB2 | 13 | 0.12 |
| (1,2839) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:39:ALA:HB1 | 2 | 0.12 |
| (1,2839) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:39:ALA:HB2 | 2 | 0.12 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2839) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:39:ALA:HB3 | 2 | 0.12 |
| (1,2787) | 1:A:57:PHE:H | 1:A:42:TYR:HD2 | 7 | 0.12 |
| (1,2787) | 1:A:57:PHE:H | 1:A:42:TYR:HD1 | 7 | 0.12 |
| (1,2787) | 1:A:57:PHE:H | 1:A:42:TYR:HD2 | 19 | 0.12 |
| (1,2787) | 1:A:57:PHE:H | 1:A:42:TYR:HD1 | 19 | 0.12 |
| (1,2760) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:29:ASP:HB3 | 6 | 0.12 |
| (1,2747) | 1:A:78:LYS:H | 1:A:6:GLN:HE22 | 2 | 0.12 |
| (1,2740) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:96:ASN:HD22 | 1 | 0.12 |
| (1,2740) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:96:ASN:HD22 | 5 | 0.12 |
| (1,2631) | 1:A:10:SEP:H | 1:A:9:LEU:HB2 | 4 | 0.12 |
| (1,2631) | 1:A:10:SEP:H | 1:A:9:LEU:HB2 | 6 | 0.12 |
| (1,2631) | 1:A:10:SEP:H | 1:A:9:LEU:HB2 | 8 | 0.12 |
| (1,2578) | 1:A:12:SER:H | 1:A:80:GLY:HA2 | 8 | 0.12 |
| (1,2530) | 1:A:93:GLU:HA | 1:A:92:GLU:HA | 12 | 0.12 |
| (1,2530) | 1:A:93:GLU:HA | 1:A:92:GLU:HA | 20 | 0.12 |
| (1,2519) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:72:LYS:H | 4 | 0.12 |
| (1,2519) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:72:LYS:H | 4 | 0.12 |
| (1,2519) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:72:LYS:H | 4 | 0.12 |
| (1,2519) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:72:LYS:H | 13 | 0.12 |
| (1,2519) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:72:LYS:H | 13 | 0.12 |
| (1,2519) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:72:LYS:H | 13 | 0.12 |
| (1,2519) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:72:LYS:H | 19 | 0.12 |
| (1,2519) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:72:LYS:H | 19 | 0.12 |
| (1,2519) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:72:LYS:H | 19 | 0.12 |
| (1,2491) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:30:ASP:H | 13 | 0.12 |
| (1,2432) | 1:A:94:ASN:HB3 | 1:A:90:PHE:HB2 | 9 | 0.12 |
| (1,2386) | 1:A:94:ASN:HD22 | 1:A:93:GLU:HG2 | 9 | 0.12 |
| (1,2378) | 1:A:87:ALA:HB2 | 1:A:91:GLY:HA3 | 1 | 0.12 |
| (1,2378) | 1:A:87:ALA:HB1 | 1:A:91:GLY:HA3 | 1 | 0.12 |
| (1,2378) | 1:A:87:ALA:HB3 | 1:A:91:GLY:HA3 | 1 | 0.12 |
| (1,2378) | 1:A:87:ALA:HB2 | 1:A:91:GLY:HA3 | 10 | 0.12 |
| (1,2378) | 1:A:87:ALA:HB1 | 1:A:91:GLY:HA3 | 10 | 0.12 |
| (1,2378) | 1:A:87:ALA:HB3 | 1:A:91:GLY:HA3 | 10 | 0.12 |
| (1,2324) | 1:A:84:LEU:HB2 | 1:A:88:GLU:HB3 | 3 | 0.12 |
| (1,2324) | 1:A:84:LEU:HB2 | 1:A:88:GLU:HB3 | 5 | 0.12 |
| (1,2313) | 1:A:83:GLY:HA2 | 1:A:85:TYR:HD2 | 5 | 0.12 |
| (1,2313) | 1:A:83:GLY:HA2 | 1:A:85:TYR:HD1 | 5 | 0.12 |
| (1,2265) | 1:A:81:SER:HA | 1:A:84:LEU:HB3 | 1 | 0.12 |
| (1,2265) | 1:A:81:SER:HA | 1:A:84:LEU:HB3 | 5 | 0.12 |
| (1,2265) | 1:A:81:SER:HA | 1:A:84:LEU:HB3 | 9 | 0.12 |
| (1,2265) | 1:A:81:SER:HA | 1:A:84:LEU:HB3 | 12 | 0.12 |
| (1,226) | 1:A:36:ARG:HA | 1:A:36:ARG:HD2 | 13 | 0.12 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,226) | 1:A:36:ARG:HA | 1:A:36:ARG:HD3 | 13 | 0.12 |
| (1,2251) | 1:A:75:ILE:HG22 | 1:A:79:TYR:HA | 4 | 0.12 |
| (1,2251) | 1:A:75:ILE:HG21 | 1:A:79:TYR:HA | 4 | 0.12 |
| (1,2251) | 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:79:TYR:HA | 4 | 0.12 |
| (1,2251) | 1:A:75:ILE:HG22 | 1:A:79:TYR:HA | 8 | 0.12 |
| (1,2251) | 1:A:75:ILE:HG21 | 1:A:79:TYR:HA | 8 | 0.12 |
| (1,2251) | 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:79:TYR:HA | 8 | 0.12 |
| (1,2251) | 1:A:75:ILE:HG22 | 1:A:79:TYR:HA | 13 | 0.12 |
| (1,2251) | 1:A:75:ILE:HG21 | 1:A:79:TYR:HA | 13 | 0.12 |
| (1,2251) | 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:79:TYR:HA | 13 | 0.12 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG22 | 6 | 0.12 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG21 | 6 | 0.12 |
| (1,2231) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:75:ILE:HG23 | 6 | 0.12 |
| (1,2190) | 1:A:73:ARG:HD3 | 1:A:73:ARG:HB3 | 11 | 0.12 |
| (1,2145) | 1:A:74:ASN:HB2 | 1:A:70:ALA:HA | 2 | 0.12 |
| (1,2145) | 1:A:74:ASN:HB2 | 1:A:70:ALA:HA | 11 | 0.12 |
| (1,2145) | 1:A:74:ASN:HB2 | 1:A:70:ALA:HA | 17 | 0.12 |
| (1,2145) | 1:A:74:ASN:HB2 | 1:A:70:ALA:HA | 19 | 0.12 |
| (1,2128) | 1:A:97:THR:HB | 1:A:94:ASN:HA | 5 | 0.12 |
| (1,2113) | 1:A:67:LEU:HD11 | 1:A:17:TYR:HA | 1 | 0.12 |
| (1,2113) | 1:A:67:LEU:HD12 | 1:A:17:TYR:HA | 1 | 0.12 |
| (1,2113) | 1:A:67:LEU:HD13 | 1:A:17:TYR:HA | 1 | 0.12 |
| (1,2113) | 1:A:67:LEU:HD11 | 1:A:17:TYR:HA | 14 | 0.12 |
| (1,2113) | 1:A:67:LEU:HD12 | 1:A:17:TYR:HA | 14 | 0.12 |
| (1,2113) | 1:A:67:LEU:HD13 | 1:A:17:TYR:HA | 14 | 0.12 |
| (1,2113) | 1:A:67:LEU:HD11 | 1:A:17:TYR:HA | 18 | 0.12 |
| (1,2113) | 1:A:67:LEU:HD12 | 1:A:17:TYR:HA | 18 | 0.12 |
| (1,2113) | 1:A:67:LEU:HD13 | 1:A:17:TYR:HA | 18 | 0.12 |
| (1,2113) | 1:A:67:LEU:HD11 | 1:A:17:TYR:HA | 20 | 0.12 |
| (1,2113) | 1:A:67:LEU:HD12 | 1:A:17:TYR:HA | 20 | 0.12 |
| (1,2113) | 1:A:67:LEU:HD13 | 1:A:17:TYR:HA | 20 | 0.12 |
| (1,2092) | 1:A:66:ILE:HG21 | 1:A:72:LYS:H | 4 | 0.12 |
| (1,2092) | 1:A:66:ILE:HG22 | 1:A:72:LYS:H | 4 | 0.12 |
| (1,2092) | 1:A:66:ILE:HG23 | 1:A:72:LYS:H | 4 | 0.12 |
| (1,2092) | 1:A:66:ILE:HG21 | 1:A:72:LYS:H | 15 | 0.12 |
| (1,2092) | 1:A:66:ILE:HG22 | 1:A:72:LYS:H | 15 | 0.12 |
| (1,2092) | 1:A:66:ILE:HG23 | 1:A:72:LYS:H | 15 | 0.12 |
| (1,2092) | 1:A:66:ILE:HG21 | 1:A:72:LYS:H | 17 | 0.12 |
| (1,2092) | 1:A:66:ILE:HG22 | 1:A:72:LYS:H | 17 | 0.12 |
| (1,2092) | 1:A:66:ILE:HG23 | 1:A:72:LYS:H | 17 | 0.12 |
| (1,206) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:32:LYS:HE3 | 17 | 0.12 |
| (1,206) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:32:LYS:HE2 | 17 | 0.12 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,206) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:32:LYS:HE3 | 19 | 0.12 |
| (1,206) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:32:LYS:HE2 | 19 | 0.12 |
| (1,1972) | 1:A:57:PHE:HB3 | 1:A:42:TYR:HB2 | 6 | 0.12 |
| (1,197) | 1:A:31:ILE:HD13 | 1:A:32:LYS:HE3 | 6 | 0.12 |
| (1,197) | 1:A:31:ILE:HD11 | 1:A:32:LYS:HE3 | 6 | 0.12 |
| (1,197) | 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:32:LYS:HE3 | 6 | 0.12 |
| (1,197) | 1:A:31:ILE:HD13 | 1:A:32:LYS:HE2 | 6 | 0.12 |
| (1,197) | 1:A:31:ILE:HD11 | 1:A:32:LYS:HE2 | 6 | 0.12 |
| (1,197) | 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:32:LYS:HE2 | 6 | 0.12 |
| (1,1944) | 1:A:56:LYS:HD3 | 1:A:56:LYS:H | 10 | 0.12 |
| (1,1939) | 1:A:56:LYS:HD2 | 1:A:42:TYR:HD2 | 9 | 0.12 |
| (1,1939) | 1:A:56:LYS:HD2 | 1:A:42:TYR:HD1 | 9 | 0.12 |
| (1,1939) | 1:A:56:LYS:HD2 | 1:A:42:TYR:HD2 | 15 | 0.12 |
| (1,1939) | 1:A:56:LYS:HD2 | 1:A:42:TYR:HD1 | 15 | 0.12 |
| (1,1862) | 1:A:51:PRO:HG2 | 1:A:52:GLU:H | 11 | 0.12 |
| (1,1862) | 1:A:51:PRO:HG2 | 1:A:52:GLU:H | 13 | 0.12 |
| (1,1862) | 1:A:51:PRO:HG2 | 1:A:52:GLU:H | 16 | 0.12 |
| (1,1862) | 1:A:51:PRO:HG2 | 1:A:52:GLU:H | 20 | 0.12 |
| (1,182) | 1:A:29:ASP:H | 1:A:28:SER:HA | 2 | 0.12 |
| (1,182) | 1:A:32:LYS:H | 1:A:28:SER:HA | 2 | 0.12 |
| (1,1773) | 1:A:47:ASN:HA | 1:A:46:LYS:HB3 | 4 | 0.12 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:68:THR:HB | 3 | 0.12 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:68:THR:HB | 3 | 0.12 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:68:THR:HB | 3 | 0.12 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:34:SER:HB3 | 3 | 0.12 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:34:SER:HB3 | 3 | 0.12 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:34:SER:HB3 | 3 | 0.12 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:68:THR:HB | 11 | 0.12 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:68:THR:HB | 11 | 0.12 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:68:THR:HB | 11 | 0.12 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:34:SER:HB3 | 11 | 0.12 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:34:SER:HB3 | 11 | 0.12 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:34:SER:HB3 | 11 | 0.12 |
| (1,1754) | 1:A:46:LYS:HG2 | 1:A:43:HIS:HB3 | 16 | 0.12 |
| (1,1750) | 1:A:46:LYS:HD3 | 1:A:46:LYS:HB2 | 8 | 0.12 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:30:ASP:HB2 | 3 | 0.12 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:30:ASP:HB2 | 3 | 0.12 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:30:ASP:HB2 | 3 | 0.12 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:30:ASP:HB3 | 3 | 0.12 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:30:ASP:HB3 | 3 | 0.12 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:30:ASP:HB3 | 3 | 0.12 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:30:ASP:HB2 | 4 | 0.12 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:30:ASP:HB2 | 4 | 0.12 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:30:ASP:HB2 | 4 | 0.12 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:30:ASP:HB3 | 4 | 0.12 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:30:ASP:HB3 | 4 | 0.12 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:30:ASP:HB3 | 4 | 0.12 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:30:ASP:HB2 | 13 | 0.12 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:30:ASP:HB2 | 13 | 0.12 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:30:ASP:HB2 | 13 | 0.12 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:30:ASP:HB3 | 13 | 0.12 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:30:ASP:HB3 | 13 | 0.12 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:30:ASP:HB3 | 13 | 0.12 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:30:ASP:HB2 | 15 | 0.12 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:30:ASP:HB2 | 15 | 0.12 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:30:ASP:HB2 | 15 | 0.12 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:30:ASP:HB3 | 15 | 0.12 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:30:ASP:HB3 | 15 | 0.12 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:30:ASP:HB3 | 15 | 0.12 |
| (1,1724) | 1:A:49:ASP:HB3 | 1:A:50:ASN:HD22 | 10 | 0.12 |
| (1,1664) | 1:A:41:LYS:HE2 | 1:A:38:LEU:HA | 17 | 0.12 |
| (1,1662) | 1:A:41:LYS:HE3 | 1:A:42:TYR:HD2 | 7 | 0.12 |
| (1,1662) | 1:A:41:LYS:HE3 | 1:A:42:TYR:HD1 | 7 | 0.12 |
| (1,1659) | 1:A:41:LYS:HD3 | 1:A:38:LEU:HD22 | 2 | 0.12 |
| (1,1659) | 1:A:41:LYS:HD3 | 1:A:38:LEU:HD21 | 2 | 0.12 |
| (1,1659) | 1:A:41:LYS:HD3 | 1:A:38:LEU:HD23 | 2 | 0.12 |
| (1,1655) | 1:A:41:LYS:HD3 | 1:A:41:LYS:HB2 | 12 | 0.12 |
| (1,1655) | 1:A:41:LYS:HD3 | 1:A:41:LYS:HB2 | 14 | 0.12 |
| (1,1620) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:39:ALA:HB1 | 8 | 0.12 |
| (1,1620) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:39:ALA:HB2 | 8 | 0.12 |
| (1,1620) | 1:A:36:ARG:H | 1:A:39:ALA:HB3 | 8 | 0.12 |
| (1,1609) | 1:A:39:ALA:HA | 1:A:41:LYS:H | 6 | 0.12 |
| (1,1571) | 1:A:58:LYS:HG2 | 1:A:58:LYS:HA | 13 | 0.12 |
| (1,1556) | 1:A:36:ARG:HG3 | 1:A:37:LYS:H | 15 | 0.12 |
| (1,1531) | 1:A:22:LEU:HG | 1:A:34:SER:HB3 | 12 | 0.12 |
| (1,1478) | 1:A:31:ILE:HD13 | 1:A:26:ALA:HA | 14 | 0.12 |
| (1,1478) | 1:A:31:ILE:HD11 | 1:A:26:ALA:HA | 14 | 0.12 |
| (1,1478) | 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:26:ALA:HA | 14 | 0.12 |
| (1,1450) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:27:THR:HG21 | 6 | 0.12 |
| (1,1450) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:27:THR:HG22 | 6 | 0.12 |
| (1,1450) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:27:THR:HG23 | 6 | 0.12 |
| (1,1450) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:27:THR:HG21 | 20 | 0.12 |
| (1,1450) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:27:THR:HG22 | 20 | 0.12 |
| (1,1450) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:27:THR:HG23 | 20 | 0.12 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1427) | 1:A:26:ALA:HA | 1:A:30:ASP:H | 1 | 0.12 |
| (1,1413) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:25:ASN:HD22 | 6 | 0.12 |
| (1,1413) | 1:A:24:LYS:HG3 | 1:A:25:ASN:HD22 | 14 | 0.12 |
| (1,139) | 1:A:84:LEU:HD21 | 1:A:72:LYS:HE3 | 6 | 0.12 |
| (1,139) | 1:A:84:LEU:HD22 | 1:A:72:LYS:HE3 | 6 | 0.12 |
| (1,139) | 1:A:84:LEU:HD23 | 1:A:72:LYS:HE3 | 6 | 0.12 |
| (1,139) | 1:A:84:LEU:HD21 | 1:A:76:TYR:HB3 | 6 | 0.12 |
| (1,139) | 1:A:84:LEU:HD22 | 1:A:76:TYR:HB3 | 6 | 0.12 |
| (1,139) | 1:A:84:LEU:HD23 | 1:A:76:TYR:HB3 | 6 | 0.12 |
| (1,139) | 1:A:84:LEU:HD21 | 1:A:76:TYR:HB2 | 6 | 0.12 |
| (1,139) | 1:A:84:LEU:HD22 | 1:A:76:TYR:HB2 | 6 | 0.12 |
| (1,139) | 1:A:84:LEU:HD23 | 1:A:76:TYR:HB2 | 6 | 0.12 |
| (1,139) | 1:A:84:LEU:HD21 | 1:A:72:LYS:HE2 | 6 | 0.12 |
| (1,139) | 1:A:84:LEU:HD22 | 1:A:72:LYS:HE2 | 6 | 0.12 |
| (1,139) | 1:A:84:LEU:HD23 | 1:A:72:LYS:HE2 | 6 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:67:LEU:HD11 | 15 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:67:LEU:HD12 | 15 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:67:LEU:HD13 | 15 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:67:LEU:HD11 | 15 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:67:LEU:HD12 | 15 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:67:LEU:HD13 | 15 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:67:LEU:HD11 | 15 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:67:LEU:HD12 | 15 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:67:LEU:HD13 | 15 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:67:LEU:HD11 | 17 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:67:LEU:HD12 | 17 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:67:LEU:HD13 | 17 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:67:LEU:HD11 | 17 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:67:LEU:HD12 | 17 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:67:LEU:HD13 | 17 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:67:LEU:HD11 | 17 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:67:LEU:HD12 | 17 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:67:LEU:HD13 | 17 | 0.12 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD22 | 9 | 0.12 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD21 | 9 | 0.12 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD23 | 9 | 0.12 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:26:ALA:HA | 9 | 0.12 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:26:ALA:HA | 9 | 0.12 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:26:ALA:HA | 9 | 0.12 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD22 | 16 | 0.12 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD21 | 16 | 0.12 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD23 | 16 | 0.12 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:26:ALA:HA | 16 | 0.12 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:26:ALA:HA | 16 | 0.12 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:26:ALA:HA | 16 | 0.12 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD22 | 19 | 0.12 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD21 | 19 | 0.12 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD23 | 19 | 0.12 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:26:ALA:HA | 19 | 0.12 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:26:ALA:HA | 19 | 0.12 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:26:ALA:HA | 19 | 0.12 |
