



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Jun 6, 2023 – 06:34 pm BST

PDB ID : 4A5V  
BMRB ID : 18039  
Title : Solution structure ensemble of the two N-terminal apple domains (residues 58-231) of *Toxoplasma gondii* microneme protein 4  
Authors : Marchant, J.; Cowper, B.; Liu, Y.; Lai, L.; Pinzan, C.; Marq, J.B.; Friedrich, N.; Sawmynaden, K.; Chai, W.; Childs, R.A.; Saouros, S.; Simpson, P.; Barreira, M.C.R.; Feizi, T.; Soldati-Favre, D.; Matthews, S.  
Deposited on : 2011-10-28

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

We welcome your comments at [validation@mail.wwpdb.org](mailto:validation@mail.wwpdb.org)

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

---

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

MolProbity : 4.02b-467  
Percentile statistics : 20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)  
wwPDB-RCI : v\_1n\_11\_5\_13\_A (Berjanski et al., 2005)  
PANAV : Wang et al. (2010)  
wwPDB-ShiftChecker : v1.2  
BMRB Restraints Analysis : v1.2  
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)  
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)  
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.33

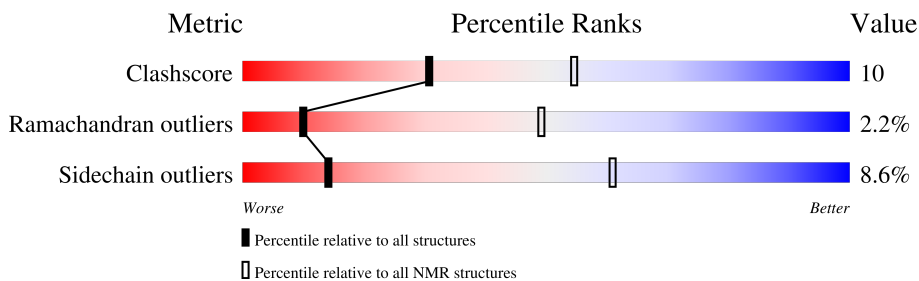
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*SOLUTION NMR*

The overall completeness of chemical shifts assignment is 91%.

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  $\geq 3$ , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria. A cyan segment indicates the fraction of residues that are not part of the well-defined cores, and a grey segment represents the fraction of residues that are not modelled. The numeric value for each fraction is indicated below the corresponding segment, with a dot representing fractions  $\leq 5\%$ .

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	161	 74% 20% . .

## 2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 10 models. Model 6 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative.

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:5-A:161 (157)	0.29	6

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

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

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

Cluster number	Models
1	3, 6, 7, 9, 10
2	2, 4, 8
Single-model clusters	1; 5

### 3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2302 atoms, of which 1105 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called MICRONEMAL PROTEIN 4.

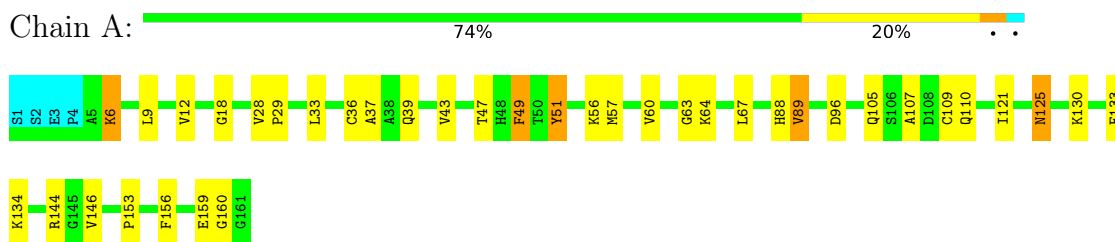
Mol	Chain	Residues	Atoms					Trace	
			Total	C	H	N	O		S
1	A	161	2302	725	1105	207	250	15	0

## 4 Residue-property plots

### 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: MICRONEMAL PROTEIN 4

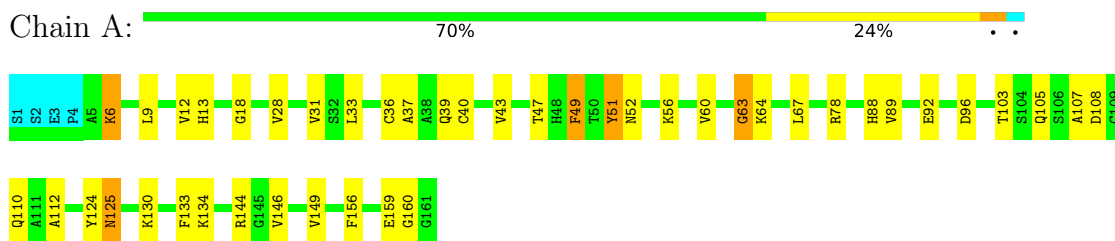


### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

#### 4.2.1 Score per residue for model 1

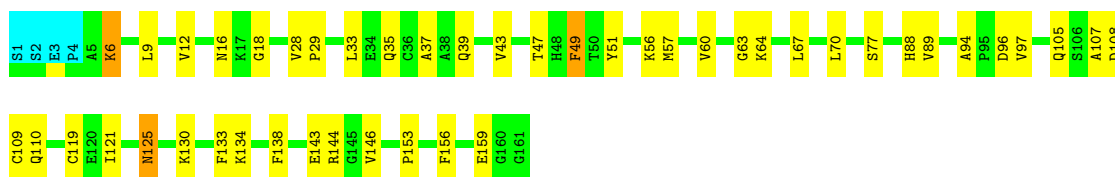
- Molecule 1: MICRONEMAL PROTEIN 4



#### 4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: MICRONEMAL PROTEIN 4

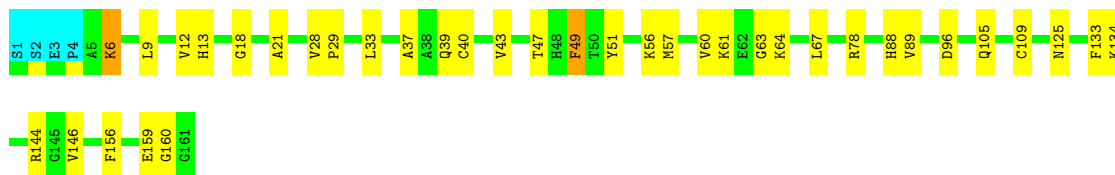




### 4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: MICRONEMAL PROTEIN 4

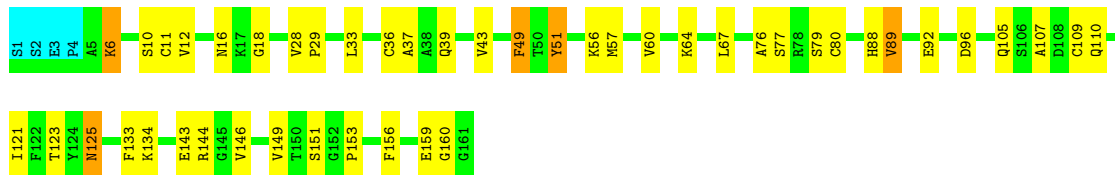
Chain A: 75% 22%



### 4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: MICRONEMAL PROTEIN 4

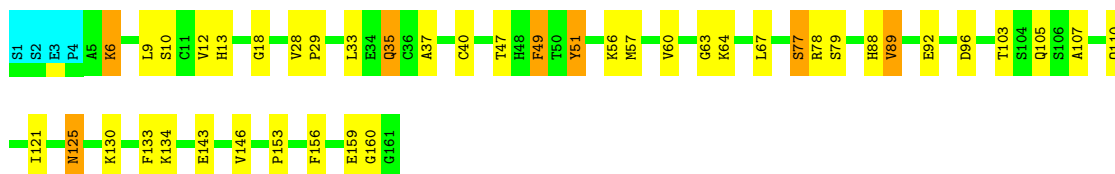
Chain A: 69% 25%



### 4.2.5 Score per residue for model 5

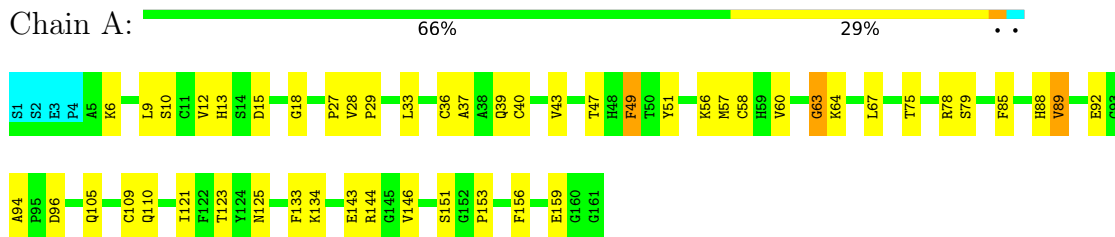
- Molecule 1: MICRONEMAL PROTEIN 4

Chain A: 71% 22%



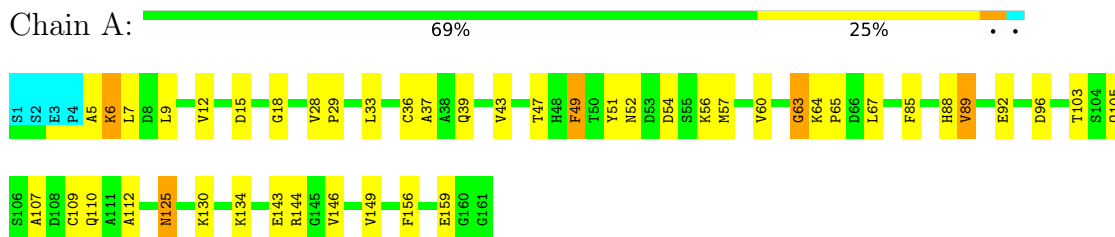
### 4.2.6 Score per residue for model 6 (medoid)

- Molecule 1: MICRONEMAL PROTEIN 4



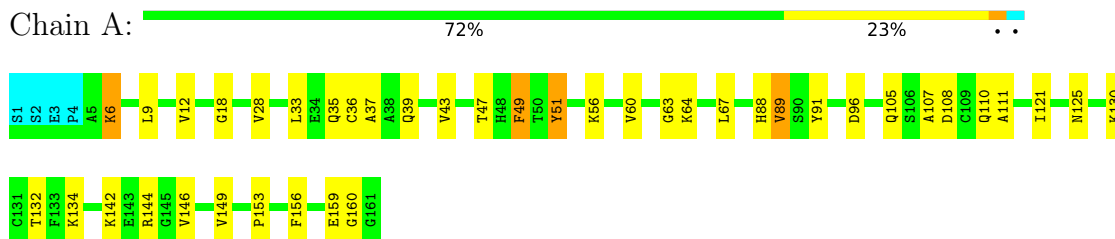
#### 4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: MICRONEMAL PROTEIN 4



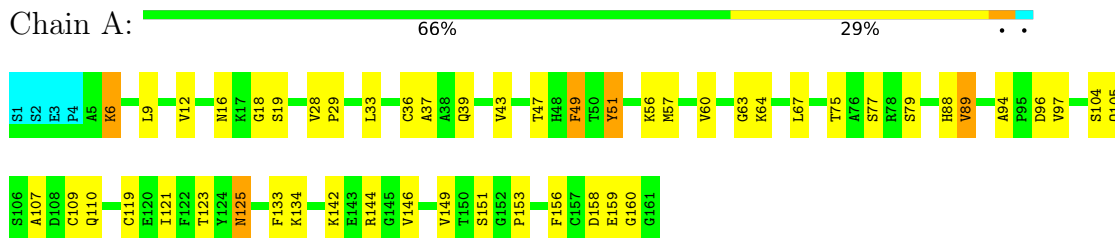
#### 4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: MICRONEMAL PROTEIN 4



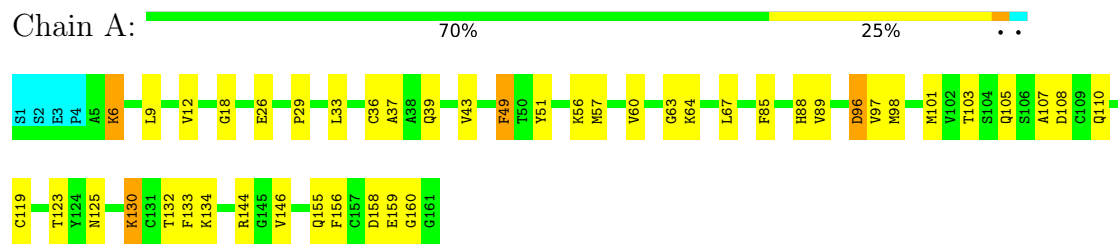
#### 4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: MICRONEMAL PROTEIN 4



#### 4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: MICRONEMAL PROTEIN 4





## 5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *ARIA*.

Of the 40 calculated structures, 10 were deposited, based on the following criterion: *LOWEST ENERGY*.

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

Software name	Classification	Version
CNS	refinement	1.2
NMRView	structure solution	
TALOS	structure solution	
ARIA	structure solution	
CNS	structure solution	

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	1772
Number of shifts mapped to atoms	1772
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	91%

## 6 Model quality i

### 6.1 Standard geometry i

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	0.41±0.04	1±1/1191 ( 0.1± 0.1%)	0.48±0.01	0±0/1604 ( 0.0± 0.0%)
All	All	0.42	6/11910 ( 0.1%)	0.48	0/16040 ( 0.0%)

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	85	PHE	CE1-CZ	6.51	1.49	1.37	6	3
1	A	85	PHE	CE2-CZ	-5.50	1.26	1.37	6	3

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

### 6.2 Too-close contacts i

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1169	1080	1080	22±3
All	All	11690	10800	10800	221

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 10.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:130:LYS:HZ1	1:A:132:THR:HG23	0.74	1.42	8	1
1:A:33:LEU:HD22	1:A:51:TYR:CD2	0.69	2.22	1	10
1:A:98:MET:HB2	1:A:133:PHE:CD1	0.69	2.23	10	1
1:A:37:ALA:HA	1:A:49:PHE:CE2	0.68	2.23	9	10
1:A:88:HIS:HA	1:A:146:VAL:O	0.63	1.93	7	10
1:A:36:CYS:SG	1:A:51:TYR:HD1	0.62	2.18	4	1
1:A:9:LEU:HD22	1:A:51:TYR:OH	0.59	1.96	3	9
1:A:125:ASN:HD22	1:A:149:VAL:HG12	0.59	1.58	8	1
1:A:6:LYS:HD3	1:A:56:LYS:HA	0.58	1.75	6	10
1:A:89:VAL:HG21	1:A:142:LYS:HE2	0.57	1.76	8	1
1:A:18:GLY:O	1:A:67:LEU:HA	0.57	2.00	1	10
1:A:130:LYS:NZ	1:A:132:THR:HG23	0.56	2.14	8	1
1:A:130:LYS:HB3	1:A:130:LYS:NZ	0.56	2.14	1	1
1:A:133:PHE:C	1:A:134:LYS:HD2	0.52	2.25	9	7
1:A:121:ILE:HG22	1:A:153:PRO:HA	0.52	1.80	6	6
1:A:97:VAL:HG21	1:A:119:CYS:HA	0.52	1.81	10	3
1:A:156:PHE:HB2	1:A:159:GLU:HB2	0.51	1.82	8	9
1:A:79:SER:HB3	1:A:110:GLN:OE1	0.51	2.06	4	3
1:A:39:GLN:O	1:A:43:VAL:HG12	0.50	2.06	9	9
1:A:6:LYS:CD	1:A:56:LYS:HA	0.49	2.37	6	1
1:A:125:ASN:ND2	1:A:149:VAL:HG12	0.49	2.22	4	4
1:A:19:SER:OG	1:A:75:THR:HG21	0.49	2.07	9	1
1:A:6:LYS:HE2	1:A:33:LEU:HD23	0.49	1.85	1	1
1:A:89:VAL:HA	1:A:143:GLU:O	0.49	2.07	6	5
1:A:49:PHE:CE2	1:A:78:ARG:HA	0.48	2.42	1	2
1:A:79:SER:HB2	1:A:110:GLN:NE2	0.48	2.23	5	1
1:A:29:PRO:HA	1:A:57:MET:HA	0.48	1.86	2	8
1:A:52:ASN:O	1:A:56:LYS:HA	0.47	2.09	1	1
1:A:47:THR:HG21	1:A:63:GLY:HA2	0.47	1.87	9	6
1:A:91:TYR:OH	1:A:142:LYS:HE3	0.47	2.10	8	1
1:A:6:LYS:HD2	1:A:31:VAL:O	0.46	2.10	1	1
1:A:40:CYS:SG	1:A:78:ARG:HB3	0.46	2.50	6	4
1:A:89:VAL:HG21	1:A:142:LYS:HE3	0.46	1.87	9	1
1:A:36:CYS:O	1:A:39:GLN:HB3	0.46	2.11	4	6
1:A:67:LEU:CD1	1:A:103:THR:HB	0.46	2.41	7	3
1:A:112:ALA:HB3	1:A:133:PHE:CE2	0.45	2.46	1	1
1:A:16:ASN:HB2	1:A:70:LEU:O	0.45	2.11	2	1
1:A:33:LEU:HD22	1:A:51:TYR:CG	0.45	2.46	7	6
1:A:13:HIS:NE2	1:A:103:THR:HA	0.45	2.27	1	1
1:A:77:SER:HB2	1:A:107:ALA:O	0.45	2.12	4	2
1:A:47:THR:OG1	1:A:63:GLY:HA2	0.45	2.12	1	4
1:A:6:LYS:HD2	1:A:6:LYS:H	0.44	1.71	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:110:GLN:CD	1:A:156:PHE:HA	0.44	2.33	1	4
1:A:107:ALA:O	1:A:110:GLN:HB3	0.44	2.13	2	7
1:A:36:CYS:SG	1:A:51:TYR:CD1	0.44	3.07	4	4
1:A:13:HIS:CE1	1:A:67:LEU:HD13	0.44	2.48	5	1
1:A:77:SER:HB3	1:A:107:ALA:HB1	0.43	1.89	5	2
1:A:49:PHE:CE1	1:A:51:TYR:OH	0.43	2.70	9	1
1:A:96:ASP:HA	1:A:134:LYS:HD3	0.43	1.89	10	1
1:A:5:ALA:O	1:A:7:LEU:HG	0.43	2.14	7	1
1:A:94:ALA:HB2	1:A:138:PHE:HA	0.43	1.89	2	1
1:A:27:PRO:HA	1:A:58:CYS:O	0.43	2.14	6	1
1:A:49:PHE:CD1	1:A:49:PHE:N	0.42	2.87	4	1
1:A:92:GLU:HA	1:A:134:LYS:HE3	0.42	1.91	5	5
1:A:156:PHE:CB	1:A:159:GLU:HB2	0.42	2.43	6	4
1:A:97:VAL:HG23	1:A:98:MET:HG3	0.42	1.92	10	1
1:A:125:ASN:N	1:A:130:LYS:O	0.42	2.51	5	3
1:A:9:LEU:HG	1:A:10:SER:H	0.42	1.75	5	2
1:A:123:THR:HA	1:A:151:SER:HA	0.42	1.91	4	3
1:A:101:MET:O	1:A:130:LYS:HA	0.41	2.15	10	1
1:A:124:TYR:HA	1:A:130:LYS:O	0.41	2.16	1	1
1:A:111:ALA:HA	1:A:156:PHE:CE1	0.41	2.51	8	1
1:A:52:ASN:OD1	1:A:54:ASP:HB3	0.41	2.15	7	1
1:A:94:ALA:O	1:A:134:LYS:HG3	0.41	2.15	9	1
1:A:11:CYS:SG	1:A:76:ALA:HB1	0.41	2.56	4	1
1:A:94:ALA:HB3	1:A:134:LYS:HG2	0.40	1.93	6	1
1:A:146:VAL:O	1:A:149:VAL:HG22	0.40	2.15	7	1
1:A:13:HIS:HD2	1:A:75:THR:O	0.40	1.99	6	1
1:A:123:THR:HB	1:A:132:THR:OG1	0.40	2.17	10	1
1:A:21:ALA:HB3	1:A:61:LYS:HB3	0.40	1.93	3	1
1:A:65:PRO:HD2	1:A:112:ALA:HB2	0.40	1.92	7	1
1:A:10:SER:HB2	1:A:80:CYS:CB	0.40	2.45	4	1
1:A:47:THR:CG2	1:A:63:GLY:HA2	0.40	2.47	9	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	156/161 (97%)	140±2 (90±1%)	12±1 (8±1%)	4±1 (2±1%)	10	49
All	All	1560/1610 (97%)	1400 (90%)	125 (8%)	35 (2%)	10	49

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

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	64	LYS	10
1	A	6	LYS	9
1	A	160	GLY	7
1	A	63	GLY	4
1	A	16	ASN	2
1	A	158	ASP	2
1	A	13	HIS	1

### 6.3.2 Protein sidechains [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	129/133 (97%)	118±1 (91±1%)	11±1 (9±1%)	14	61
All	All	1290/1330 (97%)	1179 (91%)	111 (9%)	14	61

All 20 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	12	VAL	10
1	A	49	PHE	10
1	A	60	VAL	10
1	A	96	ASP	10
1	A	105	GLN	10
1	A	28	VAL	9
1	A	89	VAL	9
1	A	125	ASN	9
1	A	144	ARG	9
1	A	109	CYS	6
1	A	51	TYR	5

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	108	ASP	4
1	A	35	GLN	2
1	A	15	ASP	2
1	A	77	SER	1
1	A	134	LYS	1
1	A	104	SER	1
1	A	26	GLU	1
1	A	130	LYS	1
1	A	155	GLN	1

### 6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

### 6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no monosaccharides in this entry.

### 6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

### 6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

### 6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

## 7 Chemical shift validation i

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 91% for the well-defined parts and 91% for the entire structure.

### 7.1 Chemical shift list 1

File name: working\_cs.cif

Chemical shift list name: new\_1.str.csh

#### 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	1772
Number of shifts mapped to atoms	1772
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	3

#### 7.1.2 Chemical shift referencing i

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction $\pm$ precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	160	0.26 $\pm$ 0.12	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}_\beta$	146	0.22 $\pm$ 0.13	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}'$	154	0.25 $\pm$ 0.10	None needed (< 0.5 ppm)
$^{15}\text{N}$	150	0.18 $\pm$ 0.46	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 91%, i.e. 1742 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1908. 0 out of 16 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	$^1\text{H}$	$^{13}\text{C}$	$^{15}\text{N}$
Backbone	775/785 (99%)	318/321 (99%)	309/314 (98%)	148/150 (99%)
Sidechain	873/982 (89%)	589/632 (93%)	273/314 (87%)	11/36 (31%)

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

	Total	<sup>1</sup> H	<sup>13</sup> C	<sup>15</sup> N
Aromatic	94/141 (67%)	46/71 (65%)	48/65 (74%)	0/5 (0%)
Overall	1742/1908 (91%)	953/1024 (93%)	630/693 (91%)	159/191 (83%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 91%, i.e. 1772 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1948. 0 out of 16 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	<sup>1</sup> H	<sup>13</sup> C	<sup>15</sup> N
Backbone	787/803 (98%)	323/328 (98%)	314/322 (98%)	150/153 (98%)
Sidechain	891/1004 (89%)	601/646 (93%)	279/322 (87%)	11/36 (31%)
Aromatic	94/141 (67%)	46/71 (65%)	48/65 (74%)	0/5 (0%)
Overall	1772/1948 (91%)	970/1045 (93%)	641/709 (90%)	161/194 (83%)