| (1,1280) | 1:A:95:VAL:HG21 | 1:A:90:PHE:HB2 | 5 | 0.12 |
| (1,1280) | 1:A:95:VAL:HG22 | 1:A:90:PHE:HB2 | 5 | 0.12 |
| (1,1280) | 1:A:95:VAL:HG23 | 1:A:90:PHE:HB2 | 5 | 0.12 |
| (1,1280) | 1:A:95:VAL:HG21 | 1:A:90:PHE:HB2 | 13 | 0.12 |
| (1,1280) | 1:A:95:VAL:HG22 | 1:A:90:PHE:HB2 | 13 | 0.12 |
| (1,1280) | 1:A:95:VAL:HG23 | 1:A:90:PHE:HB2 | 13 | 0.12 |
| (1,1280) | 1:A:95:VAL:HG21 | 1:A:90:PHE:HB2 | 14 | 0.12 |
| (1,1280) | 1:A:95:VAL:HG22 | 1:A:90:PHE:HB2 | 14 | 0.12 |
| (1,1280) | 1:A:95:VAL:HG23 | 1:A:90:PHE:HB2 | 14 | 0.12 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG21 | 1:A:26:ALA:HA | 3 | 0.12 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG22 | 1:A:26:ALA:HA | 3 | 0.12 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG23 | 1:A:26:ALA:HA | 3 | 0.12 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG21 | 1:A:26:ALA:HA | 7 | 0.12 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG22 | 1:A:26:ALA:HA | 7 | 0.12 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG23 | 1:A:26:ALA:HA | 7 | 0.12 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG21 | 1:A:26:ALA:HA | 8 | 0.12 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG22 | 1:A:26:ALA:HA | 8 | 0.12 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG23 | 1:A:26:ALA:HA | 8 | 0.12 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG21 | 1:A:26:ALA:HA | 12 | 0.12 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG22 | 1:A:26:ALA:HA | 12 | 0.12 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG23 | 1:A:26:ALA:HA | 12 | 0.12 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG21 | 1:A:26:ALA:HA | 14 | 0.12 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG22 | 1:A:26:ALA:HA | 14 | 0.12 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG23 | 1:A:26:ALA:HA | 14 | 0.12 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG21 | 1:A:26:ALA:HA | 16 | 0.12 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG22 | 1:A:26:ALA:HA | 16 | 0.12 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG23 | 1:A:26:ALA:HA | 16 | 0.12 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG21 | 1:A:26:ALA:HA | 17 | 0.12 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG22 | 1:A:26:ALA:HA | 17 | 0.12 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG23 | 1:A:26:ALA:HA | 17 | 0.12 |
| (1,1264) | 1:A:95:VAL:HG21 | 1:A:92:GLU:HA | 14 | 0.12 |
| (1,1264) | 1:A:95:VAL:HG22 | 1:A:92:GLU:HA | 14 | 0.12 |
| (1,1264) | 1:A:95:VAL:HG23 | 1:A:92:GLU:HA | 14 | 0.12 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1262) | 1:A:19:VAL:HG12 | 1:A:59:GLU:HA | 2 | 0.12 |
| (1,1262) | 1:A:19:VAL:HG11 | 1:A:59:GLU:HA | 2 | 0.12 |
| (1,1262) | 1:A:19:VAL:HG13 | 1:A:59:GLU:HA | 2 | 0.12 |
| (1,1259) | 1:A:95:VAL:HG21 | 1:A:94:ASN:HD22 | 4 | 0.12 |
| (1,1259) | 1:A:95:VAL:HG22 | 1:A:94:ASN:HD22 | 4 | 0.12 |
| (1,1259) | 1:A:95:VAL:HG23 | 1:A:94:ASN:HD22 | 4 | 0.12 |
| (1,1259) | 1:A:95:VAL:HG21 | 1:A:94:ASN:HD22 | 6 | 0.12 |
| (1,1259) | 1:A:95:VAL:HG22 | 1:A:94:ASN:HD22 | 6 | 0.12 |
| (1,1259) | 1:A:95:VAL:HG23 | 1:A:94:ASN:HD22 | 6 | 0.12 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG12 | 1:A:82:LEU:HA | 1 | 0.12 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG11 | 1:A:82:LEU:HA | 1 | 0.12 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG13 | 1:A:82:LEU:HA | 1 | 0.12 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG12 | 1:A:85:TYR:HA | 1 | 0.12 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG11 | 1:A:85:TYR:HA | 1 | 0.12 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG13 | 1:A:85:TYR:HA | 1 | 0.12 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG12 | 1:A:82:LEU:HA | 11 | 0.12 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG11 | 1:A:82:LEU:HA | 11 | 0.12 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG13 | 1:A:82:LEU:HA | 11 | 0.12 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG12 | 1:A:85:TYR:HA | 11 | 0.12 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG11 | 1:A:85:TYR:HA | 11 | 0.12 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG13 | 1:A:85:TYR:HA | 11 | 0.12 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG12 | 1:A:82:LEU:HA | 16 | 0.12 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG11 | 1:A:82:LEU:HA | 16 | 0.12 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG13 | 1:A:82:LEU:HA | 16 | 0.12 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG12 | 1:A:85:TYR:HA | 16 | 0.12 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG11 | 1:A:85:TYR:HA | 16 | 0.12 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG13 | 1:A:85:TYR:HA | 16 | 0.12 |
| (1,1237) | 1:A:20:LEU:H | 1:A:18:HIS:HA | 2 | 0.12 |
| (1,1237) | 1:A:20:LEU:H | 1:A:18:HIS:HA | 5 | 0.12 |
| (1,1237) | 1:A:20:LEU:H | 1:A:18:HIS:HA | 8 | 0.12 |
| (1,1237) | 1:A:20:LEU:H | 1:A:18:HIS:HA | 18 | 0.12 |
| (1,1237) | 1:A:20:LEU:H | 1:A:18:HIS:HA | 19 | 0.12 |
| (1,1197) | 1:A:67:LEU:HD22 | 1:A:73:ARG:HD3 | 6 | 0.12 |
| (1,1197) | 1:A:67:LEU:HD21 | 1:A:73:ARG:HD3 | 6 | 0.12 |
| (1,1197) | 1:A:67:LEU:HD23 | 1:A:73:ARG:HD3 | 6 | 0.12 |
| (1,1115) | 1:A:13:GLY:HA2 | 1:A:14:GLU:HA | 20 | 0.12 |
| (1,1112) | 1:A:12:SER:HB2 | 1:A:14:GLU:HG2 | 20 | 0.12 |
| (1,109) | 1:A:18:HIS:HB2 | 1:A:15:SER:HB3 | 14 | 0.12 |
| (1,109) | 1:A:18:HIS:HB3 | 1:A:15:SER:HB3 | 14 | 0.12 |
| (1,1083) | 1:A:11:THR:HG21 | 1:A:11:THR:H | 9 | 0.12 |
| (1,1083) | 1:A:11:THR:HG22 | 1:A:11:THR:H | 9 | 0.12 |
| (1,1083) | 1:A:11:THR:HG23 | 1:A:11:THR:H | 9 | 0.12 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1075) | 1:A:55:ASP:HA | 1:A:58:LYS:HB2 | 10 | 0.12 |
| (1,996) | 1:A:6:GLN:HA | 1:A:6:GLN:HG2 | 3 | 0.11 |
| (1,984) | 1:A:5:ARG:HA | 1:A:5:ARG:HG2 | 1 | 0.11 |
| (1,980) | 1:A:5:ARG:HA | 1:A:5:ARG:HB2 | 18 | 0.11 |
| (1,86) | 1:A:92:GLU:HG3 | 1:A:92:GLU:H | 6 | 0.11 |
| (1,86) | 1:A:92:GLU:HG2 | 1:A:92:GLU:H | 6 | 0.11 |
| (1,827) | 1:A:31:ILE:H | 1:A:32:LYS:HA | 16 | 0.11 |
| (1,827) | 1:A:31:ILE:H | 1:A:34:SER:HB3 | 16 | 0.11 |
| (1,827) | 1:A:31:ILE:H | 1:A:68:THR:HB | 16 | 0.11 |
| (1,802) | 1:A:72:LYS:H | 1:A:75:ILE:HB | 13 | 0.11 |
| (1,802) | 1:A:72:LYS:H | 1:A:88:GLU:HB3 | 13 | 0.11 |
| (1,793) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:44:PRO:HB3 | 18 | 0.11 |
| (1,793) | 1:A:46:LYS:H | 1:A:44:PRO:HD3 | 18 | 0.11 |
| (1,780) | 1:A:73:ARG:H | 1:A:66:ILE:HB | 7 | 0.11 |
| (1,780) | 1:A:73:ARG:H | 1:A:70:ALA:HB1 | 7 | 0.11 |
| (1,780) | 1:A:73:ARG:H | 1:A:70:ALA:HB3 | 7 | 0.11 |
| (1,780) | 1:A:73:ARG:H | 1:A:70:ALA:HB2 | 7 | 0.11 |
| (1,758) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:44:PRO:HA | 8 | 0.11 |
| (1,758) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:51:PRO:HD2 | 8 | 0.11 |
| (1,758) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:44:PRO:HA | 16 | 0.11 |
| (1,758) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:51:PRO:HD2 | 16 | 0.11 |
| (1,758) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:44:PRO:HA | 20 | 0.11 |
| (1,758) | 1:A:50:ASN:H | 1:A:51:PRO:HD2 | 20 | 0.11 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:11:THR:H | 7 | 0.11 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:11:THR:H | 7 | 0.11 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:11:THR:H | 7 | 0.11 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD11 | 1:A:86:VAL:H | 7 | 0.11 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD13 | 1:A:86:VAL:H | 7 | 0.11 |
| (1,73) | 1:A:9:LEU:HD12 | 1:A:86:VAL:H | 7 | 0.11 |
| (1,686) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:38:LEU:HD11 | 14 | 0.11 |
| (1,686) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:38:LEU:HD12 | 14 | 0.11 |
| (1,686) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:38:LEU:HD13 | 14 | 0.11 |
| (1,686) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:39:ALA:HB1 | 14 | 0.11 |
| (1,686) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:39:ALA:HB2 | 14 | 0.11 |
| (1,686) | 1:A:38:LEU:H | 1:A:39:ALA:HB3 | 14 | 0.11 |
| (1,644) | 1:A:84:LEU:H | 1:A:92:GLU:HG3 | 2 | 0.11 |
| (1,644) | 1:A:84:LEU:H | 1:A:6:GLN:HG3 | 2 | 0.11 |
| (1,623) | 1:A:91:GLY:H | 1:A:92:GLU:HB2 | 20 | 0.11 |
| (1,623) | 1:A:91:GLY:H | 1:A:92:GLU:HB3 | 20 | 0.11 |
| (1,604) | 1:A:8:SER:H | 1:A:7:ARG:HG2 | 11 | 0.11 |
| (1,604) | 1:A:8:SER:H | 1:A:7:ARG:HG3 | 11 | 0.11 |
| (1,574) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HG2 | 11 | 0.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,574) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HD2 | 11 | 0.11 |
| (1,574) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HG2 | 14 | 0.11 |
| (1,574) | 1:A:34:SER:H | 1:A:33:LYS:HD2 | 14 | 0.11 |
| (1,566) | 1:A:12:SER:H | 1:A:10:SEP:HB2 | 3 | 0.11 |
| (1,566) | 1:A:12:SER:H | 1:A:10:SEP:HB3 | 3 | 0.11 |
| (1,566) | 1:A:12:SER:H | 1:A:10:SEP:HB2 | 6 | 0.11 |
| (1,566) | 1:A:12:SER:H | 1:A:10:SEP:HB3 | 6 | 0.11 |
| (1,551) | 1:A:77:ASP:H | 1:A:73:ARG:HB2 | 12 | 0.11 |
| (1,551) | 1:A:77:ASP:H | 1:A:73:ARG:HB3 | 12 | 0.11 |
| (1,542) | 1:A:97:THR:HA | 1:A:96:ASN:HB3 | 11 | 0.11 |
| (1,542) | 1:A:97:THR:HB | 1:A:96:ASN:HB3 | 11 | 0.11 |
| (1,542) | 1:A:97:THR:HA | 1:A:96:ASN:HB2 | 11 | 0.11 |
| (1,520) | 1:A:24:LYS:HD2 | 1:A:25:ASN:H | 1 | 0.11 |
| (1,520) | 1:A:24:LYS:HD3 | 1:A:25:ASN:H | 1 | 0.11 |
| (1,501) | 1:A:33:LYS:HB3 | 1:A:33:LYS:HG2 | 1 | 0.11 |
| (1,501) | 1:A:33:LYS:HB2 | 1:A:33:LYS:HD3 | 1 | 0.11 |
| (1,501) | 1:A:33:LYS:HB3 | 1:A:33:LYS:HG2 | 2 | 0.11 |
| (1,501) | 1:A:33:LYS:HB2 | 1:A:33:LYS:HD3 | 2 | 0.11 |
| (1,501) | 1:A:33:LYS:HB3 | 1:A:33:LYS:HG2 | 3 | 0.11 |
| (1,501) | 1:A:33:LYS:HB2 | 1:A:33:LYS:HD3 | 3 | 0.11 |
| (1,501) | 1:A:33:LYS:HB3 | 1:A:33:LYS:HG2 | 4 | 0.11 |
| (1,501) | 1:A:33:LYS:HB2 | 1:A:33:LYS:HD3 | 4 | 0.11 |
| (1,501) | 1:A:33:LYS:HB3 | 1:A:33:LYS:HG2 | 5 | 0.11 |
| (1,501) | 1:A:33:LYS:HB2 | 1:A:33:LYS:HD3 | 5 | 0.11 |
| (1,501) | 1:A:33:LYS:HB3 | 1:A:33:LYS:HG2 | 8 | 0.11 |
| (1,501) | 1:A:33:LYS:HB2 | 1:A:33:LYS:HD3 | 8 | 0.11 |
| (1,501) | 1:A:33:LYS:HB3 | 1:A:33:LYS:HG2 | 10 | 0.11 |
| (1,501) | 1:A:33:LYS:HB2 | 1:A:33:LYS:HD3 | 10 | 0.11 |
| (1,501) | 1:A:33:LYS:HB3 | 1:A:33:LYS:HG2 | 11 | 0.11 |
| (1,501) | 1:A:33:LYS:HB2 | 1:A:33:LYS:HD3 | 11 | 0.11 |
| (1,501) | 1:A:33:LYS:HB3 | 1:A:33:LYS:HG2 | 12 | 0.11 |
| (1,501) | 1:A:33:LYS:HB2 | 1:A:33:LYS:HD3 | 12 | 0.11 |
| (1,501) | 1:A:33:LYS:HB3 | 1:A:33:LYS:HG2 | 13 | 0.11 |
| (1,501) | 1:A:33:LYS:HB2 | 1:A:33:LYS:HD3 | 13 | 0.11 |
| (1,501) | 1:A:33:LYS:HB3 | 1:A:33:LYS:HG2 | 14 | 0.11 |
| (1,501) | 1:A:33:LYS:HB2 | 1:A:33:LYS:HD3 | 14 | 0.11 |
| (1,501) | 1:A:33:LYS:HB3 | 1:A:33:LYS:HG2 | 15 | 0.11 |
| (1,501) | 1:A:33:LYS:HB2 | 1:A:33:LYS:HD3 | 15 | 0.11 |
| (1,501) | 1:A:33:LYS:HB3 | 1:A:33:LYS:HG2 | 16 | 0.11 |
| (1,501) | 1:A:33:LYS:HB2 | 1:A:33:LYS:HD3 | 16 | 0.11 |
| (1,501) | 1:A:33:LYS:HB3 | 1:A:33:LYS:HG2 | 17 | 0.11 |
| (1,501) | 1:A:33:LYS:HB2 | 1:A:33:LYS:HD3 | 17 | 0.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,494) | 1:A:97:THR:HA | 1:A:96:ASN:HB3 | 14 | 0.11 |
| (1,494) | 1:A:97:THR:HA | 1:A:96:ASN:HB2 | 14 | 0.11 |
| (1,494) | 1:A:97:THR:HA | 1:A:96:ASN:HB3 | 20 | 0.11 |
| (1,494) | 1:A:97:THR:HA | 1:A:96:ASN:HB2 | 20 | 0.11 |
| (1,477) | 1:A:94:ASN:HD22 | 1:A:92:GLU:HB2 | 1 | 0.11 |
| (1,477) | 1:A:92:GLU:HB2 | 1:A:96:ASN:HD22 | 1 | 0.11 |
| (1,477) | 1:A:92:GLU:HB3 | 1:A:94:ASN:HD22 | 1 | 0.11 |
| (1,477) | 1:A:92:GLU:HB3 | 1:A:96:ASN:HD22 | 1 | 0.11 |
| (1,477) | 1:A:88:GLU:HB3 | 1:A:61:ASN:HD22 | 1 | 0.11 |
| (1,477) | 1:A:88:GLU:HB3 | 1:A:61:ASN:HD21 | 1 | 0.11 |
| (1,477) | 1:A:94:ASN:HD22 | 1:A:92:GLU:HB2 | 15 | 0.11 |
| (1,477) | 1:A:92:GLU:HB2 | 1:A:96:ASN:HD22 | 15 | 0.11 |
| (1,477) | 1:A:92:GLU:HB3 | 1:A:94:ASN:HD22 | 15 | 0.11 |
| (1,477) | 1:A:92:GLU:HB3 | 1:A:96:ASN:HD22 | 15 | 0.11 |
| (1,477) | 1:A:88:GLU:HB3 | 1:A:61:ASN:HD22 | 15 | 0.11 |
| (1,477) | 1:A:88:GLU:HB3 | 1:A:61:ASN:HD21 | 15 | 0.11 |
| (1,472) | 1:A:85:TYR:HA | 1:A:82:LEU:HD12 | 17 | 0.11 |
| (1,472) | 1:A:85:TYR:HA | 1:A:82:LEU:HD11 | 17 | 0.11 |
| (1,472) | 1:A:85:TYR:HA | 1:A:82:LEU:HD13 | 17 | 0.11 |
| (1,472) | 1:A:85:TYR:HA | 1:A:89:GLN:HB2 | 17 | 0.11 |
| (1,472) | 1:A:85:TYR:HA | 1:A:82:LEU:HD12 | 20 | 0.11 |
| (1,472) | 1:A:85:TYR:HA | 1:A:82:LEU:HD11 | 20 | 0.11 |
| (1,472) | 1:A:85:TYR:HA | 1:A:82:LEU:HD13 | 20 | 0.11 |
| (1,472) | 1:A:85:TYR:HA | 1:A:89:GLN:HB2 | 20 | 0.11 |
| (1,471) | 1:A:84:LEU:HB2 | 1:A:85:TYR:HA | 7 | 0.11 |
| (1,471) | 1:A:85:TYR:HA | 1:A:88:GLU:HG3 | 7 | 0.11 |
| (1,471) | 1:A:84:LEU:HB2 | 1:A:85:TYR:HA | 19 | 0.11 |
| (1,471) | 1:A:85:TYR:HA | 1:A:88:GLU:HG3 | 19 | 0.11 |
| (1,440) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:39:ALA:HA | 1 | 0.11 |
| (1,440) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:58:LYS:HA | 1 | 0.11 |
| (1,440) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:88:GLU:HA | 1 | 0.11 |
| (1,440) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:39:ALA:HA | 3 | 0.11 |
| (1,440) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:58:LYS:HA | 3 | 0.11 |
| (1,440) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:88:GLU:HA | 3 | 0.11 |
| (1,440) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:39:ALA:HA | 4 | 0.11 |
| (1,440) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:58:LYS:HA | 4 | 0.11 |
| (1,440) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:88:GLU:HA | 4 | 0.11 |
| (1,440) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:39:ALA:HA | 15 | 0.11 |