#### 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.

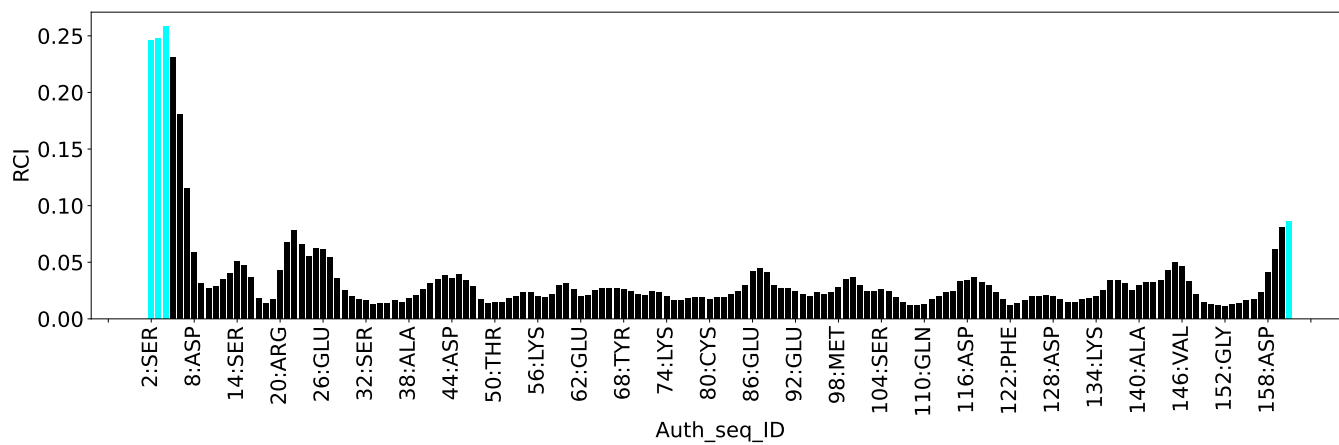
List Id	Chain	Res	Type	Atom	Shift, ppm	Expected range, ppm	Z-score
1	A	61	LYS	HB2	0.14	0.58 – 2.97	-6.9
1	A	78	ARG	HD2	1.79	1.97 – 4.26	-5.8
1	A	78	ARG	HB2	0.38	0.52 – 3.08	-5.5

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

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

Random coil index (RCI) for chain A:





## 8 NMR restraints analysis

### 8.1 Conformationally restricting restraints

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

Description	Value
Total distance restraints	3572
Intra-residue ( $ i-j =0$ )	1134
Sequential ( $ i-j =1$ )	731
Medium range ( $ i-j >1$ and $ i-j <5$ )	472
Long range ( $ i-j \geq 5$ )	1207
Inter-chain	0
Hydrogen bond restraints	22
Disulfide bond restraints	6
Total dihedral-angle restraints	190
Number of unmapped restraints	0
Number of restraints per residue	23.4
Number of long range restraints per residue <sup>1</sup>	7.5

<sup>1</sup>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

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

#### 8.2.1 Average number of distance violations per model

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

Bins (Å)	Average number of violations per model	Max (Å)
0.1-0.2 (Small)	97.9	0.2
0.2-0.5 (Medium)	95.2	0.5
>0.5 (Large)	96.4	2.72

### 8.2.2 Average number of dihedral-angle violations per model

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)	15.8	8.0
10.0-20.0 (Medium)	None	None
>20.0 (Large)	None	None

## 9 Distance violation analysis

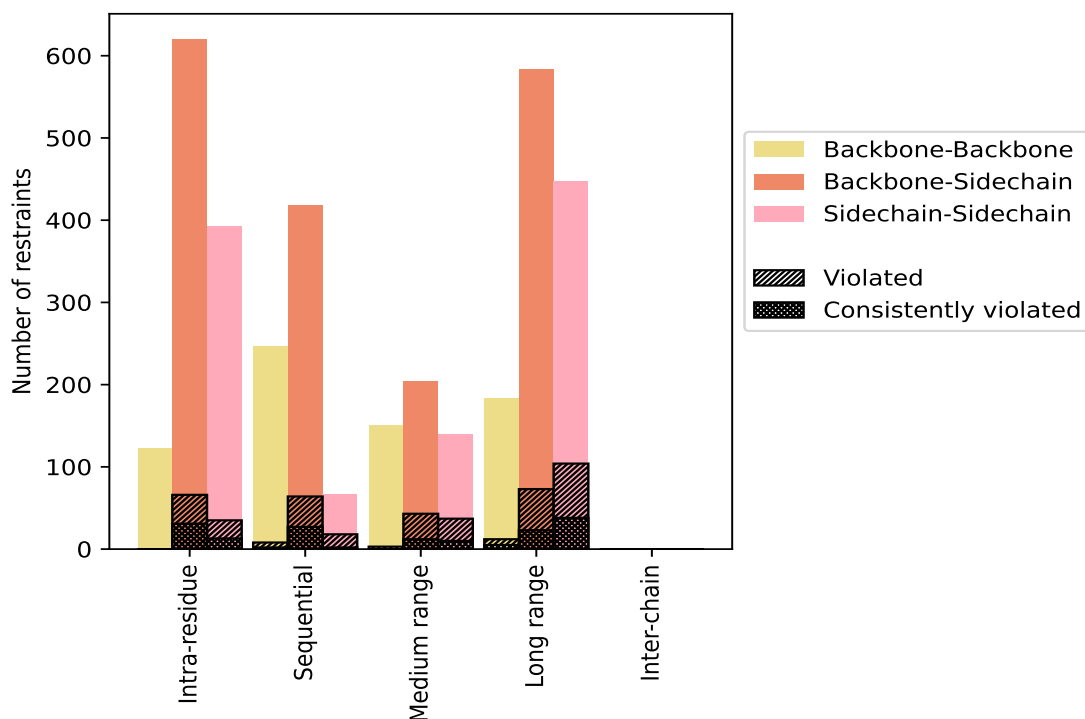
### 9.1 Summary of distance violations

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

Restrains type	Count	% <sup>1</sup>	Violated <sup>3</sup>			Consistently Violated <sup>4</sup>		
			Count	% <sup>2</sup>	% <sup>1</sup>	Count	% <sup>2</sup>	% <sup>1</sup>
<b>Intra-residue (<math> i-j =0</math>)</b>	<b>1134</b>	<b>31.7</b>	<b>101</b>	<b>8.9</b>	<b>2.8</b>	<b>44</b>	<b>3.9</b>	<b>1.2</b>
Backbone-Backbone	122	3.4	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	620	17.4	66	10.6	1.8	31	5.0	0.9
Sidechain-Sidechain	392	11.0	35	8.9	1.0	13	3.3	0.4
<b>Sequential (<math> i-j =1</math>)</b>	<b>731</b>	<b>20.5</b>	<b>90</b>	<b>12.3</b>	<b>2.5</b>	<b>31</b>	<b>4.2</b>	<b>0.9</b>
Backbone-Backbone	247	6.9	8	3.2	0.2	2	0.8	0.1
Backbone-Sidechain	418	11.7	64	15.3	1.8	27	6.5	0.8
Sidechain-Sidechain	66	1.8	18	27.3	0.5	2	3.0	0.1
<b>Medium range (<math> i-j &gt;1</math> &amp; <math> i-j &lt;5</math>)</b>	<b>472</b>	<b>13.2</b>	<b>83</b>	<b>17.6</b>	<b>2.3</b>	<b>22</b>	<b>4.7</b>	<b>0.6</b>
Backbone-Backbone	128	3.6	3	2.3	0.1	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	204	5.7	43	21.1	1.2	12	5.9	0.3
Sidechain-Sidechain	140	3.9	37	26.4	1.0	10	7.1	0.3
<b>Long range (<math> i-j \geq 5</math>)</b>	<b>1207</b>	<b>33.8</b>	<b>189</b>	<b>15.7</b>	<b>5.3</b>	<b>66</b>	<b>5.5</b>	<b>1.8</b>
Backbone-Backbone	183	5.1	12	6.6	0.3	5	2.7	0.1
Backbone-Sidechain	583	16.3	73	12.5	2.0	23	3.9	0.6
Sidechain-Sidechain	441	12.3	104	23.6	2.9	38	8.6	1.1
<b>Inter-chain</b>	<b>0</b>	<b>0.0</b>	<b>0</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>	<b>0</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>
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
<b>Hydrogen bond</b>	<b>22</b>	<b>0.6</b>	<b>0</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>	<b>0</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>
<b>Disulfide bond</b>	<b>6</b>	<b>0.2</b>	<b>0</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>	<b>0</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>
<b>Total</b>	<b>3572</b>	<b>100.0</b>	<b>463</b>	<b>13.0</b>	<b>13.0</b>	<b>163</b>	<b>4.6</b>	<b>4.6</b>
Backbone-Backbone	702	19.7	23	3.3	0.6	7	1.0	0.2
Backbone-Sidechain	1825	51.1	246	13.5	6.9	93	5.1	2.6
Sidechain-Sidechain	1045	29.3	194	18.6	5.4	63	6.0	1.8

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

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



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

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

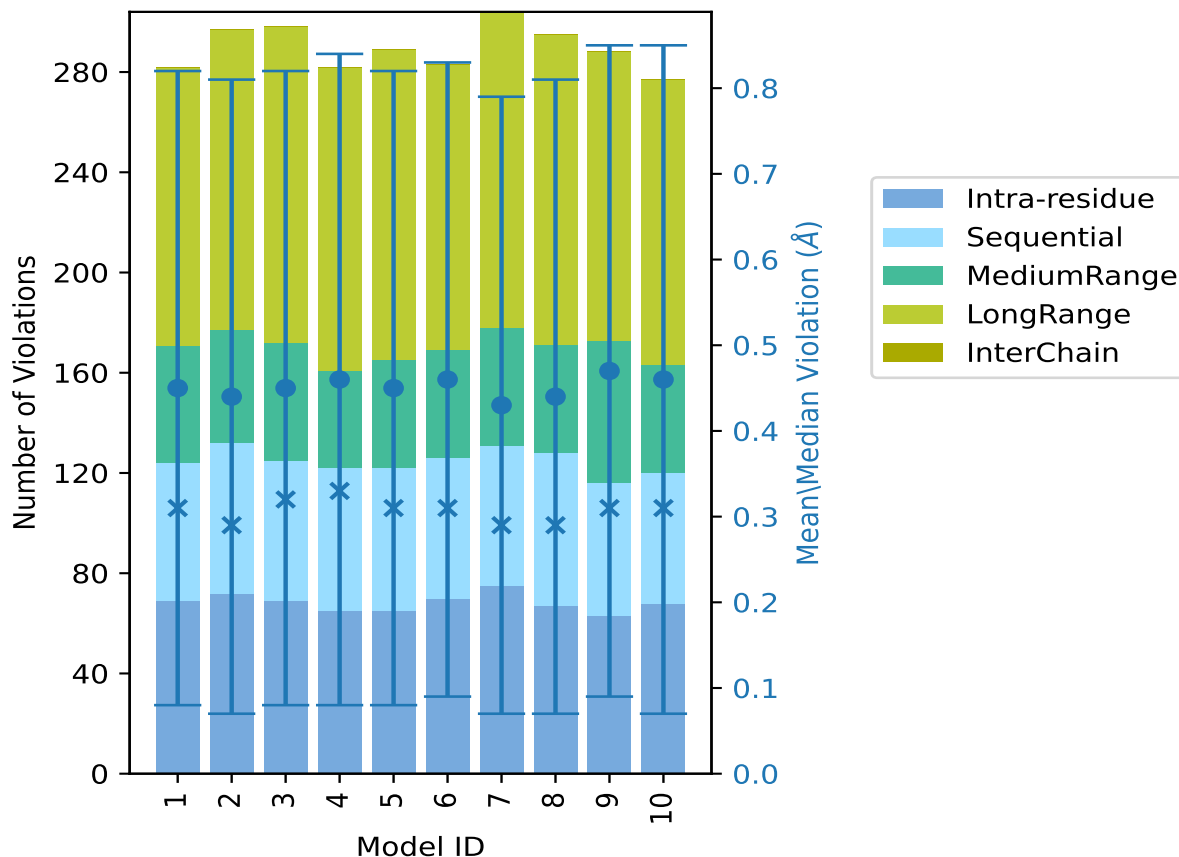
The following table provides the distance violation statistics for each model in the ensemble. Violations less than 0.1 Å are not included in the statistics.

Model ID	Number of violations						Mean (Å)	Max (Å)	SD <sup>6</sup> (Å)	Median (Å)
	IR <sup>1</sup>	SQ <sup>2</sup>	MR <sup>3</sup>	LR <sup>4</sup>	IC <sup>5</sup>	Total				
1	69	55	47	111	0	282	0.45	2.4	0.37	0.31
2	72	60	45	120	0	297	0.44	1.95	0.37	0.29
3	69	56	47	126	0	298	0.45	1.86	0.37	0.32
4	65	57	39	121	0	282	0.46	1.99	0.38	0.33
5	65	57	43	124	0	289	0.45	1.99	0.37	0.31
6	70	56	43	114	0	283	0.46	2.17	0.37	0.31
7	75	56	47	126	0	304	0.43	1.82	0.36	0.29
8	67	61	43	124	0	295	0.44	2.14	0.37	0.29
9	63	53	57	115	0	288	0.47	1.72	0.38	0.31
10	68	52	43	114	0	277	0.46	2.72	0.39	0.31

<sup>1</sup>Intra-residue restraints, <sup>2</sup>Sequential restraints, <sup>3</sup>Medium range restraints, <sup>4</sup>Long range restraints,

<sup>5</sup>Inter-chain restraints, <sup>6</sup>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, 3081(IR:1033, SQ:641, MR:389, LR:1018, IC:0) restraints are not violated in the ensemble.

Number of violated restraints						Fraction of the ensemble	
IR <sup>1</sup>	SQ <sup>2</sup>	MR <sup>3</sup>	LR <sup>4</sup>	IC <sup>5</sup>	Total	Count <sup>6</sup>	%
17	16	19	33	0	85	1	10.0
9	8	12	17	0	46	2	20.0
4	4	4	11	0	23	3	30.0
2	4	3	5	0	14	4	40.0

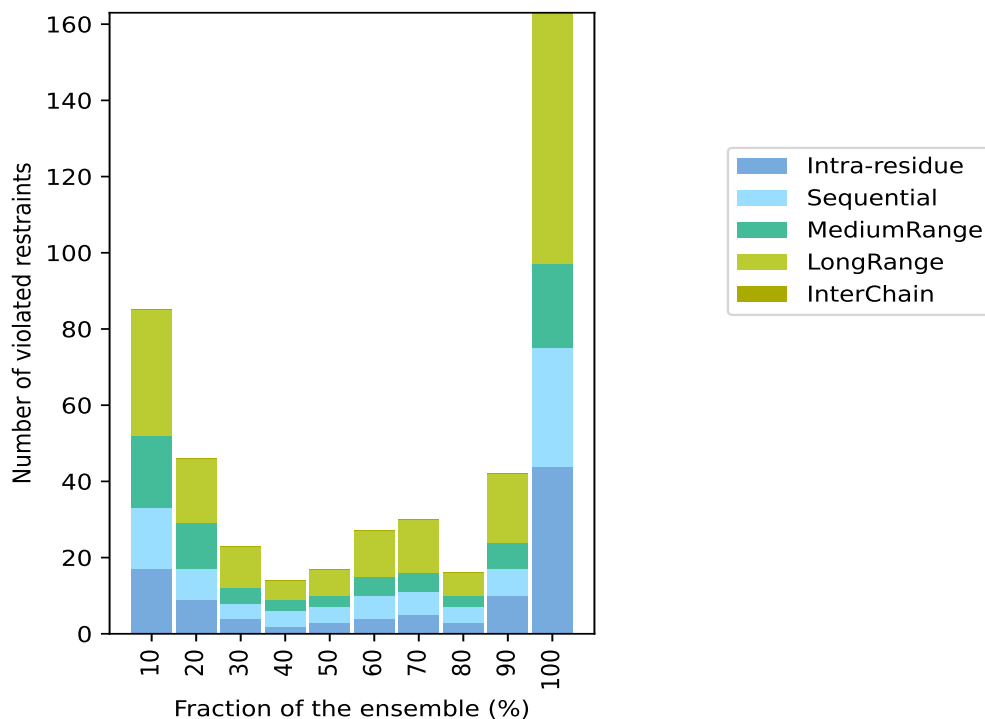
*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Number of violated restraints						Fraction of the ensemble	
IR <sup>1</sup>	SQ <sup>2</sup>	MR <sup>3</sup>	LR <sup>4</sup>	IC <sup>5</sup>	Total	Count <sup>6</sup>	%
3	4	3	7	0	17	5	50.0
4	6	5	12	0	27	6	60.0
5	6	5	14	0	30	7	70.0
3	4	3	6	0	16	8	80.0
10	7	7	18	0	42	9	90.0
44	31	22	66	0	163	10	100.0

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

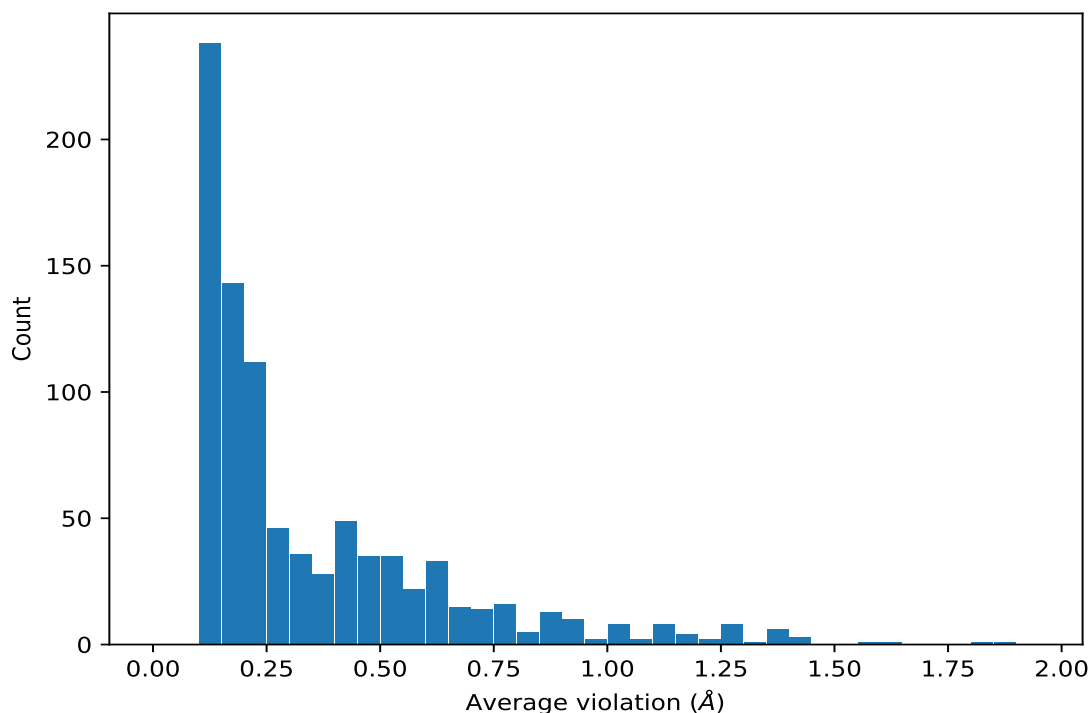
### 9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble [i](#)



## 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 <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)	Median (Å)
(1,535)	1:A:4:PRO:HD3	1:A:35:GLN:HB3	10	1.88	0.27	1.88
(1,1405)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:145:GLY:HA3	10	1.84	0.11	1.8
(1,1191)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:61:LYS:HG2	10	1.44	0.06	1.46
(1,973)	1:A:85:PHE:HB3	1:A:82:ARG:HB2	10	1.44	0.09	1.45
(1,1081)	1:A:4:PRO:HB3	1:A:32:SER:HB3	10	1.42	0.21	1.36
(1,1278)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:77:SER:H	10	1.36	0.18	1.46
(1,1131)	1:A:57:MET:HG2	1:A:59:HIS:HB3	10	1.36	0.03	1.36
(1,1131)	1:A:57:MET:HG3	1:A:59:HIS:HB3	10	1.36	0.03	1.36
(1,1852)	1:A:60:VAL:H	1:A:27:PRO:HG2	10	1.36	0.05	1.36
(1,1414)	1:A:134:LYS:HG3	1:A:96:ASP:HB2	10	1.35	0.46	1.2
(1,2275)	1:A:40:CYS:H	1:A:41:LYS:HB3	10	1.35	0.01	1.35
(1,152)	1:A:40:CYS:HA	1:A:39:GLN:HG2	10	1.32	0.04	1.33
(1,1374)	1:A:27:PRO:HG2	1:A:23:THR:HB	10	1.28	0.12	1.26
(1,2981)	1:A:41:LYS:HD3	1:A:38:ALA:H	10	1.27	0.09	1.26
(1,2981)	1:A:40:CYS:H	1:A:41:LYS:HD3	10	1.27	0.09	1.26
(1,2698)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:74:LYS:HB3	10	1.27	0.05	1.25

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Models <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)	Median (Å)
(1,2698)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:52:ASN:HB2	10	1.27	0.05	1.25
(1,437)	1:A:38:ALA:HA	1:A:41:LYS:HB3	10	1.25	0.05	1.24
(1,1819)	1:A:53:ASP:H	1:A:74:LYS:HB3	10	1.21	0.09	1.22
(1,1183)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:58:CYS:HA	10	1.2	0.01	1.2
(1,1297)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:76:ALA:HB2	10	1.16	0.13	1.19
(1,1297)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:76:ALA:HB1	10	1.16	0.13	1.19
(1,1297)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:76:ALA:HB3	10	1.16	0.13	1.19
(1,118)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:52:ASN:HA	10	1.13	0.08	1.11
(1,1454)	1:A:78:ARG:HG3	1:A:156:PHE:HZ	10	1.1	0.19	1.16
(1,1279)	1:A:105:GLN:HG3	1:A:67:LEU:HD12	10	1.1	0.07	1.11
(1,1279)	1:A:105:GLN:HG3	1:A:67:LEU:HD11	10	1.1	0.07	1.11
(1,1279)	1:A:105:GLN:HG3	1:A:67:LEU:HD13	10	1.1	0.07	1.11
(1,1233)	1:A:146:VAL:HB	1:A:88:HIS:HB2	10	1.05	0.03	1.05
(1,1437)	1:A:7:LEU:HG	1:A:32:SER:HB3	10	1.0	0.12	1.06
(1,3274)	1:A:67:LEU:H	1:A:17:LYS:HE2	10	1.0	0.28	0.88
(1,3274)	1:A:67:LEU:H	1:A:68:TYR:HB2	10	1.0	0.28	0.88
(1,2923)	1:A:39:GLN:HG2	1:A:41:LYS:H	10	0.97	0.04	0.98
(1,2923)	1:A:39:GLN:HG2	1:A:42:ALA:H	10	0.97	0.04	0.98
(1,3019)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:9:LEU:HD12	10	0.92	0.02	0.92
(1,3019)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:9:LEU:HD11	10	0.92	0.02	0.92
(1,3019)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:9:LEU:HD13	10	0.92	0.02	0.92
(1,3019)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:35:GLN:HB2	10	0.92	0.02	0.92
(1,3019)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:35:GLN:HB2	10	0.92	0.02	0.92
(1,3019)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:35:GLN:HB2	10	0.92	0.02	0.92
(1,1545)	1:A:61:LYS:HG2	1:A:60:VAL:HA	10	0.91	0.1	0.94
(1,1129)	1:A:39:GLN:HG2	1:A:40:CYS:H	10	0.89	0.03	0.89
(1,1624)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG21	10	0.89	0.05	0.89
(1,1624)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG22	10	0.89	0.05	0.89
(1,1624)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG23	10	0.89	0.05	0.89
(1,171)	1:A:12:VAL:HG22	1:A:74:LYS:HB2	10	0.89	0.03	0.89
(1,171)	1:A:12:VAL:HG21	1:A:74:LYS:HB2	10	0.89	0.03	0.89
(1,171)	1:A:12:VAL:HG23	1:A:74:LYS:HB2	10	0.89	0.03	0.89
(1,780)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HB3	10	0.87	0.0	0.87
(1,74)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:31:VAL:HA	10	0.86	0.1	0.92
(1,1173)	1:A:117:PRO:HD2	1:A:117:PRO:HB2	10	0.84	0.02	0.84
(1,1869)	1:A:7:LEU:H	1:A:7:LEU:HB3	10	0.82	0.02	0.82
(1,1396)	1:A:95:PRO:HG2	1:A:95:PRO:HA	10	0.8	0.03	0.79
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:89:VAL:H	10	0.79	0.16	0.84
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:91:TYR:HD1	10	0.79	0.16	0.84
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:91:TYR:HD2	10	0.79	0.16	0.84
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:142:LYS:H	10	0.79	0.16	0.84
(1,438)	1:A:38:ALA:HA	1:A:41:LYS:HD3	10	0.78	0.1	0.74