| (1,440) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:58:LYS:HA | 15 | 0.11 |
| (1,440) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:88:GLU:HA | 15 | 0.11 |
| (1,440) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:39:ALA:HA | 19 | 0.11 |
| (1,440) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:58:LYS:HA | 19 | 0.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,440) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:88:GLU:HA | 19 | 0.11 |
| (1,439) | 1:A:59:GLU:HA | 1:A:62:ASN:HA | 15 | 0.11 |
| (1,439) | 1:A:62:ASN:HA | 1:A:84:LEU:HA | 15 | 0.11 |
| (1,439) | 1:A:61:ASN:HA | 1:A:57:PHE:HA | 15 | 0.11 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG22 | 1:A:84:LEU:HB3 | 1 | 0.11 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG21 | 1:A:84:LEU:HB3 | 1 | 0.11 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:84:LEU:HB3 | 1 | 0.11 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG22 | 1:A:72:LYS:HB3 | 1 | 0.11 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG21 | 1:A:72:LYS:HB3 | 1 | 0.11 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:72:LYS:HB3 | 1 | 0.11 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG22 | 1:A:84:LEU:HB3 | 5 | 0.11 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG21 | 1:A:84:LEU:HB3 | 5 | 0.11 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:84:LEU:HB3 | 5 | 0.11 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG22 | 1:A:72:LYS:HB3 | 5 | 0.11 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG21 | 1:A:72:LYS:HB3 | 5 | 0.11 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:72:LYS:HB3 | 5 | 0.11 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG22 | 1:A:84:LEU:HB3 | 9 | 0.11 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG21 | 1:A:84:LEU:HB3 | 9 | 0.11 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:84:LEU:HB3 | 9 | 0.11 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG22 | 1:A:72:LYS:HB3 | 9 | 0.11 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG21 | 1:A:72:LYS:HB3 | 9 | 0.11 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:72:LYS:HB3 | 9 | 0.11 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG22 | 1:A:84:LEU:HB3 | 13 | 0.11 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG21 | 1:A:84:LEU:HB3 | 13 | 0.11 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:84:LEU:HB3 | 13 | 0.11 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG22 | 1:A:72:LYS:HB3 | 13 | 0.11 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG21 | 1:A:72:LYS:HB3 | 13 | 0.11 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:72:LYS:HB3 | 13 | 0.11 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG22 | 1:A:84:LEU:HB3 | 20 | 0.11 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG21 | 1:A:84:LEU:HB3 | 20 | 0.11 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:84:LEU:HB3 | 20 | 0.11 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG22 | 1:A:72:LYS:HB3 | 20 | 0.11 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG21 | 1:A:72:LYS:HB3 | 20 | 0.11 |
| (1,433) | 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:72:LYS:HB3 | 20 | 0.11 |
| (1,429) | 1:A:74:ASN:HB2 | 1:A:73:ARG:HB2 | 2 | 0.11 |
| (1,429) | 1:A:74:ASN:HB2 | 1:A:73:ARG:HB3 | 2 | 0.11 |
| (1,406) | 1:A:87:ALA:HB2 | 1:A:72:LYS:HE2 | 13 | 0.11 |
| (1,406) | 1:A:87:ALA:HB1 | 1:A:72:LYS:HE2 | 13 | 0.11 |
| (1,406) | 1:A:87:ALA:HB3 | 1:A:72:LYS:HE2 | 13 | 0.11 |
| (1,406) | 1:A:87:ALA:HB2 | 1:A:72:LYS:HE3 | 13 | 0.11 |
| (1,406) | 1:A:87:ALA:HB1 | 1:A:72:LYS:HE3 | 13 | 0.11 |
| (1,406) | 1:A:87:ALA:HB3 | 1:A:72:LYS:HE3 | 13 | 0.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,395) | 1:A:67:LEU:HD11 | 1:A:19:VAL:HB | 5 | 0.11 |
| (1,395) | 1:A:67:LEU:HD12 | 1:A:19:VAL:HB | 5 | 0.11 |
| (1,395) | 1:A:67:LEU:HD13 | 1:A:19:VAL:HB | 5 | 0.11 |
| (1,395) | 1:A:67:LEU:HD11 | 1:A:24:LYS:HA | 5 | 0.11 |
| (1,395) | 1:A:67:LEU:HD12 | 1:A:24:LYS:HA | 5 | 0.11 |
| (1,395) | 1:A:67:LEU:HD13 | 1:A:24:LYS:HA | 5 | 0.11 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:72:LYS:HE3 | 8 | 0.11 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:76:TYR:HB2 | 8 | 0.11 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:76:TYR:HB3 | 8 | 0.11 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:72:LYS:HE3 | 19 | 0.11 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:76:TYR:HB2 | 19 | 0.11 |
| (1,369) | 1:A:66:ILE:HA | 1:A:76:TYR:HB3 | 19 | 0.11 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:55:ASP:HB2 | 6 | 0.11 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:56:LYS:HE2 | 6 | 0.11 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:56:LYS:HE3 | 6 | 0.11 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:55:ASP:HB2 | 12 | 0.11 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:56:LYS:HE2 | 12 | 0.11 |
| (1,310) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:56:LYS:HE3 | 12 | 0.11 |
| (1,3097) | 1:A:80:GLY:H | 1:A:13:GLY:H | 6 | 0.11 |
| (1,3083) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:42:TYR:HD2 | 10 | 0.11 |
| (1,3083) | 1:A:41:LYS:H | 1:A:42:TYR:HD1 | 10 | 0.11 |
| (1,3048) | 1:A:23:ASP:H | 1:A:68:THR:H | 14 | 0.11 |
| (1,2984) | 1:A:73:ARG:H | 1:A:73:ARG:HD3 | 17 | 0.11 |
| (1,2984) | 1:A:73:ARG:H | 1:A:73:ARG:HD3 | 20 | 0.11 |
| (1,2917) | 1:A:66:ILE:H | 1:A:64:HIS:HB2 | 4 | 0.11 |
| (1,2884) | 1:A:98:TYR:H | 1:A:95:VAL:HG21 | 4 | 0.11 |
| (1,2884) | 1:A:98:TYR:H | 1:A:95:VAL:HG22 | 4 | 0.11 |
| (1,2884) | 1:A:98:TYR:H | 1:A:95:VAL:HG23 | 4 | 0.11 |
| (1,2787) | 1:A:57:PHE:H | 1:A:42:TYR:HD2 | 3 | 0.11 |
| (1,2787) | 1:A:57:PHE:H | 1:A:42:TYR:HD1 | 3 | 0.11 |
| (1,2787) | 1:A:57:PHE:H | 1:A:42:TYR:HD2 | 13 | 0.11 |
| (1,2787) | 1:A:57:PHE:H | 1:A:42:TYR:HD1 | 13 | 0.11 |
| (1,2787) | 1:A:57:PHE:H | 1:A:42:TYR:HD2 | 18 | 0.11 |
| (1,2787) | 1:A:57:PHE:H | 1:A:42:TYR:HD1 | 18 | 0.11 |
| (1,2761) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:22:LEU:HD22 | 4 | 0.11 |
| (1,2761) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:22:LEU:HD21 | 4 | 0.11 |
| (1,2761) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:22:LEU:HD23 | 4 | 0.11 |
| (1,2761) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:22:LEU:HD22 | 20 | 0.11 |
| (1,2761) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:22:LEU:HD21 | 20 | 0.11 |
| (1,2761) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:22:LEU:HD23 | 20 | 0.11 |
| (1,276) | 1:A:99:PHE:HB3 | 1:A:96:ASN:HA | 19 | 0.11 |
| (1,276) | 1:A:49:ASP:HB3 | 1:A:49:ASP:HA | 19 | 0.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,2747) | 1:A:78:LYS:H | 1:A:6:GLN:HE22 | 9 | 0.11 |
| (1,2740) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:96:ASN:HD22 | 10 | 0.11 |
| (1,2740) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:96:ASN:HD22 | 18 | 0.11 |
| (1,2737) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:82:LEU:HD21 | 15 | 0.11 |
| (1,2737) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:82:LEU:HD22 | 15 | 0.11 |
| (1,2737) | 1:A:83:GLY:H | 1:A:82:LEU:HD23 | 15 | 0.11 |
| (1,2677) | 1:A:82:LEU:H | 1:A:62:ASN:HD22 | 4 | 0.11 |
| (1,2677) | 1:A:82:LEU:H | 1:A:62:ASN:HD22 | 6 | 0.11 |
| (1,2642) | 1:A:8:SER:H | 1:A:8:SER:HB3 | 10 | 0.11 |
| (1,2631) | 1:A:10:SEP:H | 1:A:9:LEU:HB2 | 5 | 0.11 |
| (1,2631) | 1:A:10:SEP:H | 1:A:9:LEU:HB2 | 7 | 0.11 |
| (1,2631) | 1:A:10:SEP:H | 1:A:9:LEU:HB2 | 12 | 0.11 |
| (1,2631) | 1:A:10:SEP:H | 1:A:9:LEU:HB2 | 13 | 0.11 |
| (1,2631) | 1:A:10:SEP:H | 1:A:9:LEU:HB2 | 16 | 0.11 |
| (1,2631) | 1:A:10:SEP:H | 1:A:9:LEU:HB2 | 17 | 0.11 |
| (1,2525) | 1:A:79:TYR:HA | 1:A:83:GLY:HA3 | 4 | 0.11 |
| (1,2525) | 1:A:79:TYR:HA | 1:A:83:GLY:HA3 | 12 | 0.11 |
| (1,2525) | 1:A:79:TYR:HA | 1:A:83:GLY:HA3 | 14 | 0.11 |
| (1,2519) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:72:LYS:H | 9 | 0.11 |
| (1,2519) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:72:LYS:H | 9 | 0.11 |
| (1,2519) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:72:LYS:H | 9 | 0.11 |
| (1,2491) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:30:ASP:H | 1 | 0.11 |
| (1,2491) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:30:ASP:H | 11 | 0.11 |
| (1,2478) | 1:A:61:ASN:HD22 | 1:A:62:ASN:HA | 12 | 0.11 |
| (1,2378) | 1:A:87:ALA:HB2 | 1:A:91:GLY:HA3 | 2 | 0.11 |
| (1,2378) | 1:A:87:ALA:HB1 | 1:A:91:GLY:HA3 | 2 | 0.11 |
| (1,2378) | 1:A:87:ALA:HB3 | 1:A:91:GLY:HA3 | 2 | 0.11 |
| (1,2378) | 1:A:87:ALA:HB2 | 1:A:91:GLY:HA3 | 20 | 0.11 |
| (1,2378) | 1:A:87:ALA:HB1 | 1:A:91:GLY:HA3 | 20 | 0.11 |
| (1,2378) | 1:A:87:ALA:HB3 | 1:A:91:GLY:HA3 | 20 | 0.11 |
| (1,2324) | 1:A:84:LEU:HB2 | 1:A:88:GLU:HB3 | 20 | 0.11 |
| (1,2313) | 1:A:83:GLY:HA2 | 1:A:85:TYR:HD2 | 2 | 0.11 |
| (1,2313) | 1:A:83:GLY:HA2 | 1:A:85:TYR:HD1 | 2 | 0.11 |
| (1,2313) | 1:A:83:GLY:HA2 | 1:A:85:TYR:HD2 | 3 | 0.11 |
| (1,2313) | 1:A:83:GLY:HA2 | 1:A:85:TYR:HD1 | 3 | 0.11 |
| (1,2313) | 1:A:83:GLY:HA2 | 1:A:85:TYR:HD2 | 14 | 0.11 |
| (1,2313) | 1:A:83:GLY:HA2 | 1:A:85:TYR:HD1 | 14 | 0.11 |
| (1,2285) | 1:A:86:VAL:H | 1:A:82:LEU:HD12 | 17 | 0.11 |
| (1,2285) | 1:A:86:VAL:H | 1:A:82:LEU:HD11 | 17 | 0.11 |
| (1,2285) | 1:A:86:VAL:H | 1:A:82:LEU:HD13 | 17 | 0.11 |
| (1,2265) | 1:A:81:SER:HA | 1:A:84:LEU:HB3 | 13 | 0.11 |
| (1,226) | 1:A:36:ARG:HA | 1:A:36:ARG:HD2 | 4 | 0.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,226) | 1:A:36:ARG:HA | 1:A:36:ARG:HD3 | 4 | 0.11 |
| (1,226) | 1:A:36:ARG:HA | 1:A:36:ARG:HD2 | 12 | 0.11 |
| (1,226) | 1:A:36:ARG:HA | 1:A:36:ARG:HD3 | 12 | 0.11 |
| (1,2251) | 1:A:75:ILE:HG22 | 1:A:79:TYR:HA | 11 | 0.11 |
| (1,2251) | 1:A:75:ILE:HG21 | 1:A:79:TYR:HA | 11 | 0.11 |
| (1,2251) | 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:79:TYR:HA | 11 | 0.11 |
| (1,2251) | 1:A:75:ILE:HG22 | 1:A:79:TYR:HA | 17 | 0.11 |
| (1,2251) | 1:A:75:ILE:HG21 | 1:A:79:TYR:HA | 17 | 0.11 |
| (1,2251) | 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:79:TYR:HA | 17 | 0.11 |
| (1,225) | 1:A:36:ARG:HA | 1:A:89:GLN:HE21 | 6 | 0.11 |
| (1,225) | 1:A:36:ARG:HA | 1:A:89:GLN:HE22 | 6 | 0.11 |
| (1,2240) | 1:A:78:LYS:HB3 | 1:A:75:ILE:HA | 6 | 0.11 |
| (1,2229) | 1:A:75:ILE:HG22 | 1:A:78:LYS:H | 18 | 0.11 |
| (1,2229) | 1:A:75:ILE:HG21 | 1:A:78:LYS:H | 18 | 0.11 |
| (1,2229) | 1:A:75:ILE:HG23 | 1:A:78:LYS:H | 18 | 0.11 |
| (1,2199) | 1:A:77:ASP:HA | 1:A:14:GLU:HA | 8 | 0.11 |
| (1,2128) | 1:A:97:THR:HB | 1:A:94:ASN:HA | 19 | 0.11 |
| (1,2113) | 1:A:67:LEU:HD11 | 1:A:17:TYR:HA | 3 | 0.11 |
| (1,2113) | 1:A:67:LEU:HD12 | 1:A:17:TYR:HA | 3 | 0.11 |
| (1,2113) | 1:A:67:LEU:HD13 | 1:A:17:TYR:HA | 3 | 0.11 |
| (1,2113) | 1:A:67:LEU:HD11 | 1:A:17:TYR:HA | 10 | 0.11 |
| (1,2113) | 1:A:67:LEU:HD12 | 1:A:17:TYR:HA | 10 | 0.11 |
| (1,2113) | 1:A:67:LEU:HD13 | 1:A:17:TYR:HA | 10 | 0.11 |
| (1,2092) | 1:A:66:ILE:HG21 | 1:A:72:LYS:H | 3 | 0.11 |
| (1,2092) | 1:A:66:ILE:HG22 | 1:A:72:LYS:H | 3 | 0.11 |
| (1,2092) | 1:A:66:ILE:HG23 | 1:A:72:LYS:H | 3 | 0.11 |
| (1,2092) | 1:A:66:ILE:HG21 | 1:A:72:LYS:H | 10 | 0.11 |
| (1,2092) | 1:A:66:ILE:HG22 | 1:A:72:LYS:H | 10 | 0.11 |
| (1,2092) | 1:A:66:ILE:HG23 | 1:A:72:LYS:H | 10 | 0.11 |
| (1,2092) | 1:A:66:ILE:HG21 | 1:A:72:LYS:H | 11 | 0.11 |
| (1,2092) | 1:A:66:ILE:HG22 | 1:A:72:LYS:H | 11 | 0.11 |
| (1,2092) | 1:A:66:ILE:HG23 | 1:A:72:LYS:H | 11 | 0.11 |
| (1,2068) | 1:A:66:ILE:HD13 | 1:A:63:ALA:HA | 10 | 0.11 |
| (1,2068) | 1:A:66:ILE:HD11 | 1:A:63:ALA:HA | 10 | 0.11 |
| (1,2068) | 1:A:66:ILE:HD12 | 1:A:63:ALA:HA | 10 | 0.11 |
| (1,206) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:32:LYS:HE3 | 2 | 0.11 |
| (1,206) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:32:LYS:HE2 | 2 | 0.11 |
| (1,2006) | 1:A:78:LYS:HD2 | 1:A:75:ILE:HA | 13 | 0.11 |
| (1,197) | 1:A:31:ILE:HD13 | 1:A:32:LYS:HE3 | 20 | 0.11 |
| (1,197) | 1:A:31:ILE:HD11 | 1:A:32:LYS:HE3 | 20 | 0.11 |
| (1,197) | 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:32:LYS:HE3 | 20 | 0.11 |
| (1,197) | 1:A:31:ILE:HD13 | 1:A:32:LYS:HE2 | 20 | 0.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,197) | 1:A:31:ILE:HD11 | 1:A:32:LYS:HE2 | 20 | 0.11 |
| (1,197) | 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:32:LYS:HE2 | 20 | 0.11 |
| (1,1950) | 1:A:56:LYS:HG2 | 1:A:42:TYR:HE2 | 13 | 0.11 |
| (1,1950) | 1:A:56:LYS:HG2 | 1:A:42:TYR:HE1 | 13 | 0.11 |
| (1,1950) | 1:A:56:LYS:HG2 | 1:A:42:TYR:HE2 | 15 | 0.11 |
| (1,1950) | 1:A:56:LYS:HG2 | 1:A:42:TYR:HE1 | 15 | 0.11 |
| (1,1944) | 1:A:56:LYS:HD3 | 1:A:56:LYS:H | 8 | 0.11 |
| (1,1939) | 1:A:56:LYS:HD2 | 1:A:42:TYR:HD2 | 7 | 0.11 |
| (1,1939) | 1:A:56:LYS:HD2 | 1:A:42:TYR:HD1 | 7 | 0.11 |
| (1,1939) | 1:A:56:LYS:HD2 | 1:A:42:TYR:HD2 | 8 | 0.11 |
| (1,1939) | 1:A:56:LYS:HD2 | 1:A:42:TYR:HD1 | 8 | 0.11 |
| (1,1939) | 1:A:56:LYS:HD2 | 1:A:42:TYR:HD2 | 19 | 0.11 |
| (1,1939) | 1:A:56:LYS:HD2 | 1:A:42:TYR:HD1 | 19 | 0.11 |
| (1,1939) | 1:A:56:LYS:HD2 | 1:A:42:TYR:HD2 | 20 | 0.11 |
| (1,1939) | 1:A:56:LYS:HD2 | 1:A:42:TYR:HD1 | 20 | 0.11 |
| (1,1931) | 1:A:56:LYS:HB3 | 1:A:53:ALA:HA | 6 | 0.11 |
| (1,1883) | 1:A:54:ALA:HB1 | 1:A:57:PHE:HB3 | 6 | 0.11 |
| (1,1883) | 1:A:54:ALA:HB2 | 1:A:57:PHE:HB3 | 6 | 0.11 |
| (1,1883) | 1:A:54:ALA:HB3 | 1:A:57:PHE:HB3 | 6 | 0.11 |
| (1,1868) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:42:TYR:HE2 | 16 | 0.11 |
| (1,1868) | 1:A:53:ALA:HA | 1:A:42:TYR:HE1 | 16 | 0.11 |
| (1,1862) | 1:A:51:PRO:HG2 | 1:A:52:GLU:H | 3 | 0.11 |
| (1,1862) | 1:A:51:PRO:HG2 | 1:A:52:GLU:H | 5 | 0.11 |
| (1,1862) | 1:A:51:PRO:HG2 | 1:A:52:GLU:H | 6 | 0.11 |
| (1,1862) | 1:A:51:PRO:HG2 | 1:A:52:GLU:H | 9 | 0.11 |
| (1,1773) | 1:A:47:ASN:HA | 1:A:46:LYS:HB3 | 2 | 0.11 |