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)	Median (Å)
(1,1954)	1:A:144:ARG:H	1:A:142:LYS:HG3	10	0.76	0.25	0.74
(1,678)	1:A:20:ARG:HD2	1:A:20:ARG:HA	10	0.75	0.04	0.76
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:57:MET:HG2	10	0.75	0.05	0.76
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:57:MET:HG3	10	0.75	0.05	0.76
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:57:MET:HG2	10	0.75	0.05	0.76
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:57:MET:HG3	10	0.75	0.05	0.76
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:57:MET:HG2	10	0.75	0.05	0.76
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:57:MET:HG3	10	0.75	0.05	0.76
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:39:GLN:HG3	10	0.75	0.05	0.76
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:39:GLN:HG3	10	0.75	0.05	0.76
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:39:GLN:HG3	10	0.75	0.05	0.76
(1,594)	1:A:70:LEU:HB2	1:A:73:GLY:HA2	10	0.73	0.11	0.77
(1,2509)	1:A:130:LYS:HB3	1:A:102:VAL:HA	10	0.72	0.02	0.73
(1,2509)	1:A:130:LYS:HD2	1:A:102:VAL:HA	10	0.72	0.02	0.73
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG21	10	0.71	0.05	0.72
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG22	10	0.71	0.05	0.72
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG23	10	0.71	0.05	0.72
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:61:LYS:HD2	10	0.71	0.05	0.72
(1,1404)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:146:VAL:H	10	0.71	0.04	0.72
(1,1015)	1:A:121:ILE:H	1:A:120:GLU:HG3	10	0.7	0.05	0.68
(1,1703)	1:A:27:PRO:HA	1:A:27:PRO:HG2	10	0.69	0.01	0.69
(1,550)	1:A:53:ASP:H	1:A:73:GLY:HA3	10	0.69	0.06	0.68
(1,724)	1:A:8:ASP:H	1:A:7:LEU:HB2	10	0.69	0.07	0.69
(1,2212)	1:A:17:LYS:H	1:A:17:LYS:HG3	10	0.68	0.07	0.66
(1,3142)	1:A:47:THR:HG21	1:A:62:GLU:HB2	10	0.68	0.02	0.69
(1,3142)	1:A:47:THR:HG22	1:A:62:GLU:HB2	10	0.68	0.02	0.69
(1,3142)	1:A:47:THR:HG23	1:A:62:GLU:HB2	10	0.68	0.02	0.69
(1,3142)	1:A:47:THR:HG21	1:A:62:GLU:HG2	10	0.68	0.02	0.69
(1,3142)	1:A:47:THR:HG22	1:A:62:GLU:HG2	10	0.68	0.02	0.69
(1,3142)	1:A:47:THR:HG23	1:A:62:GLU:HG2	10	0.68	0.02	0.69
(1,638)	1:A:122:PHE:HB2	1:A:113:CYS:HB3	10	0.66	0.05	0.66
(1,2288)	1:A:41:LYS:H	1:A:41:LYS:HB3	10	0.66	0.01	0.66
(1,677)	1:A:20:ARG:HD2	1:A:68:TYR:HE1	10	0.66	0.06	0.68
(1,677)	1:A:20:ARG:HD2	1:A:68:TYR:HE2	10	0.66	0.06	0.68
(1,1240)	1:A:78:ARG:HB2	1:A:47:THR:HA	10	0.65	0.12	0.66
(1,615)	1:A:146:VAL:H	1:A:145:GLY:HA3	10	0.64	0.01	0.64
(1,2097)	1:A:127:HIS:H	1:A:125:ASN:HD22	10	0.63	0.1	0.63
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG22	10	0.63	0.03	0.64
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG21	10	0.63	0.03	0.64
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG23	10	0.63	0.03	0.64
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG12	10	0.63	0.03	0.64
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG11	10	0.63	0.03	0.64

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Models <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)	Median (Å)
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG13	10	0.63	0.03	0.64
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:33:LEU:HD22	10	0.63	0.03	0.64
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:33:LEU:HD21	10	0.63	0.03	0.64
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:33:LEU:HD23	10	0.63	0.03	0.64
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD22	10	0.63	0.03	0.64
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD21	10	0.63	0.03	0.64
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD23	10	0.63	0.03	0.64
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD12	10	0.63	0.03	0.64
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD11	10	0.63	0.03	0.64
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD13	10	0.63	0.03	0.64
(1,1187)	1:A:60:VAL:H	1:A:59:HIS:HB2	10	0.62	0.01	0.62
(1,3012)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:32:SER:HB2	10	0.62	0.03	0.62
(1,3012)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:35:GLN:HA	10	0.62	0.03	0.62
(1,339)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:88:HIS:HB2	10	0.62	0.04	0.62
(1,339)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:88:HIS:HB2	10	0.62	0.04	0.62
(1,339)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:88:HIS:HB2	10	0.62	0.04	0.62
(1,1323)	1:A:34:GLU:H	1:A:34:GLU:HB3	10	0.62	0.01	0.62
(1,1186)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:50:THR:HG21	10	0.61	0.13	0.55
(1,1186)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:50:THR:HG22	10	0.61	0.13	0.55
(1,1186)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:50:THR:HG23	10	0.61	0.13	0.55
(1,1154)	1:A:118:SER:H	1:A:117:PRO:HB3	10	0.58	0.03	0.58
(1,2761)	1:A:49:PHE:HB2	1:A:39:GLN:HB2	10	0.58	0.06	0.57
(1,2761)	1:A:49:PHE:HB2	1:A:39:GLN:HG2	10	0.58	0.06	0.57
(1,2761)	1:A:49:PHE:HB2	1:A:39:GLN:HG3	10	0.58	0.06	0.57
(1,2761)	1:A:61:LYS:HE3	1:A:62:GLU:HG3	10	0.58	0.06	0.57
(1,2960)	1:A:78:ARG:HB2	1:A:40:CYS:HA	10	0.58	0.06	0.6
(1,2960)	1:A:78:ARG:HB2	1:A:77:SER:HA	10	0.58	0.06	0.6
(1,1918)	1:A:105:GLN:H	1:A:105:GLN:HE22	10	0.57	0.15	0.64
(1,1947)	1:A:69:ASP:H	1:A:68:TYR:HB3	10	0.56	0.07	0.56
(1,2777)	1:A:17:LYS:HE3	1:A:18:GLY:H	10	0.55	0.17	0.51
(1,2777)	1:A:142:LYS:HE3	1:A:144:ARG:H	10	0.55	0.17	0.51
(1,908)	1:A:130:LYS:HB3	1:A:129:GLN:H	10	0.55	0.16	0.5
(1,1206)	1:A:27:PRO:HD2	1:A:27:PRO:HB3	10	0.54	0.01	0.55
(1,1324)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:35:GLN:H	10	0.54	0.06	0.54
(1,1803)	1:A:87:GLN:H	1:A:87:GLN:HB3	10	0.54	0.03	0.55
(1,1663)	1:A:149:VAL:HG12	1:A:148:GLY:HA2	10	0.53	0.03	0.52
(1,1663)	1:A:149:VAL:HG11	1:A:148:GLY:HA2	10	0.53	0.03	0.52
(1,1663)	1:A:149:VAL:HG13	1:A:148:GLY:HA2	10	0.53	0.03	0.52
(1,1061)	1:A:35:GLN:HE22	1:A:35:GLN:HG3	10	0.53	0.14	0.63
(1,1570)	1:A:74:LYS:HG2	1:A:74:LYS:HB2	10	0.52	0.0	0.52
(1,1672)	1:A:147:LEU:HB2	1:A:147:LEU:HD22	10	0.52	0.0	0.52
(1,1672)	1:A:147:LEU:HB2	1:A:147:LEU:HD21	10	0.52	0.0	0.52

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Models <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)	Median (Å)
(1,1672)	1:A:147:LEU:HB2	1:A:147:LEU:HD23	10	0.52	0.0	0.52
(1,2634)	1:A:111:ALA:HB2	1:A:78:ARG:HG3	10	0.52	0.06	0.53
(1,2634)	1:A:111:ALA:HB1	1:A:78:ARG:HG3	10	0.52	0.06	0.53
(1,2634)	1:A:111:ALA:HB3	1:A:78:ARG:HG3	10	0.52	0.06	0.53
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:111:ALA:HB2	10	0.52	0.06	0.53
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:111:ALA:HB1	10	0.52	0.06	0.53
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:111:ALA:HB3	10	0.52	0.06	0.53
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:111:ALA:HB2	10	0.52	0.06	0.53
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:111:ALA:HB1	10	0.52	0.06	0.53
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:111:ALA:HB3	10	0.52	0.06	0.53
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:111:ALA:HB2	10	0.52	0.06	0.53
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:111:ALA:HB1	10	0.52	0.06	0.53
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:111:ALA:HB3	10	0.52	0.06	0.53
(1,2679)	1:A:22:PRO:HD3	1:A:62:GLU:HB3	10	0.51	0.02	0.51
(1,2679)	1:A:22:PRO:HD3	1:A:22:PRO:HB3	10	0.51	0.02	0.51
(1,1825)	1:A:85:PHE:H	1:A:85:PHE:HB3	10	0.51	0.01	0.51
(1,1406)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:147:LEU:HD22	10	0.5	0.21	0.48
(1,1406)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:147:LEU:HD21	10	0.5	0.21	0.48
(1,1406)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:147:LEU:HD23	10	0.5	0.21	0.48
(1,1488)	1:A:41:LYS:H	1:A:41:LYS:HG2	10	0.5	0.04	0.5
(1,548)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:64:LYS:HB2	10	0.49	0.05	0.48
(1,548)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:64:LYS:HB3	10	0.49	0.05	0.48
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HB2	10	0.48	0.04	0.5
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HB3	10	0.48	0.04	0.5
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:28:VAL:HB	10	0.48	0.04	0.5
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:35:GLN:HB2	10	0.48	0.04	0.5
(1,2894)	1:A:80:CYS:HB2	1:A:9:LEU:HB3	10	0.48	0.04	0.5
(1,2124)	1:A:68:TYR:H	1:A:67:LEU:HB2	10	0.48	0.02	0.48
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:92:GLU:HG2	10	0.48	0.08	0.5
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:92:GLU:HG3	10	0.48	0.08	0.5
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:92:GLU:HG2	10	0.48	0.08	0.5
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:92:GLU:HG3	10	0.48	0.08	0.5
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:92:GLU:HG2	10	0.48	0.08	0.5
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:92:GLU:HG3	10	0.48	0.08	0.5
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:126:GLU:HG2	10	0.48	0.08	0.5
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:126:GLU:HG2	10	0.48	0.08	0.5
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:126:GLU:HG2	10	0.48	0.08	0.5
(1,2106)	1:A:42:ALA:H	1:A:41:LYS:HB3	10	0.47	0.08	0.47
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD22	1:A:4:PRO:HD3	10	0.45	0.16	0.42
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD21	1:A:4:PRO:HD3	10	0.45	0.16	0.42
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD23	1:A:4:PRO:HD3	10	0.45	0.16	0.42
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD12	1:A:4:PRO:HD3	10	0.45	0.16	0.42