| (1,1773) | 1:A:47:ASN:HA | 1:A:46:LYS:HB3 | 9 | 0.11 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:68:THR:HB | 4 | 0.11 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:68:THR:HB | 4 | 0.11 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:68:THR:HB | 4 | 0.11 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:34:SER:HB3 | 4 | 0.11 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:34:SER:HB3 | 4 | 0.11 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:34:SER:HB3 | 4 | 0.11 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:68:THR:HB | 8 | 0.11 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:68:THR:HB | 8 | 0.11 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:68:THR:HB | 8 | 0.11 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:34:SER:HB3 | 8 | 0.11 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:34:SER:HB3 | 8 | 0.11 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:34:SER:HB3 | 8 | 0.11 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:68:THR:HB | 15 | 0.11 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:68:THR:HB | 15 | 0.11 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:68:THR:HB | 15 | 0.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:34:SER:HB3 | 15 | 0.11 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:34:SER:HB3 | 15 | 0.11 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:34:SER:HB3 | 15 | 0.11 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:68:THR:HB | 16 | 0.11 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:68:THR:HB | 16 | 0.11 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:68:THR:HB | 16 | 0.11 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:34:SER:HB3 | 16 | 0.11 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:34:SER:HB3 | 16 | 0.11 |
| (1,176) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:34:SER:HB3 | 16 | 0.11 |
| (1,1750) | 1:A:46:LYS:HD3 | 1:A:46:LYS:HB2 | 4 | 0.11 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:30:ASP:HB2 | 1 | 0.11 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:30:ASP:HB2 | 1 | 0.11 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:30:ASP:HB2 | 1 | 0.11 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:30:ASP:HB3 | 1 | 0.11 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:30:ASP:HB3 | 1 | 0.11 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:30:ASP:HB3 | 1 | 0.11 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:30:ASP:HB2 | 5 | 0.11 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:30:ASP:HB2 | 5 | 0.11 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:30:ASP:HB2 | 5 | 0.11 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:30:ASP:HB3 | 5 | 0.11 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:30:ASP:HB3 | 5 | 0.11 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:30:ASP:HB3 | 5 | 0.11 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:30:ASP:HB2 | 8 | 0.11 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:30:ASP:HB2 | 8 | 0.11 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:30:ASP:HB2 | 8 | 0.11 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:30:ASP:HB3 | 8 | 0.11 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:30:ASP:HB3 | 8 | 0.11 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:30:ASP:HB3 | 8 | 0.11 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:30:ASP:HB2 | 12 | 0.11 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:30:ASP:HB2 | 12 | 0.11 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:30:ASP:HB2 | 12 | 0.11 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:30:ASP:HB3 | 12 | 0.11 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:30:ASP:HB3 | 12 | 0.11 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:30:ASP:HB3 | 12 | 0.11 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:30:ASP:HB2 | 16 | 0.11 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:30:ASP:HB2 | 16 | 0.11 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:30:ASP:HB2 | 16 | 0.11 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:30:ASP:HB3 | 16 | 0.11 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:30:ASP:HB3 | 16 | 0.11 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:30:ASP:HB3 | 16 | 0.11 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:30:ASP:HB2 | 18 | 0.11 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:30:ASP:HB2 | 18 | 0.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:30:ASP:HB2 | 18 | 0.11 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB3 | 1:A:30:ASP:HB3 | 18 | 0.11 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB1 | 1:A:30:ASP:HB3 | 18 | 0.11 |
| (1,175) | 1:A:26:ALA:HB2 | 1:A:30:ASP:HB3 | 18 | 0.11 |
| (1,1733) | 1:A:99:PHE:HB2 | 1:A:100:VAL:HG13 | 3 | 0.11 |
| (1,1733) | 1:A:99:PHE:HB2 | 1:A:100:VAL:HG11 | 3 | 0.11 |
| (1,1733) | 1:A:99:PHE:HB2 | 1:A:100:VAL:HG12 | 3 | 0.11 |
| (1,1631) | 1:A:37:LYS:HA | 1:A:40:LEU:HD11 | 7 | 0.11 |
| (1,1631) | 1:A:37:LYS:HA | 1:A:40:LEU:HD13 | 7 | 0.11 |
| (1,1631) | 1:A:37:LYS:HA | 1:A:40:LEU:HD12 | 7 | 0.11 |
| (1,1631) | 1:A:37:LYS:HA | 1:A:40:LEU:HD11 | 16 | 0.11 |
| (1,1631) | 1:A:37:LYS:HA | 1:A:40:LEU:HD13 | 16 | 0.11 |
| (1,1631) | 1:A:37:LYS:HA | 1:A:40:LEU:HD12 | 16 | 0.11 |
| (1,1631) | 1:A:37:LYS:HA | 1:A:40:LEU:HD11 | 18 | 0.11 |
| (1,1631) | 1:A:37:LYS:HA | 1:A:40:LEU:HD13 | 18 | 0.11 |
| (1,1631) | 1:A:37:LYS:HA | 1:A:40:LEU:HD12 | 18 | 0.11 |
| (1,1599) | 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:42:TYR:HE2 | 15 | 0.11 |
| (1,1599) | 1:A:38:LEU:HD11 | 1:A:42:TYR:HE1 | 15 | 0.11 |
| (1,1599) | 1:A:38:LEU:HD12 | 1:A:42:TYR:HE2 | 15 | 0.11 |
| (1,1599) | 1:A:38:LEU:HD12 | 1:A:42:TYR:HE1 | 15 | 0.11 |
| (1,1599) | 1:A:38:LEU:HD13 | 1:A:42:TYR:HE2 | 15 | 0.11 |
| (1,1599) | 1:A:38:LEU:HD13 | 1:A:42:TYR:HE1 | 15 | 0.11 |
| (1,1501) | 1:A:32:LYS:HA | 1:A:35:TYR:HB2 | 16 | 0.11 |
| (1,1454) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:32:LYS:HG3 | 9 | 0.11 |
| (1,1450) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:27:THR:HG21 | 13 | 0.11 |
| (1,1450) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:27:THR:HG22 | 13 | 0.11 |
| (1,1450) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:27:THR:HG23 | 13 | 0.11 |
| (1,1427) | 1:A:26:ALA:HA | 1:A:30:ASP:H | 10 | 0.11 |
| (1,138) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:30:ASP:HB3 | 1 | 0.11 |
| (1,138) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:30:ASP:HB3 | 1 | 0.11 |
| (1,138) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:30:ASP:HB3 | 1 | 0.11 |
| (1,138) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:30:ASP:HB2 | 1 | 0.11 |
| (1,138) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:30:ASP:HB2 | 1 | 0.11 |
| (1,138) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:30:ASP:HB2 | 1 | 0.11 |
| (1,138) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:30:ASP:HB3 | 3 | 0.11 |
| (1,138) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:30:ASP:HB3 | 3 | 0.11 |
| (1,138) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:30:ASP:HB3 | 3 | 0.11 |
| (1,138) | 1:A:22:LEU:HD11 | 1:A:30:ASP:HB2 | 3 | 0.11 |
| (1,138) | 1:A:22:LEU:HD12 | 1:A:30:ASP:HB2 | 3 | 0.11 |
| (1,138) | 1:A:22:LEU:HD13 | 1:A:30:ASP:HB2 | 3 | 0.11 |
| (1,1368) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:25:ASN:HD22 | 17 | 0.11 |
| (1,1368) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:25:ASN:HD22 | 17 | 0.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1368) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:25:ASN:HD22 | 17 | 0.11 |
| (1,1332) | 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:67:LEU:HD11 | 11 | 0.11 |
| (1,1332) | 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:67:LEU:HD12 | 11 | 0.11 |
| (1,1332) | 1:A:20:LEU:HD11 | 1:A:67:LEU:HD13 | 11 | 0.11 |
| (1,1332) | 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:67:LEU:HD11 | 11 | 0.11 |
| (1,1332) | 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:67:LEU:HD12 | 11 | 0.11 |
| (1,1332) | 1:A:20:LEU:HD13 | 1:A:67:LEU:HD13 | 11 | 0.11 |
| (1,1332) | 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:67:LEU:HD11 | 11 | 0.11 |
| (1,1332) | 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:67:LEU:HD12 | 11 | 0.11 |
| (1,1332) | 1:A:20:LEU:HD12 | 1:A:67:LEU:HD13 | 11 | 0.11 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD22 | 2 | 0.11 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD21 | 2 | 0.11 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD23 | 2 | 0.11 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:26:ALA:HA | 2 | 0.11 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:26:ALA:HA | 2 | 0.11 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:26:ALA:HA | 2 | 0.11 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD22 | 7 | 0.11 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD21 | 7 | 0.11 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD23 | 7 | 0.11 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:26:ALA:HA | 7 | 0.11 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:26:ALA:HA | 7 | 0.11 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:26:ALA:HA | 7 | 0.11 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD22 | 10 | 0.11 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD21 | 10 | 0.11 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD23 | 10 | 0.11 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:26:ALA:HA | 10 | 0.11 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:26:ALA:HA | 10 | 0.11 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:26:ALA:HA | 10 | 0.11 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD22 | 20 | 0.11 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD21 | 20 | 0.11 |
| (1,133) | 1:A:30:ASP:HA | 1:A:22:LEU:HD23 | 20 | 0.11 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD22 | 1:A:26:ALA:HA | 20 | 0.11 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD21 | 1:A:26:ALA:HA | 20 | 0.11 |
| (1,133) | 1:A:22:LEU:HD23 | 1:A:26:ALA:HA | 20 | 0.11 |
| (1,1308) | 1:A:19:VAL:HG21 | 1:A:60:ILE:H | 15 | 0.11 |
| (1,1308) | 1:A:19:VAL:HG22 | 1:A:60:ILE:H | 15 | 0.11 |
| (1,1308) | 1:A:19:VAL:HG23 | 1:A:60:ILE:H | 15 | 0.11 |
| (1,1280) | 1:A:95:VAL:HG21 | 1:A:90:PHE:HB2 | 19 | 0.11 |
| (1,1280) | 1:A:95:VAL:HG22 | 1:A:90:PHE:HB2 | 19 | 0.11 |
| (1,1280) | 1:A:95:VAL:HG23 | 1:A:90:PHE:HB2 | 19 | 0.11 |
| (1,1280) | 1:A:95:VAL:HG21 | 1:A:90:PHE:HB2 | 20 | 0.11 |
| (1,1280) | 1:A:95:VAL:HG22 | 1:A:90:PHE:HB2 | 20 | 0.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,1280) | 1:A:95:VAL:HG23 | 1:A:90:PHE:HB2 | 20 | 0.11 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG21 | 1:A:26:ALA:HA | 4 | 0.11 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG22 | 1:A:26:ALA:HA | 4 | 0.11 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG23 | 1:A:26:ALA:HA | 4 | 0.11 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG21 | 1:A:26:ALA:HA | 15 | 0.11 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG22 | 1:A:26:ALA:HA | 15 | 0.11 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG23 | 1:A:26:ALA:HA | 15 | 0.11 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG21 | 1:A:26:ALA:HA | 18 | 0.11 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG22 | 1:A:26:ALA:HA | 18 | 0.11 |
| (1,1271) | 1:A:27:THR:HG23 | 1:A:26:ALA:HA | 18 | 0.11 |
| (1,1266) | 1:A:95:VAL:HG21 | 1:A:94:ASN:HA | 2 | 0.11 |
| (1,1266) | 1:A:95:VAL:HG22 | 1:A:94:ASN:HA | 2 | 0.11 |
| (1,1266) | 1:A:95:VAL:HG23 | 1:A:94:ASN:HA | 2 | 0.11 |
| (1,1266) | 1:A:95:VAL:HG21 | 1:A:94:ASN:HA | 3 | 0.11 |
| (1,1266) | 1:A:95:VAL:HG22 | 1:A:94:ASN:HA | 3 | 0.11 |
| (1,1266) | 1:A:95:VAL:HG23 | 1:A:94:ASN:HA | 3 | 0.11 |
| (1,1266) | 1:A:95:VAL:HG21 | 1:A:94:ASN:HA | 5 | 0.11 |
| (1,1266) | 1:A:95:VAL:HG22 | 1:A:94:ASN:HA | 5 | 0.11 |
| (1,1266) | 1:A:95:VAL:HG23 | 1:A:94:ASN:HA | 5 | 0.11 |
| (1,1255) | 1:A:44:PRO:HB3 | 1:A:45:ASP:H | 17 | 0.11 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG12 | 1:A:82:LEU:HA | 4 | 0.11 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG11 | 1:A:82:LEU:HA | 4 | 0.11 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG13 | 1:A:82:LEU:HA | 4 | 0.11 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG12 | 1:A:85:TYR:HA | 4 | 0.11 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG11 | 1:A:85:TYR:HA | 4 | 0.11 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG13 | 1:A:85:TYR:HA | 4 | 0.11 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG12 | 1:A:82:LEU:HA | 13 | 0.11 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG11 | 1:A:82:LEU:HA | 13 | 0.11 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG13 | 1:A:82:LEU:HA | 13 | 0.11 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG12 | 1:A:85:TYR:HA | 13 | 0.11 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG11 | 1:A:85:TYR:HA | 13 | 0.11 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG13 | 1:A:85:TYR:HA | 13 | 0.11 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG12 | 1:A:82:LEU:HA | 15 | 0.11 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG11 | 1:A:82:LEU:HA | 15 | 0.11 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG13 | 1:A:82:LEU:HA | 15 | 0.11 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG12 | 1:A:85:TYR:HA | 15 | 0.11 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG11 | 1:A:85:TYR:HA | 15 | 0.11 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG13 | 1:A:85:TYR:HA | 15 | 0.11 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG12 | 1:A:82:LEU:HA | 17 | 0.11 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG11 | 1:A:82:LEU:HA | 17 | 0.11 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG13 | 1:A:82:LEU:HA | 17 | 0.11 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG12 | 1:A:85:TYR:HA | 17 | 0.11 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---|---|---|---|---|
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG11 | 1:A:85:TYR:HA | 17 | 0.11 |
| (1,124) | 1:A:86:VAL:HG13 | 1:A:85:TYR:HA | 17 | 0.11 |
| (1,1189) | 1:A:16:LEU:HD11 | 1:A:63:ALA:HA | 1 | 0.11 |
| (1,1189) | 1:A:16:LEU:HD13 | 1:A:63:ALA:HA | 1 | 0.11 |
| (1,1189) | 1:A:16:LEU:HD12 | 1:A:63:ALA:HA | 1 | 0.11 |
| (1,1187) | 1:A:16:LEU:HD11 | 1:A:19:VAL:HB | 19 | 0.11 |
| (1,1187) | 1:A:16:LEU:HD13 | 1:A:19:VAL:HB | 19 | 0.11 |
| (1,1187) | 1:A:16:LEU:HD12 | 1:A:19:VAL:HB | 19 | 0.11 |
| (1,1170) | 1:A:16:LEU:HA | 1:A:63:ALA:HA | 2 | 0.11 |
| (1,114) | 1:A:19:VAL:H | 1:A:19:VAL:HG12 | 20 | 0.11 |
| (1,114) | 1:A:19:VAL:H | 1:A:19:VAL:HG11 | 20 | 0.11 |
| (1,114) | 1:A:19:VAL:H | 1:A:19:VAL:HG13 | 20 | 0.11 |
| (1,114) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:19:VAL:HG12 | 20 | 0.11 |
| (1,114) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:19:VAL:HG11 | 20 | 0.11 |
| (1,114) | 1:A:63:ALA:H | 1:A:19:VAL:HG13 | 20 | 0.11 |
| (1,1115) | 1:A:13:GLY:HA2 | 1:A:14:GLU:HA | 2 | 0.11 |
| (1,1115) | 1:A:13:GLY:HA2 | 1:A:14:GLU:HA | 3 | 0.11 |
| (1,1115) | 1:A:13:GLY:HA2 | 1:A:14:GLU:HA | 6 | 0.11 |
| (1,1115) | 1:A:13:GLY:HA2 | 1:A:14:GLU:HA | 12 | 0.11 |
| (1,1115) | 1:A:13:GLY:HA2 | 1:A:14:GLU:HA | 15 | 0.11 |
| (1,1069) | 1:A:42:TYR:HA | 1:A:42:TYR:HD2 | 20 | 0.11 |
| (1,1069) | 1:A:42:TYR:HA | 1:A:42:TYR:HD1 | 20 | 0.11 |

# 10 Dihedral-angle violation analysis (i)

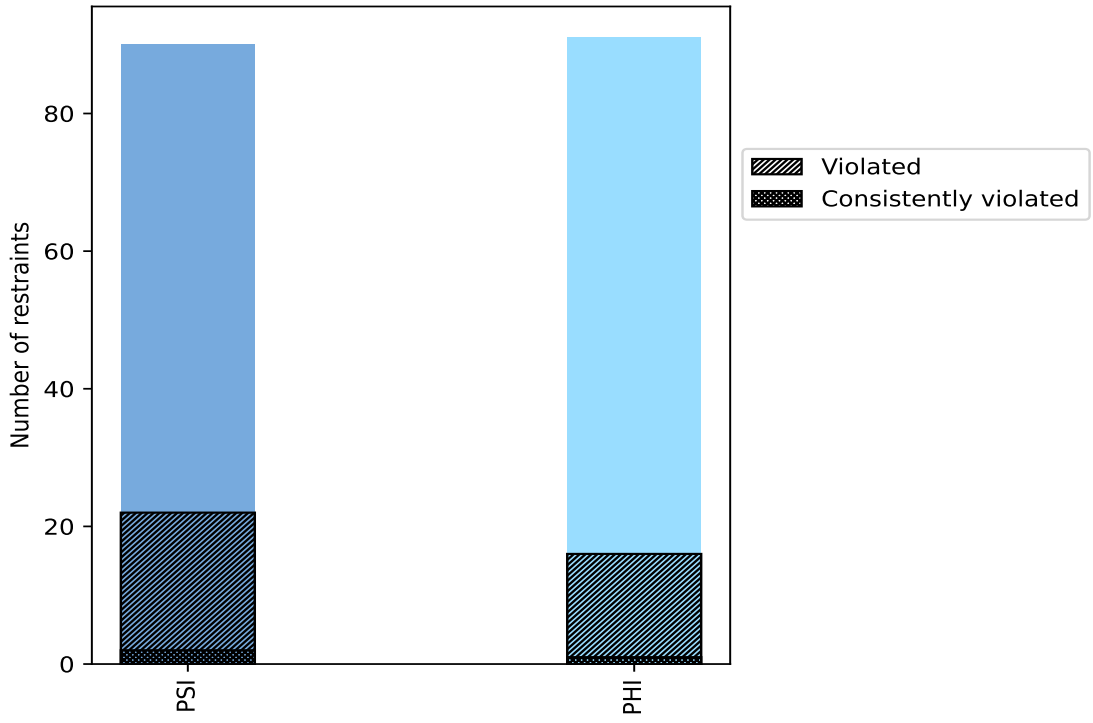
## 10.1 Summary of dihedral-angle violations (i)

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

| Angle type | Count | %[1] | Violated[3] | | | Consistently Violated[4] | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | Count | %[2] | %[1] | Count | %[2] | %[1] |
| PSI | 90 | 49.7 | 22 | 24.4 | 12.2 | 2 | 2.2 | 1.1 |
| PHI | 91 | 50.3 | 16 | 17.6 | 8.8 | 1 | 1.1 | 0.6 |
| Total | 181 | 100.0 | 38 | 21.0 | 21.0 | 3 | 1.7 | 1.7 |

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

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



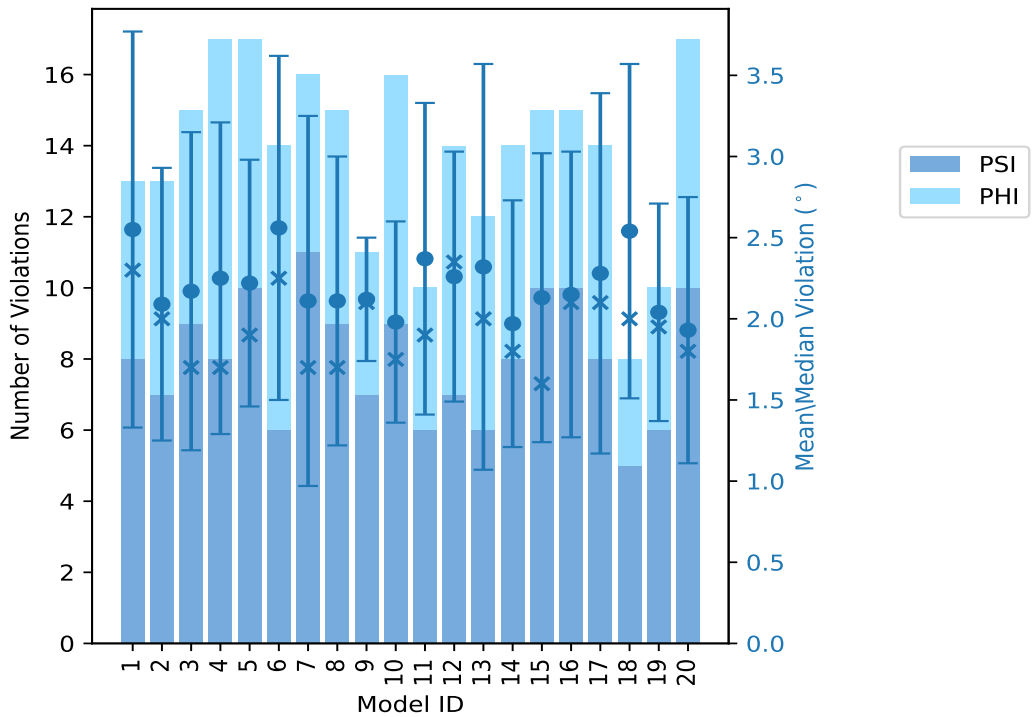

Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories

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

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

| Model ID | Number of violations | | | Mean (°) | Max (°) | SD (°) | Median (°) |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | PSI | PHI | Total | | | | |
| 1 | 8 | 5 | 13 | 2.55 | 4.9 | 1.22 | 2.3 |
| 2 | 7 | 6 | 13 | 2.09 | 4.0 | 0.84 | 2.0 |
| 3 | 9 | 6 | 15 | 2.17 | 4.3 | 0.98 | 1.7 |
| 4 | 8 | 9 | 17 | 2.25 | 4.3 | 0.96 | 1.7 |
| 5 | 10 | 7 | 17 | 2.22 | 4.3 | 0.76 | 1.9 |
| 6 | 6 | 8 | 14 | 2.56 | 5.5 | 1.06 | 2.25 |
| 7 | 11 | 5 | 16 | 2.11 | 5.4 | 1.14 | 1.7 |
| 8 | 9 | 6 | 15 | 2.11 | 4.3 | 0.89 | 1.7 |
| 9 | 7 | 4 | 11 | 2.12 | 3.0 | 0.38 | 2.1 |
| 10 | 9 | 7 | 16 | 1.98 | 3.1 | 0.62 | 1.75 |
| 11 | 6 | 4 | 10 | 2.37 | 4.2 | 0.96 | 1.9 |
| 12 | 7 | 7 | 14 | 2.26 | 3.7 | 0.77 | 2.35 |
| 13 | 6 | 6 | 12 | 2.32 | 5.6 | 1.25 | 2.0 |
| 14 | 8 | 6 | 14 | 1.97 | 3.7 | 0.76 | 1.8 |
| 15 | 10 | 5 | 15 | 2.13 | 4.1 | 0.89 | 1.6 |
| 16 | 10 | 5 | 15 | 2.15 | 3.9 | 0.88 | 2.1 |
| 17 | 8 | 6 | 14 | 2.28 | 5.0 | 1.11 | 2.1 |
| 18 | 5 | 3 | 8 | 2.54 | 4.0 | 1.03 | 2.0 |
| 19 | 6 | 4 | 10 | 2.04 | 3.8 | 0.67 | 1.95 |
| 20 | 10 | 7 | 17 | 1.93 | 4.3 | 0.82 | 1.8 |

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




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

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

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

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

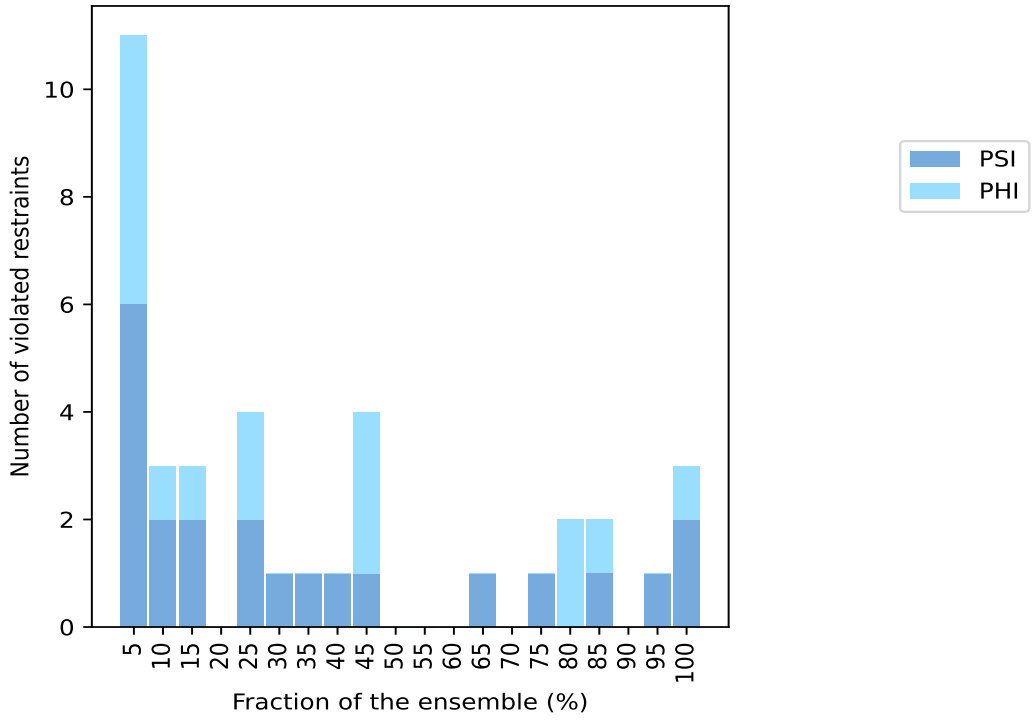
*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