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Models <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)	Median (Å)
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD11	1:A:4:PRO:HD3	10	0.45	0.16	0.42
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD13	1:A:4:PRO:HD3	10	0.45	0.16	0.42
(1,581)	1:A:148:GLY:HA2	1:A:125:ASN:HA	10	0.45	0.08	0.45
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:38:ALA:HB2	10	0.44	0.01	0.44
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:38:ALA:HB1	10	0.44	0.01	0.44
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:38:ALA:HB3	10	0.44	0.01	0.44
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:41:LYS:HG2	10	0.44	0.01	0.44
(1,2948)	1:A:27:PRO:HD3	1:A:27:PRO:HB3	10	0.43	0.01	0.43
(1,2948)	1:A:27:PRO:HB3	1:A:29:PRO:HD3	10	0.43	0.01	0.43
(1,1925)	1:A:43:VAL:H	1:A:41:LYS:HB3	10	0.42	0.04	0.43
(1,195)	1:A:126:GLU:HA	1:A:126:GLU:HG3	10	0.42	0.04	0.42
(1,1270)	1:A:98:MET:HG2	1:A:133:PHE:HD1	10	0.42	0.03	0.42
(1,1270)	1:A:98:MET:HG2	1:A:133:PHE:HD2	10	0.42	0.03	0.42
(1,3264)	1:A:96:ASP:H	1:A:134:LYS:HB3	10	0.42	0.06	0.44
(1,3264)	1:A:96:ASP:H	1:A:95:PRO:HG2	10	0.42	0.06	0.44
(1,2929)	1:A:22:PRO:HB3	1:A:24:ILE:H	10	0.41	0.03	0.4
(1,2929)	1:A:62:GLU:HB3	1:A:47:THR:H	10	0.41	0.03	0.4
(1,2929)	1:A:135:GLY:H	1:A:97:VAL:HB	10	0.41	0.03	0.4
(1,1401)	1:A:88:HIS:HB3	1:A:89:VAL:HG12	10	0.41	0.04	0.4
(1,1401)	1:A:88:HIS:HB3	1:A:89:VAL:HG11	10	0.41	0.04	0.4
(1,1401)	1:A:88:HIS:HB3	1:A:89:VAL:HG13	10	0.41	0.04	0.4
(1,3323)	1:A:116:ASP:H	1:A:98:MET:HG2	10	0.4	0.1	0.43
(1,3323)	1:A:116:ASP:H	1:A:117:PRO:HG2	10	0.4	0.1	0.43
(1,3323)	1:A:116:ASP:H	1:A:117:PRO:HG3	10	0.4	0.1	0.43
(1,295)	1:A:28:VAL:HG22	1:A:39:GLN:HG3	10	0.4	0.03	0.4
(1,295)	1:A:28:VAL:HG21	1:A:39:GLN:HG3	10	0.4	0.03	0.4
(1,295)	1:A:28:VAL:HG23	1:A:39:GLN:HG3	10	0.4	0.03	0.4
(1,295)	1:A:28:VAL:HG12	1:A:39:GLN:HG3	10	0.4	0.03	0.4
(1,295)	1:A:28:VAL:HG11	1:A:39:GLN:HG3	10	0.4	0.03	0.4
(1,295)	1:A:28:VAL:HG13	1:A:39:GLN:HG3	10	0.4	0.03	0.4
(1,1182)	1:A:59:HIS:H	1:A:59:HIS:HB3	10	0.39	0.01	0.4
(1,2930)	1:A:22:PRO:HD2	1:A:22:PRO:HB3	10	0.39	0.03	0.4
(1,2930)	1:A:22:PRO:HD2	1:A:62:GLU:HB3	10	0.39	0.03	0.4
(1,3441)	1:A:40:CYS:H	1:A:49:PHE:HB2	10	0.39	0.06	0.38
(1,3441)	1:A:40:CYS:H	1:A:60:VAL:HB	10	0.39	0.06	0.38
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB3	1:A:23:THR:HG21	10	0.38	0.1	0.38
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB3	1:A:23:THR:HG22	10	0.38	0.1	0.38
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB3	1:A:23:THR:HG23	10	0.38	0.1	0.38
(1,2976)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:98:MET:HG2	10	0.38	0.1	0.38
(1,2976)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:98:MET:HG2	10	0.38	0.1	0.38
(1,2976)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:98:MET:HG2	10	0.38	0.1	0.38
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB2	1:A:23:THR:HG21	10	0.38	0.1	0.38

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Models <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)	Median (Å)
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB2	1:A:23:THR:HG22	10	0.38	0.1	0.38
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB2	1:A:23:THR:HG23	10	0.38	0.1	0.38
(1,722)	1:A:7:LEU:HB3	1:A:34:GLU:HG2	10	0.37	0.09	0.38
(1,1211)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:59:HIS:HA	10	0.35	0.03	0.35
(1,693)	1:A:67:LEU:H	1:A:67:LEU:HB3	10	0.34	0.01	0.35
(1,1308)	1:A:87:GLN:HG2	1:A:87:GLN:HB2	10	0.34	0.01	0.35
(1,631)	1:A:123:THR:H	1:A:122:PHE:HB3	10	0.34	0.05	0.32
(1,748)	1:A:96:ASP:H	1:A:96:ASP:HB3	10	0.34	0.09	0.36
(1,824)	1:A:125:ASN:HD22	1:A:125:ASN:HB3	10	0.34	0.07	0.36
(1,702)	1:A:61:LYS:HE2	1:A:19:SER:H	10	0.33	0.13	0.26
(1,396)	1:A:107:ALA:HB2	1:A:77:SER:HB2	10	0.33	0.15	0.3
(1,396)	1:A:107:ALA:HB1	1:A:77:SER:HB2	10	0.33	0.15	0.3
(1,396)	1:A:107:ALA:HB3	1:A:77:SER:HB2	10	0.33	0.15	0.3
(1,416)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:62:GLU:HB3	10	0.32	0.06	0.34
(1,416)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:62:GLU:HB3	10	0.32	0.06	0.34
(1,416)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:62:GLU:HB3	10	0.32	0.06	0.34
(1,698)	1:A:67:LEU:HB2	1:A:68:TYR:HA	10	0.31	0.03	0.3
(1,1292)	1:A:32:SER:HB2	1:A:35:GLN:HB3	10	0.3	0.08	0.28
(1,2704)	1:A:116:ASP:HB2	1:A:112:ALA:HA	10	0.3	0.04	0.3
(1,2704)	1:A:117:PRO:HD3	1:A:116:ASP:HB2	10	0.3	0.04	0.3
(1,1378)	1:A:117:PRO:HB2	1:A:117:PRO:HA	10	0.3	0.01	0.3
(1,1394)	1:A:95:PRO:HG3	1:A:95:PRO:HB2	10	0.29	0.0	0.29
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:22:PRO:HB3	10	0.29	0.04	0.28
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:22:PRO:HB3	10	0.29	0.04	0.28
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:22:PRO:HB3	10	0.29	0.04	0.28
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:62:GLU:HG3	10	0.29	0.04	0.28
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:62:GLU:HG3	10	0.29	0.04	0.28
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:62:GLU:HG3	10	0.29	0.04	0.28
(1,825)	1:A:125:ASN:HD22	1:A:125:ASN:HB2	10	0.28	0.08	0.26
(1,2700)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:16:ASN:H	10	0.28	0.03	0.28
(1,2700)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:72:GLY:H	10	0.28	0.03	0.28
(1,913)	1:A:131:CYS:H	1:A:130:LYS:HB2	10	0.28	0.03	0.28
(1,517)	1:A:117:PRO:HD2	1:A:117:PRO:HA	10	0.27	0.01	0.27
(1,1027)	1:A:75:THR:HB	1:A:18:GLY:HA3	10	0.27	0.23	0.21
(1,1305)	1:A:88:HIS:H	1:A:87:GLN:HB2	10	0.27	0.08	0.29
(1,1239)	1:A:78:ARG:H	1:A:78:ARG:HB2	10	0.26	0.01	0.26
(1,459)	1:A:7:LEU:HA	1:A:7:LEU:HB2	10	0.25	0.0	0.25
(1,1767)	1:A:82:ARG:H	1:A:82:ARG:HB3	10	0.25	0.04	0.24
(1,1326)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:34:GLU:HA	10	0.25	0.01	0.25
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:6:LYS:HD2	10	0.25	0.07	0.24
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:56:LYS:HD2	10	0.25	0.07	0.24
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:56:LYS:HD3	10	0.25	0.07	0.24

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Models <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)	Median (Å)
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:57:MET:HB2	10	0.25	0.07	0.24
(1,3119)	1:A:6:LYS:HG2	1:A:53:ASP:H	10	0.24	0.06	0.24
(1,3119)	1:A:6:LYS:HG3	1:A:53:ASP:H	10	0.24	0.06	0.24
(1,2822)	1:A:52:ASN:HB3	1:A:57:MET:HB2	10	0.24	0.05	0.23
(1,2822)	1:A:68:TYR:HB3	1:A:17:LYS:HD3	10	0.24	0.05	0.23
(1,2822)	1:A:108:ASP:HB3	1:A:67:LEU:HG	10	0.24	0.05	0.23
(1,2822)	1:A:107:ALA:HB2	1:A:108:ASP:HB3	10	0.24	0.05	0.23
(1,2822)	1:A:107:ALA:HB1	1:A:108:ASP:HB3	10	0.24	0.05	0.23
(1,2822)	1:A:107:ALA:HB3	1:A:108:ASP:HB3	10	0.24	0.05	0.23
(1,3074)	1:A:78:ARG:HA	1:A:78:ARG:HG2	10	0.24	0.04	0.25
(1,3074)	1:A:78:ARG:HG2	1:A:79:SER:HB2	10	0.24	0.04	0.25
(1,127)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:88:HIS:HD2	10	0.24	0.03	0.23
(1,2784)	1:A:101:MET:H	1:A:130:LYS:HE2	10	0.24	0.09	0.24
(1,2784)	1:A:130:LYS:HE3	1:A:125:ASN:H	10	0.24	0.09	0.24
(1,2784)	1:A:101:MET:H	1:A:131:CYS:HB3	10	0.24	0.09	0.24
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:33:LEU:HA	10	0.24	0.03	0.24
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:33:LEU:HA	10	0.24	0.03	0.24
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:33:LEU:HA	10	0.24	0.03	0.24
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:36:CYS:HB2	10	0.24	0.03	0.24
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:36:CYS:HB2	10	0.24	0.03	0.24
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:36:CYS:HB2	10	0.24	0.03	0.24
(1,2636)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:122:PHE:HB2	10	0.24	0.03	0.24
(1,2636)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:122:PHE:HB2	10	0.24	0.03	0.24
(1,2636)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:122:PHE:HB2	10	0.24	0.03	0.24
(1,974)	1:A:86:GLU:H	1:A:85:PHE:HB2	10	0.23	0.03	0.24
(1,821)	1:A:52:ASN:HB3	1:A:51:TYR:HA	10	0.23	0.02	0.24
(1,1496)	1:A:70:LEU:HG	1:A:17:LYS:HA	10	0.23	0.02	0.23
(1,167)	1:A:150:THR:HG21	1:A:85:PHE:HB2	10	0.22	0.06	0.22
(1,167)	1:A:150:THR:HG22	1:A:85:PHE:HB2	10	0.22	0.06	0.22
(1,167)	1:A:150:THR:HG23	1:A:85:PHE:HB2	10	0.22	0.06	0.22
(1,717)	1:A:78:ARG:HD2	1:A:156:PHE:HD1	10	0.22	0.03	0.22
(1,717)	1:A:78:ARG:HD2	1:A:156:PHE:HD2	10	0.22	0.03	0.22
(1,1387)	1:A:55:SER:HA	1:A:55:SER:HB2	10	0.22	0.01	0.22
(1,2783)	1:A:131:CYS:H	1:A:130:LYS:HE2	10	0.22	0.03	0.23
(1,2783)	1:A:131:CYS:H	1:A:131:CYS:HB3	10	0.22	0.03	0.23
(1,3522)	1:A:105:GLN:HE21	1:A:105:GLN:HB3	10	0.21	0.07	0.17
(1,3522)	1:A:105:GLN:HE21	1:A:105:GLN:HG3	10	0.21	0.07	0.17
(1,495)	1:A:94:ALA:HB2	1:A:134:LYS:HA	10	0.2	0.03	0.21
(1,495)	1:A:94:ALA:HB1	1:A:134:LYS:HA	10	0.2	0.03	0.21
(1,495)	1:A:94:ALA:HB3	1:A:134:LYS:HA	10	0.2	0.03	0.21
(1,549)	1:A:74:LYS:H	1:A:73:GLY:HA3	10	0.2	0.04	0.2
(1,165)	1:A:150:THR:HG21	1:A:123:THR:HA	10	0.2	0.03	0.2