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

[1] Number of models with violations

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

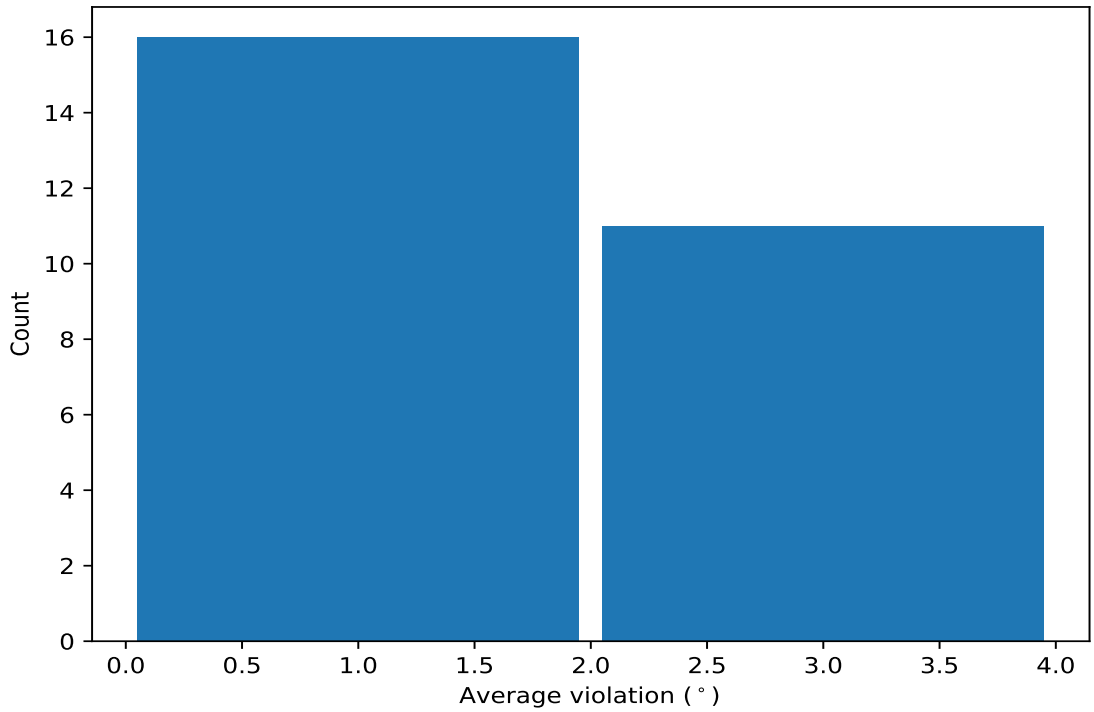



## 10.4 Most violated dihedral-angle restraints in the ensemble (i)

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

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

in the ensemble




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

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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Models[1] | Mean | SD[2] | Median |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,16) | 1:A:9:LEU:N | 1:A:9:LEU:CA | 1:A:9:LEU:C | 1:A:10:SEP:N | 20 | 3.41 | 0.87 | 3.75 |
| (1,26) | 1:A:15:SER:N | 1:A:15:SER:CA | 1:A:15:SER:C | 1:A:16:LEU:N | 20 | 2.89 | 1.13 | 2.7 |
| (1,35) | 1:A:19:VAL:C | 1:A:20:LEU:N | 1:A:20:LEU:CA | 1:A:20:LEU:C | 20 | 2.18 | 0.53 | 2.2 |
| (1,50) | 1:A:28:SER:N | 1:A:28:SER:CA | 1:A:28:SER:C | 1:A:29:ASP:N | 19 | 2.98 | 0.8 | 2.9 |
| (1,44) | 1:A:24:LYS:N | 1:A:24:LYS:CA | 1:A:24:LYS:C | 1:A:25:ASN:N | 17 | 2.24 | 0.97 | 2.0 |
| (1,69) | 1:A:37:LYS:C | 1:A:38:LEU:N | 1:A:38:LEU:CA | 1:A:38:LEU:C | 17 | 2.19 | 0.54 | 2.1 |
| (1,118) | 1:A:64:HIS:C | 1:A:65:ALA:N | 1:A:65:ALA:CA | 1:A:65:ALA:C | 16 | 1.83 | 0.59 | 1.65 |
| (1,172) | 1:A:93:GLU:C | 1:A:94:ASN:N | 1:A:94:ASN:CA | 1:A:94:ASN:C | 16 | 1.79 | 0.57 | 1.65 |
| (1,167) | 1:A:90:PHE:N | 1:A:90:PHE:CA | 1:A:90:PHE:C | 1:A:91:GLY:N | 15 | 1.71 | 0.44 | 1.6 |
| (1,88) | 1:A:48:PRO:N | 1:A:48:PRO:CA | 1:A:48:PRO:C | 1:A:49:ASP:N | 13 | 1.68 | 0.37 | 1.6 |
| (1,15) | 1:A:7:ARG:C | 1:A:8:SER:N | 1:A:8:SER:CA | 1:A:8:SER:C | 9 | 3.1 | 1.01 | 3.4 |
| (1,48) | 1:A:27:THR:N | 1:A:27:THR:CA | 1:A:27:THR:C | 1:A:28:SER:N | 9 | 1.79 | 0.38 | 1.8 |
| (1,146) | 1:A:78:LYS:C | 1:A:79:TYR:N | 1:A:79:TYR:CA | 1:A:79:TYR:C | 9 | 1.72 | 0.6 | 1.5 |
| (1,159) | 1:A:85:TYR:C | 1:A:86:VAL:N | 1:A:86:VAL:CA | 1:A:86:VAL:C | 9 | 1.39 | 0.2 | 1.4 |
| (1,20) | 1:A:12:SER:N | 1:A:12:SER:CA | 1:A:12:SER:C | 1:A:13:GLY:N | 8 | 2.35 | 1.12 | 2.05 |
| (1,42) | 1:A:23:ASP:N | 1:A:23:ASP:CA | 1:A:23:ASP:C | 1:A:24:LYS:N | 7 | 1.6 | 0.58 | 1.3 |
| (1,145) | 1:A:78:LYS:N | 1:A:78:LYS:CA | 1:A:78:LYS:C | 1:A:79:TYR:N | 6 | 1.62 | 0.46 | 1.5 |
| (1,75) | 1:A:40:LEU:C | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 5 | 2.72 | 1.07 | 2.1 |
| (1,74) | 1:A:40:LEU:N | 1:A:40:LEU:CA | 1:A:40:LEU:C | 1:A:41:LYS:N | 5 | 1.94 | 0.44 | 2.1 |
| (1,18) | 1:A:10:SEP:N | 1:A:10:SEP:CA | 1:A:10:SEP:C | 1:A:11:THR:N | 5 | 1.72 | 0.56 | 1.4 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

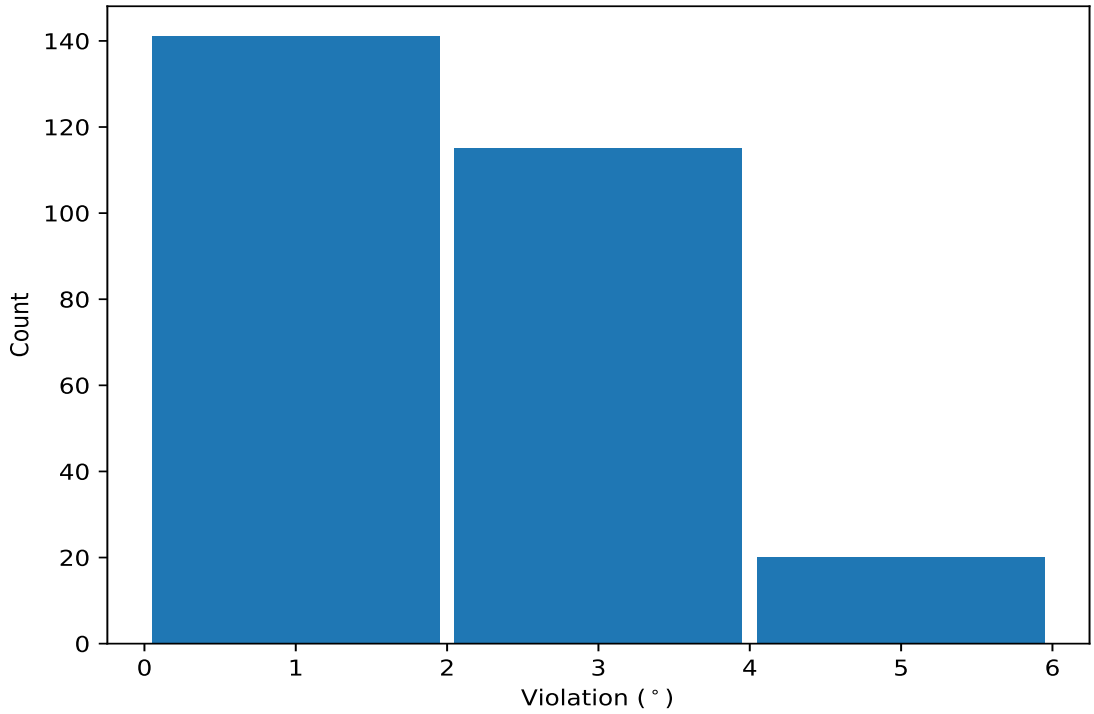
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Models[1] | Mean | SD[2] | Median |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,144) | 1:A:77:ASP:C | 1:A:78:LYS:N | 1:A:78:LYS:CA | 1:A:78:LYS:C | 5 | 1.48 | 0.42 | 1.2 |
| (1,181) | 1:A:98:TYR:N | 1:A:98:TYR:CA | 1:A:98:TYR:C | 1:A:99:PHE:N | 3 | 3.1 | 1.71 | 2.6 |
| (1,27) | 1:A:15:SER:C | 1:A:16:LEU:N | 1:A:16:LEU:CA | 1:A:16:LEU:C | 3 | 2.1 | 0.41 | 2.1 |
| (1,76) | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 1:A:42:TYR:N | 3 | 1.47 | 0.17 | 1.4 |
| (1,147) | 1:A:79:TYR:N | 1:A:79:TYR:CA | 1:A:79:TYR:C | 1:A:80:GLY:N | 2 | 1.9 | 0.4 | 1.9 |
| (1,68) | 1:A:37:LYS:N | 1:A:37:LYS:CA | 1:A:37:LYS:C | 1:A:38:LEU:N | 2 | 1.85 | 0.15 | 1.85 |
| (1,174) | 1:A:94:ASN:C | 1:A:95:VAL:N | 1:A:95:VAL:CA | 1:A:95:VAL:C | 2 | 1.45 | 0.35 | 1.45 |