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)	Median (Å)
(1,165)	1:A:150:THR:HG22	1:A:123:THR:HA	10	0.2	0.03	0.2
(1,165)	1:A:150:THR:HG23	1:A:123:THR:HA	10	0.2	0.03	0.2
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:12:VAL:HG12	10	0.2	0.03	0.21
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:12:VAL:HG11	10	0.2	0.03	0.21
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:12:VAL:HG13	10	0.2	0.03	0.21
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:76:ALA:HB2	10	0.2	0.03	0.21
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:76:ALA:HB1	10	0.2	0.03	0.21
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:76:ALA:HB3	10	0.2	0.03	0.21
(1,2544)	1:A:154:LYS:HA	1:A:120:GLU:HA	10	0.2	0.04	0.2
(1,2544)	1:A:154:LYS:HA	1:A:121:ILE:HA	10	0.2	0.04	0.2
(1,3457)	1:A:125:ASN:HD22	1:A:126:GLU:H	10	0.19	0.04	0.19
(1,3457)	1:A:127:HIS:H	1:A:125:ASN:HD22	10	0.19	0.04	0.19
(1,1212)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:27:PRO:HA	10	0.19	0.0	0.19
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG12	1:A:143:GLU:HB3	10	0.18	0.01	0.18
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG11	1:A:143:GLU:HB3	10	0.18	0.01	0.18
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG13	1:A:143:GLU:HB3	10	0.18	0.01	0.18
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG12	1:A:149:VAL:HB	10	0.18	0.01	0.18
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG11	1:A:149:VAL:HB	10	0.18	0.01	0.18
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG13	1:A:149:VAL:HB	10	0.18	0.01	0.18
(1,3088)	1:A:9:LEU:H	1:A:9:LEU:HD12	10	0.18	0.02	0.18
(1,3088)	1:A:9:LEU:H	1:A:9:LEU:HD11	10	0.18	0.02	0.18
(1,3088)	1:A:9:LEU:H	1:A:9:LEU:HD13	10	0.18	0.02	0.18
(1,3088)	1:A:9:LEU:HD12	1:A:33:LEU:H	10	0.18	0.02	0.18
(1,3088)	1:A:9:LEU:HD11	1:A:33:LEU:H	10	0.18	0.02	0.18
(1,3088)	1:A:9:LEU:HD13	1:A:33:LEU:H	10	0.18	0.02	0.18
(1,3092)	1:A:11:CYS:H	1:A:76:ALA:HB2	10	0.16	0.02	0.17
(1,3092)	1:A:11:CYS:H	1:A:76:ALA:HB1	10	0.16	0.02	0.17
(1,3092)	1:A:11:CYS:H	1:A:76:ALA:HB3	10	0.16	0.02	0.17
(1,3092)	1:A:49:PHE:H	1:A:76:ALA:HB2	10	0.16	0.02	0.17
(1,3092)	1:A:49:PHE:H	1:A:76:ALA:HB1	10	0.16	0.02	0.17
(1,3092)	1:A:49:PHE:H	1:A:76:ALA:HB3	10	0.16	0.02	0.17
(1,3149)	1:A:40:CYS:HB3	1:A:60:VAL:HG12	10	0.16	0.02	0.17
(1,3149)	1:A:40:CYS:HB3	1:A:60:VAL:HG11	10	0.16	0.02	0.17
(1,3149)	1:A:40:CYS:HB3	1:A:60:VAL:HG13	10	0.16	0.02	0.17
(1,3149)	1:A:46:CYS:HB2	1:A:60:VAL:HG12	10	0.16	0.02	0.17
(1,3149)	1:A:46:CYS:HB2	1:A:60:VAL:HG11	10	0.16	0.02	0.17
(1,3149)	1:A:46:CYS:HB2	1:A:60:VAL:HG13	10	0.16	0.02	0.17
(1,92)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:88:HIS:HA	10	0.16	0.0	0.16
(1,838)	1:A:125:ASN:H	1:A:125:ASN:HB3	10	0.16	0.01	0.16
(1,1507)	1:A:122:PHE:H	1:A:121:ILE:HG12	10	0.16	0.01	0.15
(1,2892)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HE2	10	0.15	0.05	0.14
(1,2892)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HE3	10	0.15	0.05	0.14

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Models <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)	Median (Å)
(1,2892)	1:A:80:CYS:HB2	1:A:11:CYS:HB2	10	0.15	0.05	0.14
(1,906)	1:A:24:ILE:HB	1:A:62:GLU:HG2	10	0.15	0.01	0.15
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG22	10	0.14	0.02	0.14
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG21	10	0.14	0.02	0.14
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG23	10	0.14	0.02	0.14
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG12	10	0.14	0.02	0.14
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG11	10	0.14	0.02	0.14
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG13	10	0.14	0.02	0.14
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:33:LEU:HD22	10	0.14	0.02	0.14
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:33:LEU:HD21	10	0.14	0.02	0.14
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:33:LEU:HD23	10	0.14	0.02	0.14
(1,784)	1:A:147:LEU:HA	1:A:147:LEU:HB2	10	0.14	0.0	0.14
(1,197)	1:A:99:THR:H	1:A:99:THR:HG21	10	0.14	0.01	0.14
(1,197)	1:A:99:THR:H	1:A:99:THR:HG22	10	0.14	0.01	0.14
(1,197)	1:A:99:THR:H	1:A:99:THR:HG23	10	0.14	0.01	0.14
(1,1306)	1:A:87:GLN:HB2	1:A:87:GLN:HA	10	0.12	0.0	0.12
(1,1318)	1:A:127:HIS:HB2	1:A:128:ASP:HB2	9	1.62	0.05	1.62
(1,1447)	1:A:97:VAL:HB	1:A:118:SER:HB2	9	1.57	0.28	1.65
(1,329)	1:A:100:ALA:HB2	1:A:130:LYS:HE2	9	1.04	0.49	1.29
(1,329)	1:A:100:ALA:HB1	1:A:130:LYS:HE2	9	1.04	0.49	1.29
(1,329)	1:A:100:ALA:HB3	1:A:130:LYS:HE2	9	1.04	0.49	1.29
(1,1476)	1:A:33:LEU:HD12	1:A:14:SER:HB2	9	0.9	0.53	1.22
(1,1476)	1:A:33:LEU:HD11	1:A:14:SER:HB2	9	0.9	0.53	1.22
(1,1476)	1:A:33:LEU:HD13	1:A:14:SER:HB2	9	0.9	0.53	1.22
(1,2234)	1:A:98:MET:H	1:A:98:MET:HG3	9	0.74	0.03	0.73
(1,468)	1:A:97:VAL:HG22	1:A:98:MET:HG3	9	0.7	0.05	0.67
(1,468)	1:A:97:VAL:HG21	1:A:98:MET:HG3	9	0.7	0.05	0.67
(1,468)	1:A:97:VAL:HG23	1:A:98:MET:HG3	9	0.7	0.05	0.67
(1,1320)	1:A:128:ASP:H	1:A:127:HIS:HB2	9	0.61	0.07	0.6
(1,918)	1:A:130:LYS:HB2	1:A:130:LYS:HE3	9	0.61	0.06	0.63
(1,2530)	1:A:13:HIS:HD2	1:A:67:LEU:HG	9	0.57	0.19	0.64
(1,2530)	1:A:88:HIS:HD2	1:A:87:GLN:HB2	9	0.57	0.19	0.64
(1,2530)	1:A:88:HIS:HD2	1:A:147:LEU:HB3	9	0.57	0.19	0.64
(1,2530)	1:A:88:HIS:HD2	1:A:147:LEU:HG	9	0.57	0.19	0.64
(1,363)	1:A:108:ASP:HA	1:A:77:SER:HB3	9	0.54	0.17	0.55
(1,218)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:151:SER:HB2	9	0.49	0.16	0.56
(1,218)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:151:SER:HB2	9	0.49	0.16	0.56
(1,218)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:151:SER:HB2	9	0.49	0.16	0.56
(1,123)	1:A:127:HIS:HD2	1:A:127:HIS:HB3	9	0.44	0.02	0.44
(1,1096)	1:A:154:LYS:HB2	1:A:154:LYS:HE2	9	0.44	0.01	0.44
(1,137)	1:A:59:HIS:HD2	1:A:27:PRO:HB2	9	0.43	0.16	0.45
(1,2859)	1:A:16:ASN:HB2	1:A:17:LYS:HG3	9	0.38	0.13	0.4

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Models <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)	Median (Å)
(1,2859)	1:A:71:THR:HG21	1:A:16:ASN:HB2	9	0.38	0.13	0.4
(1,2859)	1:A:71:THR:HG22	1:A:16:ASN:HB2	9	0.38	0.13	0.4
(1,2859)	1:A:71:THR:HG23	1:A:16:ASN:HB2	9	0.38	0.13	0.4
(1,2317)	1:A:125:ASN:HD22	1:A:128:ASP:HB2	9	0.35	0.26	0.26
(1,1317)	1:A:127:HIS:HA	1:A:127:HIS:HB3	9	0.32	0.0	0.32
(1,1645)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:50:THR:HG21	9	0.31	0.06	0.29
(1,1645)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:50:THR:HG22	9	0.31	0.06	0.29
(1,1645)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:50:THR:HG23	9	0.31	0.06	0.29
(1,2982)	1:A:64:LYS:HA	1:A:64:LYS:HD3	9	0.3	0.06	0.29
(1,2982)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:107:ALA:HA	9	0.3	0.06	0.29
(1,2982)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:108:ASP:HA	9	0.3	0.06	0.29
(1,2811)	1:A:128:ASP:HB2	1:A:130:LYS:HG2	9	0.29	0.41	0.15
(1,2811)	1:A:128:ASP:HB2	1:A:130:LYS:HG3	9	0.29	0.41	0.15
(1,60)	1:A:85:PHE:HD1	1:A:82:ARG:HB2	9	0.29	0.07	0.31
(1,60)	1:A:85:PHE:HD2	1:A:82:ARG:HB2	9	0.29	0.07	0.31
(1,555)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:70:LEU:HB3	9	0.26	0.08	0.28
(1,556)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:70:LEU:HD12	9	0.26	0.06	0.28
(1,556)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:70:LEU:HD11	9	0.26	0.06	0.28
(1,556)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:70:LEU:HD13	9	0.26	0.06	0.28
(1,332)	1:A:125:ASN:HD21	1:A:149:VAL:HG22	9	0.26	0.01	0.26
(1,332)	1:A:125:ASN:HD21	1:A:149:VAL:HG21	9	0.26	0.01	0.26
(1,332)	1:A:125:ASN:HD21	1:A:149:VAL:HG23	9	0.26	0.01	0.26
(1,3004)	1:A:56:LYS:H	1:A:6:LYS:HD2	9	0.25	0.07	0.22
(1,3004)	1:A:56:LYS:H	1:A:56:LYS:HD2	9	0.25	0.07	0.22
(1,3004)	1:A:56:LYS:H	1:A:56:LYS:HD3	9	0.25	0.07	0.22
(1,2568)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:60:VAL:HB	9	0.24	0.06	0.25
(1,2568)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:60:VAL:HB	9	0.24	0.06	0.25
(1,2568)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:60:VAL:HB	9	0.24	0.06	0.25
(1,2568)	1:A:149:VAL:HG12	1:A:125:ASN:HB2	9	0.24	0.06	0.25
(1,2568)	1:A:149:VAL:HG11	1:A:125:ASN:HB2	9	0.24	0.06	0.25
(1,2568)	1:A:149:VAL:HG13	1:A:125:ASN:HB2	9	0.24	0.06	0.25
(1,2753)	1:A:136:ARG:HA	1:A:136:ARG:HD2	9	0.23	0.06	0.22
(1,2753)	1:A:136:ARG:HA	1:A:136:ARG:HD3	9	0.23	0.06	0.22
(1,2702)	1:A:117:PRO:HD3	1:A:116:ASP:HB3	9	0.22	0.03	0.22
(1,2702)	1:A:116:ASP:HB3	1:A:118:SER:HB2	9	0.22	0.03	0.22
(1,1325)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:36:CYS:H	9	0.21	0.05	0.22
(1,1569)	1:A:74:LYS:HG2	1:A:12:VAL:HB	9	0.18	0.01	0.18
(1,713)	1:A:53:ASP:HB3	1:A:74:LYS:HG3	9	0.18	0.02	0.17
(1,1492)	1:A:74:LYS:H	1:A:70:LEU:HG	9	0.16	0.02	0.17
(1,1236)	1:A:78:ARG:HB3	1:A:78:ARG:HD3	9	0.16	0.02	0.16
(1,1422)	1:A:65:PRO:HG2	1:A:65:PRO:HA	9	0.16	0.03	0.16
(1,2825)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:57:MET:HB2	9	0.16	0.02	0.15