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

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

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

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




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

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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,26) | 1:A:15:SER:N | 1:A:15:SER:CA | 1:A:15:SER:C | 1:A:16:LEU:N | 13 | 5.6 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,26) | 1:A:15:SER:N | 1:A:15:SER:CA | 1:A:15:SER:C | 1:A:16:LEU:N | 6 | 5.5 |
| (1,181) | 1:A:98:TYR:N | 1:A:98:TYR:CA | 1:A:98:TYR:C | 1:A:99:PHE:N | 7 | 5.4 |
| (1,20) | 1:A:12:SER:N | 1:A:12:SER:CA | 1:A:12:SER:C | 1:A:13:GLY:N | 17 | 5.0 |
| (1,44) | 1:A:24:LYS:N | 1:A:24:LYS:CA | 1:A:24:LYS:C | 1:A:25:ASN:N | 1 | 4.9 |
| (1,15) | 1:A:7:ARG:C | 1:A:8:SER:N | 1:A:8:SER:CA | 1:A:8:SER:C | 1 | 4.6 |
| (1,75) | 1:A:40:LEU:C | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 3 | 4.3 |
| (1,50) | 1:A:28:SER:N | 1:A:28:SER:CA | 1:A:28:SER:C | 1:A:29:ASP:N | 8 | 4.3 |
| (1,26) | 1:A:15:SER:N | 1:A:15:SER:CA | 1:A:15:SER:C | 1:A:16:LEU:N | 4 | 4.3 |
| (1,16) | 1:A:9:LEU:N | 1:A:9:LEU:CA | 1:A:9:LEU:C | 1:A:10:SEP:N | 4 | 4.3 |
| (1,16) | 1:A:9:LEU:N | 1:A:9:LEU:CA | 1:A:9:LEU:C | 1:A:10:SEP:N | 5 | 4.3 |
| (1,16) | 1:A:9:LEU:N | 1:A:9:LEU:CA | 1:A:9:LEU:C | 1:A:10:SEP:N | 20 | 4.3 |
| (1,44) | 1:A:24:LYS:N | 1:A:24:LYS:CA | 1:A:24:LYS:C | 1:A:25:ASN:N | 11 | 4.2 |
| (1,50) | 1:A:28:SER:N | 1:A:28:SER:CA | 1:A:28:SER:C | 1:A:29:ASP:N | 1 | 4.1 |
| (1,50) | 1:A:28:SER:N | 1:A:28:SER:CA | 1:A:28:SER:C | 1:A:29:ASP:N | 15 | 4.1 |
| (1,16) | 1:A:9:LEU:N | 1:A:9:LEU:CA | 1:A:9:LEU:C | 1:A:10:SEP:N | 8 | 4.1 |
| (1,16) | 1:A:9:LEU:N | 1:A:9:LEU:CA | 1:A:9:LEU:C | 1:A:10:SEP:N | 13 | 4.1 |
| (1,16) | 1:A:9:LEU:N | 1:A:9:LEU:CA | 1:A:9:LEU:C | 1:A:10:SEP:N | 2 | 4.0 |
| (1,16) | 1:A:9:LEU:N | 1:A:9:LEU:CA | 1:A:9:LEU:C | 1:A:10:SEP:N | 17 | 4.0 |
| (1,16) | 1:A:9:LEU:N | 1:A:9:LEU:CA | 1:A:9:LEU:C | 1:A:10:SEP:N | 18 | 4.0 |
| (1,26) | 1:A:15:SER:N | 1:A:15:SER:CA | 1:A:15:SER:C | 1:A:16:LEU:N | 3 | 3.9 |
| (1,16) | 1:A:9:LEU:N | 1:A:9:LEU:CA | 1:A:9:LEU:C | 1:A:10:SEP:N | 11 | 3.9 |
| (1,16) | 1:A:9:LEU:N | 1:A:9:LEU:CA | 1:A:9:LEU:C | 1:A:10:SEP:N | 16 | 3.9 |
| (1,50) | 1:A:28:SER:N | 1:A:28:SER:CA | 1:A:28:SER:C | 1:A:29:ASP:N | 18 | 3.8 |
| (1,15) | 1:A:7:ARG:C | 1:A:8:SER:N | 1:A:8:SER:CA | 1:A:8:SER:C | 19 | 3.8 |
| (1,75) | 1:A:40:LEU:C | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 18 | 3.7 |
| (1,50) | 1:A:28:SER:N | 1:A:28:SER:CA | 1:A:28:SER:C | 1:A:29:ASP:N | 16 | 3.7 |
| (1,15) | 1:A:7:ARG:C | 1:A:8:SER:N | 1:A:8:SER:CA | 1:A:8:SER:C | 12 | 3.7 |
| (1,15) | 1:A:7:ARG:C | 1:A:8:SER:N | 1:A:8:SER:CA | 1:A:8:SER:C | 14 | 3.7 |
| (1,50) | 1:A:28:SER:N | 1:A:28:SER:CA | 1:A:28:SER:C | 1:A:29:ASP:N | 7 | 3.6 |
| (1,16) | 1:A:9:LEU:N | 1:A:9:LEU:CA | 1:A:9:LEU:C | 1:A:10:SEP:N | 6 | 3.6 |
| (1,16) | 1:A:9:LEU:N | 1:A:9:LEU:CA | 1:A:9:LEU:C | 1:A:10:SEP:N | 3 | 3.5 |
| (1,16) | 1:A:9:LEU:N | 1:A:9:LEU:CA | 1:A:9:LEU:C | 1:A:10:SEP:N | 1 | 3.4 |
| (1,15) | 1:A:7:ARG:C | 1:A:8:SER:N | 1:A:8:SER:CA | 1:A:8:SER:C | 15 | 3.4 |
| (1,69) | 1:A:37:LYS:C | 1:A:38:LEU:N | 1:A:38:LEU:CA | 1:A:38:LEU:C | 2 | 3.2 |
| (1,50) | 1:A:28:SER:N | 1:A:28:SER:CA | 1:A:28:SER:C | 1:A:29:ASP:N | 14 | 3.2 |
| (1,26) | 1:A:15:SER:N | 1:A:15:SER:CA | 1:A:15:SER:C | 1:A:16:LEU:N | 2 | 3.2 |
| (1,26) | 1:A:15:SER:N | 1:A:15:SER:CA | 1:A:15:SER:C | 1:A:16:LEU:N | 5 | 3.2 |
| (1,26) | 1:A:15:SER:N | 1:A:15:SER:CA | 1:A:15:SER:C | 1:A:16:LEU:N | 7 | 3.2 |
| (1,172) | 1:A:93:GLU:C | 1:A:94:ASN:N | 1:A:94:ASN:CA | 1:A:94:ASN:C | 6 | 3.2 |
| (1,16) | 1:A:9:LEU:N | 1:A:9:LEU:CA | 1:A:9:LEU:C | 1:A:10:SEP:N | 7 | 3.2 |
| (1,35) | 1:A:19:VAL:C | 1:A:20:LEU:N | 1:A:20:LEU:CA | 1:A:20:LEU:C | 10 | 3.1 |
| (1,35) | 1:A:19:VAL:C | 1:A:20:LEU:N | 1:A:20:LEU:CA | 1:A:20:LEU:C | 12 | 3.1 |
| (1,16) | 1:A:9:LEU:N | 1:A:9:LEU:CA | 1:A:9:LEU:C | 1:A:10:SEP:N | 15 | 3.1 |
| (1,15) | 1:A:7:ARG:C | 1:A:8:SER:N | 1:A:8:SER:CA | 1:A:8:SER:C | 16 | 3.1 |
| (1,118) | 1:A:64:HIS:C | 1:A:65:ALA:N | 1:A:65:ALA:CA | 1:A:65:ALA:C | 6 | 3.1 |
| (1,50) | 1:A:28:SER:N | 1:A:28:SER:CA | 1:A:28:SER:C | 1:A:29:ASP:N | 5 | 3.0 |
| (1,35) | 1:A:19:VAL:C | 1:A:20:LEU:N | 1:A:20:LEU:CA | 1:A:20:LEU:C | 9 | 3.0 |
| (1,16) | 1:A:9:LEU:N | 1:A:9:LEU:CA | 1:A:9:LEU:C | 1:A:10:SEP:N | 12 | 3.0 |
| (1,146) | 1:A:78:LYS:C | 1:A:79:TYR:N | 1:A:79:TYR:CA | 1:A:79:TYR:C | 16 | 3.0 |
| (1,118) | 1:A:64:HIS:C | 1:A:65:ALA:N | 1:A:65:ALA:CA | 1:A:65:ALA:C | 4 | 3.0 |
| (1,69) | 1:A:37:LYS:C | 1:A:38:LEU:N | 1:A:38:LEU:CA | 1:A:38:LEU:C | 11 | 2.9 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,50) | 1:A:28:SER:N | 1:A:28:SER:CA | 1:A:28:SER:C | 1:A:29:ASP:N | 4 | 2.9 |
| (1,50) | 1:A:28:SER:N | 1:A:28:SER:CA | 1:A:28:SER:C | 1:A:29:ASP:N | 12 | 2.9 |
| (1,50) | 1:A:28:SER:N | 1:A:28:SER:CA | 1:A:28:SER:C | 1:A:29:ASP:N | 17 | 2.9 |
| (1,35) | 1:A:19:VAL:C | 1:A:20:LEU:N | 1:A:20:LEU:CA | 1:A:20:LEU:C | 20 | 2.9 |
| (1,172) | 1:A:93:GLU:C | 1:A:94:ASN:N | 1:A:94:ASN:CA | 1:A:94:ASN:C | 15 | 2.9 |
| (1,167) | 1:A:90:PHE:N | 1:A:90:PHE:CA | 1:A:90:PHE:C | 1:A:91:GLY:N | 6 | 2.9 |
| (1,69) | 1:A:37:LYS:C | 1:A:38:LEU:N | 1:A:38:LEU:CA | 1:A:38:LEU:C | 10 | 2.8 |
| (1,69) | 1:A:37:LYS:C | 1:A:38:LEU:N | 1:A:38:LEU:CA | 1:A:38:LEU:C | 12 | 2.8 |
| (1,50) | 1:A:28:SER:N | 1:A:28:SER:CA | 1:A:28:SER:C | 1:A:29:ASP:N | 3 | 2.8 |
| (1,50) | 1:A:28:SER:N | 1:A:28:SER:CA | 1:A:28:SER:C | 1:A:29:ASP:N | 20 | 2.8 |
| (1,44) | 1:A:24:LYS:N | 1:A:24:LYS:CA | 1:A:24:LYS:C | 1:A:25:ASN:N | 4 | 2.8 |
| (1,44) | 1:A:24:LYS:N | 1:A:24:LYS:CA | 1:A:24:LYS:C | 1:A:25:ASN:N | 10 | 2.8 |
| (1,26) | 1:A:15:SER:N | 1:A:15:SER:CA | 1:A:15:SER:C | 1:A:16:LEU:N | 17 | 2.8 |
| (1,50) | 1:A:28:SER:N | 1:A:28:SER:CA | 1:A:28:SER:C | 1:A:29:ASP:N | 6 | 2.7 |
| (1,26) | 1:A:15:SER:N | 1:A:15:SER:CA | 1:A:15:SER:C | 1:A:16:LEU:N | 8 | 2.7 |
| (1,26) | 1:A:15:SER:N | 1:A:15:SER:CA | 1:A:15:SER:C | 1:A:16:LEU:N | 12 | 2.7 |
| (1,26) | 1:A:15:SER:N | 1:A:15:SER:CA | 1:A:15:SER:C | 1:A:16:LEU:N | 14 | 2.7 |
| (1,20) | 1:A:12:SER:N | 1:A:12:SER:CA | 1:A:12:SER:C | 1:A:13:GLY:N | 10 | 2.7 |
| (1,69) | 1:A:37:LYS:C | 1:A:38:LEU:N | 1:A:38:LEU:CA | 1:A:38:LEU:C | 17 | 2.6 |
| (1,50) | 1:A:28:SER:N | 1:A:28:SER:CA | 1:A:28:SER:C | 1:A:29:ASP:N | 11 | 2.6 |
| (1,44) | 1:A:24:LYS:N | 1:A:24:LYS:CA | 1:A:24:LYS:C | 1:A:25:ASN:N | 5 | 2.6 |
| (1,42) | 1:A:23:ASP:N | 1:A:23:ASP:CA | 1:A:23:ASP:C | 1:A:24:LYS:N | 5 | 2.6 |
| (1,35) | 1:A:19:VAL:C | 1:A:20:LEU:N | 1:A:20:LEU:CA | 1:A:20:LEU:C | 17 | 2.6 |
| (1,27) | 1:A:15:SER:C | 1:A:16:LEU:N | 1:A:16:LEU:CA | 1:A:16:LEU:C | 13 | 2.6 |
| (1,20) | 1:A:12:SER:N | 1:A:12:SER:CA | 1:A:12:SER:C | 1:A:13:GLY:N | 4 | 2.6 |
| (1,181) | 1:A:98:TYR:N | 1:A:98:TYR:CA | 1:A:98:TYR:C | 1:A:99:PHE:N | 15 | 2.6 |
| (1,15) | 1:A:7:ARG:C | 1:A:8:SER:N | 1:A:8:SER:CA | 1:A:8:SER:C | 4 | 2.6 |
| (1,69) | 1:A:37:LYS:C | 1:A:38:LEU:N | 1:A:38:LEU:CA | 1:A:38:LEU:C | 4 | 2.5 |
| (1,26) | 1:A:15:SER:N | 1:A:15:SER:CA | 1:A:15:SER:C | 1:A:16:LEU:N | 10 | 2.5 |
| (1,26) | 1:A:15:SER:N | 1:A:15:SER:CA | 1:A:15:SER:C | 1:A:16:LEU:N | 19 | 2.5 |
| (1,172) | 1:A:93:GLU:C | 1:A:94:ASN:N | 1:A:94:ASN:CA | 1:A:94:ASN:C | 3 | 2.5 |
| (1,146) | 1:A:78:LYS:C | 1:A:79:TYR:N | 1:A:79:TYR:CA | 1:A:79:TYR:C | 5 | 2.5 |
| (1,145) | 1:A:78:LYS:N | 1:A:78:LYS:CA | 1:A:78:LYS:C | 1:A:79:TYR:N | 5 | 2.5 |
| (1,88) | 1:A:48:PRO:N | 1:A:48:PRO:CA | 1:A:48:PRO:C | 1:A:49:ASP:N | 6 | 2.4 |
| (1,74) | 1:A:40:LEU:N | 1:A:40:LEU:CA | 1:A:40:LEU:C | 1:A:41:LYS:N | 16 | 2.4 |
| (1,48) | 1:A:27:THR:N | 1:A:27:THR:CA | 1:A:27:THR:C | 1:A:28:SER:N | 15 | 2.4 |
| (1,42) | 1:A:23:ASP:N | 1:A:23:ASP:CA | 1:A:23:ASP:C | 1:A:24:LYS:N | 10 | 2.4 |
| (1,20) | 1:A:12:SER:N | 1:A:12:SER:CA | 1:A:12:SER:C | 1:A:13:GLY:N | 1 | 2.4 |
| (1,18) | 1:A:10:SEP:N | 1:A:10:SEP:CA | 1:A:10:SEP:C | 1:A:11:THR:N | 9 | 2.4 |
| (1,18) | 1:A:10:SEP:N | 1:A:10:SEP:CA | 1:A:10:SEP:C | 1:A:11:THR:N | 12 | 2.4 |
| (1,118) | 1:A:64:HIS:C | 1:A:65:ALA:N | 1:A:65:ALA:CA | 1:A:65:ALA:C | 20 | 2.4 |
| (1,74) | 1:A:40:LEU:N | 1:A:40:LEU:CA | 1:A:40:LEU:C | 1:A:41:LYS:N | 1 | 2.3 |
| (1,69) | 1:A:37:LYS:C | 1:A:38:LEU:N | 1:A:38:LEU:CA | 1:A:38:LEU:C | 13 | 2.3 |
| (1,44) | 1:A:24:LYS:N | 1:A:24:LYS:CA | 1:A:24:LYS:C | 1:A:25:ASN:N | 20 | 2.3 |
| (1,35) | 1:A:19:VAL:C | 1:A:20:LEU:N | 1:A:20:LEU:CA | 1:A:20:LEU:C | 1 | 2.3 |
| (1,35) | 1:A:19:VAL:C | 1:A:20:LEU:N | 1:A:20:LEU:CA | 1:A:20:LEU:C | 7 | 2.3 |
| (1,35) | 1:A:19:VAL:C | 1:A:20:LEU:N | 1:A:20:LEU:CA | 1:A:20:LEU:C | 8 | 2.3 |
| (1,167) | 1:A:90:PHE:N | 1:A:90:PHE:CA | 1:A:90:PHE:C | 1:A:91:GLY:N | 12 | 2.3 |
| (1,147) | 1:A:79:TYR:N | 1:A:79:TYR:CA | 1:A:79:TYR:C | 1:A:80:GLY:N | 9 | 2.3 |
| (1,69) | 1:A:37:LYS:C | 1:A:38:LEU:N | 1:A:38:LEU:CA | 1:A:38:LEU:C | 15 | 2.2 |
| (1,50) | 1:A:28:SER:N | 1:A:28:SER:CA | 1:A:28:SER:C | 1:A:29:ASP:N | 2 | 2.2 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,48) | 1:A:27:THR:N | 1:A:27:THR:CA | 1:A:27:THR:C | 1:A:28:SER:N | 20 | 2.2 |
| (1,35) | 1:A:19:VAL:C | 1:A:20:LEU:N | 1:A:20:LEU:CA | 1:A:20:LEU:C | 3 | 2.2 |
| (1,35) | 1:A:19:VAL:C | 1:A:20:LEU:N | 1:A:20:LEU:CA | 1:A:20:LEU:C | 14 | 2.2 |
| (1,35) | 1:A:19:VAL:C | 1:A:20:LEU:N | 1:A:20:LEU:CA | 1:A:20:LEU:C | 16 | 2.2 |
| (1,16) | 1:A:9:LEU:N | 1:A:9:LEU:CA | 1:A:9:LEU:C | 1:A:10:SEP:N | 9 | 2.2 |
| (1,144) | 1:A:77:ASP:C | 1:A:78:LYS:N | 1:A:78:LYS:CA | 1:A:78:LYS:C | 14 | 2.2 |
| (1,118) | 1:A:64:HIS:C | 1:A:65:ALA:N | 1:A:65:ALA:CA | 1:A:65:ALA:C | 16 | 2.2 |
| (1,88) | 1:A:48:PRO:N | 1:A:48:PRO:CA | 1:A:48:PRO:C | 1:A:49:ASP:N | 17 | 2.1 |
| (1,88) | 1:A:48:PRO:N | 1:A:48:PRO:CA | 1:A:48:PRO:C | 1:A:49:ASP:N | 20 | 2.1 |
| (1,75) | 1:A:40:LEU:C | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 6 | 2.1 |
| (1,74) | 1:A:40:LEU:N | 1:A:40:LEU:CA | 1:A:40:LEU:C | 1:A:41:LYS:N | 19 | 2.1 |
| (1,69) | 1:A:37:LYS:C | 1:A:38:LEU:N | 1:A:38:LEU:CA | 1:A:38:LEU:C | 5 | 2.1 |
| (1,69) | 1:A:37:LYS:C | 1:A:38:LEU:N | 1:A:38:LEU:CA | 1:A:38:LEU:C | 9 | 2.1 |
| (1,69) | 1:A:37:LYS:C | 1:A:38:LEU:N | 1:A:38:LEU:CA | 1:A:38:LEU:C | 14 | 2.1 |
| (1,6) | 1:A:0:GLY:N | 1:A:0:GLY:CA | 1:A:0:GLY:C | 1:A:1:MET:N | 9 | 2.1 |
| (1,50) | 1:A:28:SER:N | 1:A:28:SER:CA | 1:A:28:SER:C | 1:A:29:ASP:N | 13 | 2.1 |
| (1,48) | 1:A:27:THR:N | 1:A:27:THR:CA | 1:A:27:THR:C | 1:A:28:SER:N | 9 | 2.1 |
| (1,44) | 1:A:24:LYS:N | 1:A:24:LYS:CA | 1:A:24:LYS:C | 1:A:25:ASN:N | 2 | 2.1 |
| (1,44) | 1:A:24:LYS:N | 1:A:24:LYS:CA | 1:A:24:LYS:C | 1:A:25:ASN:N | 8 | 2.1 |
| (1,35) | 1:A:19:VAL:C | 1:A:20:LEU:N | 1:A:20:LEU:CA | 1:A:20:LEU:C | 2 | 2.1 |
| (1,27) | 1:A:15:SER:C | 1:A:16:LEU:N | 1:A:16:LEU:CA | 1:A:16:LEU:C | 6 | 2.1 |
| (1,26) | 1:A:15:SER:N | 1:A:15:SER:CA | 1:A:15:SER:C | 1:A:16:LEU:N | 16 | 2.1 |
| (1,26) | 1:A:15:SER:N | 1:A:15:SER:CA | 1:A:15:SER:C | 1:A:16:LEU:N | 18 | 2.1 |
| (1,167) | 1:A:90:PHE:N | 1:A:90:PHE:CA | 1:A:90:PHE:C | 1:A:91:GLY:N | 17 | 2.1 |
| (1,118) | 1:A:64:HIS:C | 1:A:65:ALA:N | 1:A:65:ALA:CA | 1:A:65:ALA:C | 8 | 2.1 |
| (1,88) | 1:A:48:PRO:N | 1:A:48:PRO:CA | 1:A:48:PRO:C | 1:A:49:ASP:N | 13 | 2.0 |
| (1,8) | 1:A:2:ALA:N | 1:A:2:ALA:CA | 1:A:2:ALA:C | 1:A:3:ASP:N | 2 | 2.0 |
| (1,68) | 1:A:37:LYS:N | 1:A:37:LYS:CA | 1:A:37:LYS:C | 1:A:38:LEU:N | 19 | 2.0 |
| (1,44) | 1:A:24:LYS:N | 1:A:24:LYS:CA | 1:A:24:LYS:C | 1:A:25:ASN:N | 19 | 2.0 |
| (1,26) | 1:A:15:SER:N | 1:A:15:SER:CA | 1:A:15:SER:C | 1:A:16:LEU:N | 9 | 2.0 |
| (1,16) | 1:A:9:LEU:N | 1:A:9:LEU:CA | 1:A:9:LEU:C | 1:A:10:SEP:N | 10 | 2.0 |
| (1,118) | 1:A:64:HIS:C | 1:A:65:ALA:N | 1:A:65:ALA:CA | 1:A:65:ALA:C | 13 | 2.0 |
| (1,88) | 1:A:48:PRO:N | 1:A:48:PRO:CA | 1:A:48:PRO:C | 1:A:49:ASP:N | 5 | 1.9 |
| (1,75) | 1:A:40:LEU:C | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 8 | 1.9 |
| (1,70) | 1:A:38:LEU:N | 1:A:38:LEU:CA | 1:A:38:LEU:C | 1:A:39:ALA:N | 13 | 1.9 |
| (1,69) | 1:A:37:LYS:C | 1:A:38:LEU:N | 1:A:38:LEU:CA | 1:A:38:LEU:C | 6 | 1.9 |
| (1,35) | 1:A:19:VAL:C | 1:A:20:LEU:N | 1:A:20:LEU:CA | 1:A:20:LEU:C | 6 | 1.9 |
| (1,35) | 1:A:19:VAL:C | 1:A:20:LEU:N | 1:A:20:LEU:CA | 1:A:20:LEU:C | 11 | 1.9 |
| (1,26) | 1:A:15:SER:N | 1:A:15:SER:CA | 1:A:15:SER:C | 1:A:16:LEU:N | 20 | 1.9 |
| (1,172) | 1:A:93:GLU:C | 1:A:94:ASN:N | 1:A:94:ASN:CA | 1:A:94:ASN:C | 9 | 1.9 |
| (1,167) | 1:A:90:PHE:N | 1:A:90:PHE:CA | 1:A:90:PHE:C | 1:A:91:GLY:N | 11 | 1.9 |
| (1,16) | 1:A:9:LEU:N | 1:A:9:LEU:CA | 1:A:9:LEU:C | 1:A:10:SEP:N | 19 | 1.9 |
| (1,118) | 1:A:64:HIS:C | 1:A:65:ALA:N | 1:A:65:ALA:CA | 1:A:65:ALA:C | 18 | 1.9 |
| (1,7) | 1:A:1:MET:C | 1:A:2:ALA:N | 1:A:2:ALA:CA | 1:A:2:ALA:C | 10 | 1.8 |
| (1,50) | 1:A:28:SER:N | 1:A:28:SER:CA | 1:A:28:SER:C | 1:A:29:ASP:N | 9 | 1.8 |
| (1,48) | 1:A:27:THR:N | 1:A:27:THR:CA | 1:A:27:THR:C | 1:A:28:SER:N | 3 | 1.8 |
| (1,48) | 1:A:27:THR:N | 1:A:27:THR:CA | 1:A:27:THR:C | 1:A:28:SER:N | 5 | 1.8 |
| (1,44) | 1:A:24:LYS:N | 1:A:24:LYS:CA | 1:A:24:LYS:C | 1:A:25:ASN:N | 14 | 1.8 |
| (1,44) | 1:A:24:LYS:N | 1:A:24:LYS:CA | 1:A:24:LYS:C | 1:A:25:ASN:N | 18 | 1.8 |
| (1,35) | 1:A:19:VAL:C | 1:A:20:LEU:N | 1:A:20:LEU:CA | 1:A:20:LEU:C | 5 | 1.8 |
| (1,35) | 1:A:19:VAL:C | 1:A:20:LEU:N | 1:A:20:LEU:CA | 1:A:20:LEU:C | 18 | 1.8 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,26) | 1:A:15:SER:N | 1:A:15:SER:CA | 1:A:15:SER:C | 1:A:16:LEU:N | 11 | 1.8 |
| (1,174) | 1:A:94:ASN:C | 1:A:95:VAL:N | 1:A:95:VAL:CA | 1:A:95:VAL:C | 17 | 1.8 |
| (1,172) | 1:A:93:GLU:C | 1:A:94:ASN:N | 1:A:94:ASN:CA | 1:A:94:ASN:C | 5 | 1.8 |
| (1,172) | 1:A:93:GLU:C | 1:A:94:ASN:N | 1:A:94:ASN:CA | 1:A:94:ASN:C | 7 | 1.8 |
| (1,167) | 1:A:90:PHE:N | 1:A:90:PHE:CA | 1:A:90:PHE:C | 1:A:91:GLY:N | 5 | 1.8 |
| (1,167) | 1:A:90:PHE:N | 1:A:90:PHE:CA | 1:A:90:PHE:C | 1:A:91:GLY:N | 7 | 1.8 |
| (1,15) | 1:A:7:ARG:C | 1:A:8:SER:N | 1:A:8:SER:CA | 1:A:8:SER:C | 5 | 1.8 |
| (1,146) | 1:A:78:LYS:C | 1:A:79:TYR:N | 1:A:79:TYR:CA | 1:A:79:TYR:C | 14 | 1.8 |
| (1,145) | 1:A:78:LYS:N | 1:A:78:LYS:CA | 1:A:78:LYS:C | 1:A:79:TYR:N | 20 | 1.8 |
| (1,76) | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 1:A:42:TYR:N | 5 | 1.7 |
| (1,74) | 1:A:40:LEU:N | 1:A:40:LEU:CA | 1:A:40:LEU:C | 1:A:41:LYS:N | 7 | 1.7 |
| (1,69) | 1:A:37:LYS:C | 1:A:38:LEU:N | 1:A:38:LEU:CA | 1:A:38:LEU:C | 1 | 1.7 |
| (1,69) | 1:A:37:LYS:C | 1:A:38:LEU:N | 1:A:38:LEU:CA | 1:A:38:LEU:C | 7 | 1.7 |
| (1,68) | 1:A:37:LYS:N | 1:A:37:LYS:CA | 1:A:37:LYS:C | 1:A:38:LEU:N | 8 | 1.7 |
| (1,48) | 1:A:27:THR:N | 1:A:27:THR:CA | 1:A:27:THR:C | 1:A:28:SER:N | 10 | 1.7 |
| (1,35) | 1:A:19:VAL:C | 1:A:20:LEU:N | 1:A:20:LEU:CA | 1:A:20:LEU:C | 4 | 1.7 |
| (1,35) | 1:A:19:VAL:C | 1:A:20:LEU:N | 1:A:20:LEU:CA | 1:A:20:LEU:C | 19 | 1.7 |
| (1,20) | 1:A:12:SER:N | 1:A:12:SER:CA | 1:A:12:SER:C | 1:A:13:GLY:N | 3 | 1.7 |
| (1,180) | 1:A:97:THR:C | 1:A:98:TYR:N | 1:A:98:TYR:CA | 1:A:98:TYR:C | 2 | 1.7 |
| (1,172) | 1:A:93:GLU:C | 1:A:94:ASN:N | 1:A:94:ASN:CA | 1:A:94:ASN:C | 4 | 1.7 |
| (1,172) | 1:A:93:GLU:C | 1:A:94:ASN:N | 1:A:94:ASN:CA | 1:A:94:ASN:C | 12 | 1.7 |
| (1,159) | 1:A:85:TYR:C | 1:A:86:VAL:N | 1:A:86:VAL:CA | 1:A:86:VAL:C | 6 | 1.7 |
| (1,145) | 1:A:78:LYS:N | 1:A:78:LYS:CA | 1:A:78:LYS:C | 1:A:79:TYR:N | 14 | 1.7 |
| (1,144) | 1:A:77:ASP:C | 1:A:78:LYS:N | 1:A:78:LYS:CA | 1:A:78:LYS:C | 11 | 1.7 |
| (1,118) | 1:A:64:HIS:C | 1:A:65:ALA:N | 1:A:65:ALA:CA | 1:A:65:ALA:C | 7 | 1.7 |
| (1,88) | 1:A:48:PRO:N | 1:A:48:PRO:CA | 1:A:48:PRO:C | 1:A:49:ASP:N | 12 | 1.6 |
| (1,88) | 1:A:48:PRO:N | 1:A:48:PRO:CA | 1:A:48:PRO:C | 1:A:49:ASP:N | 15 | 1.6 |
| (1,75) | 1:A:40:LEU:C | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 19 | 1.6 |
| (1,69) | 1:A:37:LYS:C | 1:A:38:LEU:N | 1:A:38:LEU:CA | 1:A:38:LEU:C | 3 | 1.6 |
| (1,44) | 1:A:24:LYS:N | 1:A:24:LYS:CA | 1:A:24:LYS:C | 1:A:25:ASN:N | 12 | 1.6 |
| (1,44) | 1:A:24:LYS:N | 1:A:24:LYS:CA | 1:A:24:LYS:C | 1:A:25:ASN:N | 16 | 1.6 |
| (1,27) | 1:A:15:SER:C | 1:A:16:LEU:N | 1:A:16:LEU:CA | 1:A:16:LEU:C | 4 | 1.6 |
| (1,26) | 1:A:15:SER:N | 1:A:15:SER:CA | 1:A:15:SER:C | 1:A:16:LEU:N | 1 | 1.6 |
| (1,20) | 1:A:12:SER:N | 1:A:12:SER:CA | 1:A:12:SER:C | 1:A:13:GLY:N | 6 | 1.6 |
| (1,172) | 1:A:93:GLU:C | 1:A:94:ASN:N | 1:A:94:ASN:CA | 1:A:94:ASN:C | 1 | 1.6 |
| (1,167) | 1:A:90:PHE:N | 1:A:90:PHE:CA | 1:A:90:PHE:C | 1:A:91:GLY:N | 8 | 1.6 |
| (1,167) | 1:A:90:PHE:N | 1:A:90:PHE:CA | 1:A:90:PHE:C | 1:A:91:GLY:N | 15 | 1.6 |
| (1,167) | 1:A:90:PHE:N | 1:A:90:PHE:CA | 1:A:90:PHE:C | 1:A:91:GLY:N | 19 | 1.6 |
| (1,159) | 1:A:85:TYR:C | 1:A:86:VAL:N | 1:A:86:VAL:CA | 1:A:86:VAL:C | 13 | 1.6 |
| (1,159) | 1:A:85:TYR:C | 1:A:86:VAL:N | 1:A:86:VAL:CA | 1:A:86:VAL:C | 20 | 1.6 |
| (1,146) | 1:A:78:LYS:C | 1:A:79:TYR:N | 1:A:79:TYR:CA | 1:A:79:TYR:C | 8 | 1.6 |
| (1,118) | 1:A:64:HIS:C | 1:A:65:ALA:N | 1:A:65:ALA:CA | 1:A:65:ALA:C | 3 | 1.6 |
| (1,118) | 1:A:64:HIS:C | 1:A:65:ALA:N | 1:A:65:ALA:CA | 1:A:65:ALA:C | 10 | 1.6 |
| (1,88) | 1:A:48:PRO:N | 1:A:48:PRO:CA | 1:A:48:PRO:C | 1:A:49:ASP:N | 8 | 1.5 |
| (1,88) | 1:A:48:PRO:N | 1:A:48:PRO:CA | 1:A:48:PRO:C | 1:A:49:ASP:N | 16 | 1.5 |
| (1,48) | 1:A:27:THR:N | 1:A:27:THR:CA | 1:A:27:THR:C | 1:A:28:SER:N | 1 | 1.5 |
| (1,48) | 1:A:27:THR:N | 1:A:27:THR:CA | 1:A:27:THR:C | 1:A:28:SER:N | 8 | 1.5 |
| (1,44) | 1:A:24:LYS:N | 1:A:24:LYS:CA | 1:A:24:LYS:C | 1:A:25:ASN:N | 7 | 1.5 |
| (1,44) | 1:A:24:LYS:N | 1:A:24:LYS:CA | 1:A:24:LYS:C | 1:A:25:ASN:N | 15 | 1.5 |
| (1,35) | 1:A:19:VAL:C | 1:A:20:LEU:N | 1:A:20:LEU:CA | 1:A:20:LEU:C | 15 | 1.5 |
| (1,26) | 1:A:15:SER:N | 1:A:15:SER:CA | 1:A:15:SER:C | 1:A:16:LEU:N | 15 | 1.5 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,172) | 1:A:93:GLU:C | 1:A:94:ASN:N | 1:A:94:ASN:CA | 1:A:94:ASN:C | 2 | 1.5 |
| (1,172) | 1:A:93:GLU:C | 1:A:94:ASN:N | 1:A:94:ASN:CA | 1:A:94:ASN:C | 8 | 1.5 |
| (1,172) | 1:A:93:GLU:C | 1:A:94:ASN:N | 1:A:94:ASN:CA | 1:A:94:ASN:C | 11 | 1.5 |
| (1,167) | 1:A:90:PHE:N | 1:A:90:PHE:CA | 1:A:90:PHE:C | 1:A:91:GLY:N | 10 | 1.5 |
| (1,147) | 1:A:79:TYR:N | 1:A:79:TYR:CA | 1:A:79:TYR:C | 1:A:80:GLY:N | 10 | 1.5 |
| (1,146) | 1:A:78:LYS:C | 1:A:79:TYR:N | 1:A:79:TYR:CA | 1:A:79:TYR:C | 4 | 1.5 |
| (1,146) | 1:A:78:LYS:C | 1:A:79:TYR:N | 1:A:79:TYR:CA | 1:A:79:TYR:C | 10 | 1.5 |
| (1,88) | 1:A:48:PRO:N | 1:A:48:PRO:CA | 1:A:48:PRO:C | 1:A:49:ASP:N | 1 | 1.4 |
| (1,88) | 1:A:48:PRO:N | 1:A:48:PRO:CA | 1:A:48:PRO:C | 1:A:49:ASP:N | 4 | 1.4 |
| (1,76) | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 1:A:42:TYR:N | 3 | 1.4 |
| (1,69) | 1:A:37:LYS:C | 1:A:38:LEU:N | 1:A:38:LEU:CA | 1:A:38:LEU:C | 8 | 1.4 |
| (1,20) | 1:A:12:SER:N | 1:A:12:SER:CA | 1:A:12:SER:C | 1:A:13:GLY:N | 8 | 1.4 |
| (1,20) | 1:A:12:SER:N | 1:A:12:SER:CA | 1:A:12:SER:C | 1:A:13:GLY:N | 16 | 1.4 |
| (1,18) | 1:A:10:SEP:N | 1:A:10:SEP:CA | 1:A:10:SEP:C | 1:A:11:THR:N | 7 | 1.4 |
| (1,172) | 1:A:93:GLU:C | 1:A:94:ASN:N | 1:A:94:ASN:CA | 1:A:94:ASN:C | 16 | 1.4 |
| (1,167) | 1:A:90:PHE:N | 1:A:90:PHE:CA | 1:A:90:PHE:C | 1:A:91:GLY:N | 4 | 1.4 |
| (1,16) | 1:A:9:LEU:N | 1:A:9:LEU:CA | 1:A:9:LEU:C | 1:A:10:SEP:N | 14 | 1.4 |
| (1,159) | 1:A:85:TYR:C | 1:A:86:VAL:N | 1:A:86:VAL:CA | 1:A:86:VAL:C | 3 | 1.4 |
| (1,159) | 1:A:85:TYR:C | 1:A:86:VAL:N | 1:A:86:VAL:CA | 1:A:86:VAL:C | 4 | 1.4 |
| (1,146) | 1:A:78:LYS:C | 1:A:79:TYR:N | 1:A:79:TYR:CA | 1:A:79:TYR:C | 2 | 1.4 |
| (1,118) | 1:A:64:HIS:C | 1:A:65:ALA:N | 1:A:65:ALA:CA | 1:A:65:ALA:C | 1 | 1.4 |
| (1,118) | 1:A:64:HIS:C | 1:A:65:ALA:N | 1:A:65:ALA:CA | 1:A:65:ALA:C | 9 | 1.4 |
| (1,115) | 1:A:63:ALA:N | 1:A:63:ALA:CA | 1:A:63:ALA:C | 1:A:64:HIS:N | 13 | 1.4 |
| (1,76) | 1:A:41:LYS:N | 1:A:41:LYS:CA | 1:A:41:LYS:C | 1:A:42:TYR:N | 2 | 1.3 |
| (1,69) | 1:A:37:LYS:C | 1:A:38:LEU:N | 1:A:38:LEU:CA | 1:A:38:LEU:C | 20 | 1.3 |
| (1,44) | 1:A:24:LYS:N | 1:A:24:LYS:CA | 1:A:24:LYS:C | 1:A:25:ASN:N | 17 | 1.3 |
| (1,42) | 1:A:23:ASP:N | 1:A:23:ASP:CA | 1:A:23:ASP:C | 1:A:24:LYS:N | 3 | 1.3 |
| (1,42) | 1:A:23:ASP:N | 1:A:23:ASP:CA | 1:A:23:ASP:C | 1:A:24:LYS:N | 11 | 1.3 |
| (1,42) | 1:A:23:ASP:N | 1:A:23:ASP:CA | 1:A:23:ASP:C | 1:A:24:LYS:N | 14 | 1.3 |
| (1,181) | 1:A:98:TYR:N | 1:A:98:TYR:CA | 1:A:98:TYR:C | 1:A:99:PHE:N | 20 | 1.3 |
| (1,18) | 1:A:10:SEP:N | 1:A:10:SEP:CA | 1:A:10:SEP:C | 1:A:11:THR:N | 2 | 1.3 |
| (1,172) | 1:A:93:GLU:C | 1:A:94:ASN:N | 1:A:94:ASN:CA | 1:A:94:ASN:C | 20 | 1.3 |
| (1,167) | 1:A:90:PHE:N | 1:A:90:PHE:CA | 1:A:90:PHE:C | 1:A:91:GLY:N | 3 | 1.3 |
| (1,167) | 1:A:90:PHE:N | 1:A:90:PHE:CA | 1:A:90:PHE:C | 1:A:91:GLY:N | 14 | 1.3 |
| (1,167) | 1:A:90:PHE:N | 1:A:90:PHE:CA | 1:A:90:PHE:C | 1:A:91:GLY:N | 16 | 1.3 |
| (1,164) | 1:A:88:GLU:N | 1:A:88:GLU:CA | 1:A:88:GLU:C | 1:A:89:GLN:N | 4 | 1.3 |
| (1,159) | 1:A:85:TYR:C | 1:A:86:VAL:N | 1:A:86:VAL:CA | 1:A:86:VAL:C | 10 | 1.3 |
| (1,159) | 1:A:85:TYR:C | 1:A:86:VAL:N | 1:A:86:VAL:CA | 1:A:86:VAL:C | 12 | 1.3 |
| (1,145) | 1:A:78:LYS:N | 1:A:78:LYS:CA | 1:A:78:LYS:C | 1:A:79:TYR:N | 16 | 1.3 |
| (1,145) | 1:A:78:LYS:N | 1:A:78:LYS:CA | 1:A:78:LYS:C | 1:A:79:TYR:N | 17 | 1.3 |
| (1,118) | 1:A:64:HIS:C | 1:A:65:ALA:N | 1:A:65:ALA:CA | 1:A:65:ALA:C | 12 | 1.3 |
| (1,88) | 1:A:48:PRO:N | 1:A:48:PRO:CA | 1:A:48:PRO:C | 1:A:49:ASP:N | 7 | 1.2 |
| (1,74) | 1:A:40:LEU:N | 1:A:40:LEU:CA | 1:A:40:LEU:C | 1:A:41:LYS:N | 20 | 1.2 |
| (1,50) | 1:A:28:SER:N | 1:A:28:SER:CA | 1:A:28:SER:C | 1:A:29:ASP:N | 10 | 1.2 |
| (1,44) | 1:A:24:LYS:N | 1:A:24:LYS:CA | 1:A:24:LYS:C | 1:A:25:ASN:N | 3 | 1.2 |
| (1,42) | 1:A:23:ASP:N | 1:A:23:ASP:CA | 1:A:23:ASP:C | 1:A:24:LYS:N | 15 | 1.2 |
| (1,38) | 1:A:21:GLY:N | 1:A:21:GLY:CA | 1:A:21:GLY:C | 1:A:22:LEU:N | 20 | 1.2 |
| (1,25) | 1:A:14:GLU:C | 1:A:15:SER:N | 1:A:15:SER:CA | 1:A:15:SER:C | 12 | 1.2 |
| (1,172) | 1:A:93:GLU:C | 1:A:94:ASN:N | 1:A:94:ASN:CA | 1:A:94:ASN:C | 10 | 1.2 |
| (1,167) | 1:A:90:PHE:N | 1:A:90:PHE:CA | 1:A:90:PHE:C | 1:A:91:GLY:N | 18 | 1.2 |
| (1,15) | 1:A:7:ARG:C | 1:A:8:SER:N | 1:A:8:SER:CA | 1:A:8:SER:C | 17 | 1.2 |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| (1,144) | 1:A:77:ASP:C | 1:A:78:LYS:N | 1:A:78:LYS:CA | 1:A:78:LYS:C | 4 | 1.2 |
| (1,144) | 1:A:77:ASP:C | 1:A:78:LYS:N | 1:A:78:LYS:CA | 1:A:78:LYS:C | 5 | 1.2 |
| (1,118) | 1:A:64:HIS:C | 1:A:65:ALA:N | 1:A:65:ALA:CA | 1:A:65:ALA:C | 2 | 1.2 |
| (1,118) | 1:A:64:HIS:C | 1:A:65:ALA:N | 1:A:65:ALA:CA | 1:A:65:ALA:C | 15 | 1.2 |
| (1,118) | 1:A:64:HIS:C | 1:A:65:ALA:N | 1:A:65:ALA:CA | 1:A:65:ALA:C | 19 | 1.2 |
| (1,88) | 1:A:48:PRO:N | 1:A:48:PRO:CA | 1:A:48:PRO:C | 1:A:49:ASP:N | 14 | 1.1 |
| (1,48) | 1:A:27:THR:N | 1:A:27:THR:CA | 1:A:27:THR:C | 1:A:28:SER:N | 16 | 1.1 |
| (1,42) | 1:A:23:ASP:N | 1:A:23:ASP:CA | 1:A:23:ASP:C | 1:A:24:LYS:N | 7 | 1.1 |
| (1,37) | 1:A:20:LEU:C | 1:A:21:GLY:N | 1:A:21:GLY:CA | 1:A:21:GLY:C | 20 | 1.1 |
| (1,35) | 1:A:19:VAL:C | 1:A:20:LEU:N | 1:A:20:LEU:CA | 1:A:20:LEU:C | 13 | 1.1 |
| (1,18) | 1:A:10:SEP:N | 1:A:10:SEP:CA | 1:A:10:SEP:C | 1:A:11:THR:N | 15 | 1.1 |
| (1,174) | 1:A:94:ASN:C | 1:A:95:VAL:N | 1:A:95:VAL:CA | 1:A:95:VAL:C | 13 | 1.1 |
| (1,172) | 1:A:93:GLU:C | 1:A:94:ASN:N | 1:A:94:ASN:CA | 1:A:94:ASN:C | 14 | 1.1 |
| (1,159) | 1:A:85:TYR:C | 1:A:86:VAL:N | 1:A:86:VAL:CA | 1:A:86:VAL:C | 7 | 1.1 |
| (1,159) | 1:A:85:TYR:C | 1:A:86:VAL:N | 1:A:86:VAL:CA | 1:A:86:VAL:C | 17 | 1.1 |
| (1,146) | 1:A:78:LYS:C | 1:A:79:TYR:N | 1:A:79:TYR:CA | 1:A:79:TYR:C | 17 | 1.1 |
| (1,146) | 1:A:78:LYS:C | 1:A:79:TYR:N | 1:A:79:TYR:CA | 1:A:79:TYR:C | 20 | 1.1 |
| (1,145) | 1:A:78:LYS:N | 1:A:78:LYS:CA | 1:A:78:LYS:C | 1:A:79:TYR:N | 7 | 1.1 |
| (1,144) | 1:A:77:ASP:C | 1:A:78:LYS:N | 1:A:78:LYS:CA | 1:A:78:LYS:C | 6 | 1.1 |
| (1,1) | 1:A:-3:ARG:C | 1:A:-2:SER:N | 1:A:-2:SER:CA | 1:A:-2:SER:C | 5 | 1.1 |