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)	Median (Å)
(1,2825)	1:A:107:ALA:HB2	1:A:108:ASP:HB2	9	0.16	0.02	0.15
(1,2825)	1:A:107:ALA:HB1	1:A:108:ASP:HB2	9	0.16	0.02	0.15
(1,2825)	1:A:107:ALA:HB3	1:A:108:ASP:HB2	9	0.16	0.02	0.15
(1,2690)	1:A:94:ALA:HA	1:A:134:LYS:HB3	9	0.15	0.02	0.15
(1,2690)	1:A:94:ALA:HA	1:A:95:PRO:HG2	9	0.15	0.02	0.15
(1,328)	1:A:100:ALA:HB2	1:A:101:MET:HA	9	0.15	0.03	0.14
(1,328)	1:A:100:ALA:HB1	1:A:101:MET:HA	9	0.15	0.03	0.14
(1,328)	1:A:100:ALA:HB3	1:A:101:MET:HA	9	0.15	0.03	0.14
(1,1159)	1:A:29:PRO:HB3	1:A:57:MET:HA	9	0.14	0.02	0.14
(1,2850)	1:A:101:MET:HB3	1:A:99:THR:HG21	9	0.14	0.02	0.15
(1,2850)	1:A:101:MET:HB3	1:A:99:THR:HG22	9	0.14	0.02	0.15
(1,2850)	1:A:101:MET:HB3	1:A:99:THR:HG23	9	0.14	0.02	0.15
(1,2850)	1:A:100:ALA:HB2	1:A:101:MET:HB3	9	0.14	0.02	0.15
(1,2850)	1:A:100:ALA:HB1	1:A:101:MET:HB3	9	0.14	0.02	0.15
(1,2850)	1:A:100:ALA:HB3	1:A:101:MET:HB3	9	0.14	0.02	0.15
(1,953)	1:A:7:LEU:H	1:A:34:GLU:HG2	9	0.13	0.01	0.13
(1,1116)	1:A:29:PRO:HB2	1:A:57:MET:HA	9	0.12	0.01	0.13
(1,1722)	1:A:74:LYS:H	1:A:74:LYS:HB3	9	0.12	0.01	0.12
(1,703)	1:A:61:LYS:HE2	1:A:59:HIS:HB2	8	0.7	0.06	0.68
(1,1295)	1:A:87:GLN:HE21	1:A:87:GLN:HB2	8	0.6	0.07	0.62
(1,2908)	1:A:142:LYS:HB2	1:A:139:SER:HB3	8	0.56	0.29	0.56
(1,2908)	1:A:154:LYS:HB3	1:A:160:GLY:HA3	8	0.56	0.29	0.56
(1,2908)	1:A:110:GLN:HG2	1:A:79:SER:HB2	8	0.56	0.29	0.56
(1,658)	1:A:50:THR:H	1:A:49:PHE:HB3	8	0.21	0.04	0.23
(1,2180)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB3	8	0.2	0.04	0.2
(1,223)	1:A:104:SER:H	1:A:13:HIS:HA	8	0.19	0.04	0.19
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG12	1:A:134:LYS:HB2	8	0.18	0.09	0.15
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG11	1:A:134:LYS:HB2	8	0.18	0.09	0.15
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG13	1:A:134:LYS:HB2	8	0.18	0.09	0.15
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG12	1:A:134:LYS:HG3	8	0.18	0.09	0.15
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG11	1:A:134:LYS:HG3	8	0.18	0.09	0.15
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG13	1:A:134:LYS:HG3	8	0.18	0.09	0.15
(1,688)	1:A:133:PHE:HB2	1:A:98:MET:HG3	8	0.17	0.04	0.16
(1,178)	1:A:67:LEU:H	1:A:67:LEU:HD22	8	0.15	0.02	0.16
(1,178)	1:A:67:LEU:H	1:A:67:LEU:HD21	8	0.15	0.02	0.16
(1,178)	1:A:67:LEU:H	1:A:67:LEU:HD23	8	0.15	0.02	0.16
(1,773)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:65:PRO:HA	8	0.15	0.02	0.15
(1,2945)	1:A:102:VAL:HB	1:A:17:LYS:HD2	8	0.14	0.02	0.14
(1,2945)	1:A:102:VAL:HB	1:A:130:LYS:HG2	8	0.14	0.02	0.14
(1,2945)	1:A:102:VAL:HB	1:A:130:LYS:HG3	8	0.14	0.02	0.14
(1,1693)	1:A:20:ARG:HG2	1:A:19:SER:HA	8	0.14	0.02	0.15
(1,1782)	1:A:52:ASN:H	1:A:57:MET:HB3	8	0.14	0.02	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)	Median (Å)
(1,2410)	1:A:31:VAL:H	1:A:6:LYS:H	8	0.13	0.02	0.13
(1,1531)	1:A:61:LYS:HG3	1:A:62:GLU:H	8	0.13	0.02	0.12
(1,269)	1:A:75:THR:HG21	1:A:77:SER:H	8	0.12	0.01	0.12
(1,269)	1:A:75:THR:HG22	1:A:77:SER:H	8	0.12	0.01	0.12
(1,269)	1:A:75:THR:HG23	1:A:77:SER:H	8	0.12	0.01	0.12
(1,1298)	1:A:48:HIS:HB3	1:A:65:PRO:HG2	7	0.88	0.49	1.1
(1,2747)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:59:HIS:HB3	7	0.83	0.4	0.67
(1,2747)	1:A:82:ARG:HD3	1:A:85:PHE:HB3	7	0.83	0.4	0.67
(1,2950)	1:A:71:THR:HB	1:A:16:ASN:HB2	7	0.54	0.06	0.54
(1,2950)	1:A:71:THR:HB	1:A:54:ASP:HB2	7	0.54	0.06	0.54
(1,2950)	1:A:71:THR:HB	1:A:54:ASP:HB3	7	0.54	0.06	0.54
(1,2606)	1:A:129:GLN:HA	1:A:129:GLN:HB2	7	0.48	0.0	0.48
(1,2606)	1:A:129:GLN:HA	1:A:129:GLN:HG3	7	0.48	0.0	0.48
(1,2696)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:64:LYS:HG2	7	0.38	0.12	0.4
(1,2696)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:65:PRO:HB3	7	0.38	0.12	0.4
(1,2748)	1:A:82:ARG:HD3	1:A:82:ARG:HA	7	0.32	0.19	0.26
(1,2748)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:THR:HB	7	0.32	0.19	0.26
(1,914)	1:A:125:ASN:H	1:A:130:LYS:HB2	7	0.31	0.09	0.36
(1,2166)	1:A:10:SER:H	1:A:10:SER:HB3	7	0.31	0.02	0.31
(1,940)	1:A:16:ASN:HB2	1:A:71:THR:HA	7	0.31	0.03	0.31
(1,934)	1:A:72:GLY:H	1:A:16:ASN:HB2	7	0.26	0.03	0.26
(1,2974)	1:A:25:GLY:HA2	1:A:26:GLU:HB2	7	0.24	0.07	0.24
(1,2974)	1:A:25:GLY:HA3	1:A:26:GLU:HB2	7	0.24	0.07	0.24
(1,2974)	1:A:98:MET:HG2	1:A:113:CYS:HA	7	0.24	0.07	0.24
(1,2974)	1:A:98:MET:HG2	1:A:119:CYS:HB3	7	0.24	0.07	0.24
(1,937)	1:A:17:LYS:H	1:A:16:ASN:HB2	7	0.23	0.01	0.23
(1,14)	1:A:126:GLU:HG3	1:A:124:TYR:HD1	7	0.21	0.07	0.24
(1,14)	1:A:126:GLU:HG3	1:A:124:TYR:HD2	7	0.21	0.07	0.24
(1,2713)	1:A:148:GLY:HA2	1:A:147:LEU:HB2	7	0.21	0.08	0.17
(1,2713)	1:A:160:GLY:HA3	1:A:114:ALA:HB2	7	0.21	0.08	0.17
(1,2713)	1:A:160:GLY:HA3	1:A:114:ALA:HB1	7	0.21	0.08	0.17
(1,2713)	1:A:160:GLY:HA3	1:A:114:ALA:HB3	7	0.21	0.08	0.17
(1,935)	1:A:73:GLY:H	1:A:16:ASN:HB2	7	0.21	0.04	0.21
(1,2901)	1:A:22:PRO:HD3	1:A:62:GLU:HG3	7	0.15	0.02	0.15
(1,2901)	1:A:129:GLN:HG3	1:A:126:GLU:HA	7	0.15	0.02	0.15
(1,415)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:66:ASP:HB2	7	0.15	0.02	0.14
(1,415)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:66:ASP:HB2	7	0.15	0.02	0.14
(1,415)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:66:ASP:HB2	7	0.15	0.02	0.14
(1,1296)	1:A:56:LYS:HA	1:A:6:LYS:HD2	7	0.15	0.03	0.14
(1,264)	1:A:136:ARG:HA	1:A:137:GLY:HA2	7	0.14	0.02	0.14
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:123:THR:HG21	7	0.13	0.02	0.13
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:123:THR:HG22	7	0.13	0.02	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)	Median (Å)
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:123:THR:HG23	7	0.13	0.02	0.13
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:123:THR:HG21	7	0.13	0.02	0.13
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:123:THR:HG22	7	0.13	0.02	0.13
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:123:THR:HG23	7	0.13	0.02	0.13
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:123:THR:HG21	7	0.13	0.02	0.13
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:123:THR:HG22	7	0.13	0.02	0.13
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:123:THR:HG23	7	0.13	0.02	0.13
(1,2709)	1:A:148:GLY:HA2	1:A:146:VAL:HB	7	0.13	0.02	0.13
(1,2709)	1:A:148:GLY:HA2	1:A:147:LEU:HB3	7	0.13	0.02	0.13
(1,3036)	1:A:55:SER:HB3	1:A:52:ASN:HB2	7	0.13	0.01	0.13
(1,3036)	1:A:55:SER:HB3	1:A:57:MET:HG2	7	0.13	0.01	0.13
(1,3036)	1:A:55:SER:HB3	1:A:57:MET:HG3	7	0.13	0.01	0.13
(1,199)	1:A:73:GLY:H	1:A:71:THR:HG21	7	0.13	0.01	0.13
(1,199)	1:A:73:GLY:H	1:A:71:THR:HG22	7	0.13	0.01	0.13
(1,199)	1:A:73:GLY:H	1:A:71:THR:HG23	7	0.13	0.01	0.13
(1,625)	1:A:44:ASP:HA	1:A:45:GLY:HA2	7	0.13	0.01	0.12
(1,404)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:9:LEU:HD12	7	0.12	0.02	0.12
(1,404)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:9:LEU:HD11	7	0.12	0.02	0.12
(1,404)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:9:LEU:HD13	7	0.12	0.02	0.12
(1,404)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:9:LEU:HD12	7	0.12	0.02	0.12
(1,404)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:9:LEU:HD11	7	0.12	0.02	0.12
(1,404)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:9:LEU:HD13	7	0.12	0.02	0.12
(1,404)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:9:LEU:HD12	7	0.12	0.02	0.12
(1,404)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:9:LEU:HD11	7	0.12	0.02	0.12
(1,404)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:9:LEU:HD13	7	0.12	0.02	0.12
(1,1328)	1:A:105:GLN:HE22	1:A:105:GLN:HG3	7	0.12	0.01	0.12
(1,2629)	1:A:107:ALA:HB2	1:A:110:GLN:H	7	0.12	0.0	0.12
(1,2629)	1:A:107:ALA:HB1	1:A:110:GLN:H	7	0.12	0.0	0.12
(1,2629)	1:A:107:ALA:HB3	1:A:110:GLN:H	7	0.12	0.0	0.12
(1,2629)	1:A:111:ALA:HB2	1:A:110:GLN:H	7	0.12	0.0	0.12
(1,2629)	1:A:111:ALA:HB1	1:A:110:GLN:H	7	0.12	0.0	0.12
(1,2629)	1:A:111:ALA:HB3	1:A:110:GLN:H	7	0.12	0.0	0.12
(1,427)	1:A:36:CYS:HA	1:A:31:VAL:HG22	7	0.12	0.01	0.12
(1,427)	1:A:36:CYS:HA	1:A:31:VAL:HG21	7	0.12	0.01	0.12
(1,427)	1:A:36:CYS:HA	1:A:31:VAL:HG23	7	0.12	0.01	0.12
(1,1724)	1:A:63:GLY:H	1:A:48:HIS:H	7	0.12	0.01	0.12
(1,134)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:59:HIS:HD2	7	0.11	0.01	0.11
(1,1389)	1:A:20:ARG:H	1:A:19:SER:HB2	6	1.01	0.17	1.08
(1,729)	1:A:17:LYS:HE2	1:A:67:LEU:HD22	6	0.62	0.5	0.58
(1,729)	1:A:17:LYS:HE2	1:A:67:LEU:HD21	6	0.62	0.5	0.58
(1,729)	1:A:17:LYS:HE2	1:A:67:LEU:HD23	6	0.62	0.5	0.58
(1,2723)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:63:GLY:HA2	6	0.42	0.02	0.42

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Models <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)	Median (Å)
(1,2723)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:63:GLY:HA3	6	0.42	0.02	0.42
(1,2723)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:63:GLY:HA2	6	0.42	0.02	0.42
(1,2723)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:63:GLY:HA3	6	0.42	0.02	0.42
(1,2723)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:63:GLY:HA2	6	0.42	0.02	0.42
(1,2723)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:63:GLY:HA3	6	0.42	0.02	0.42
(1,2723)	1:A:63:GLY:HA2	1:A:64:LYS:HD2	6	0.42	0.02	0.42
(1,2723)	1:A:63:GLY:HA3	1:A:64:LYS:HD2	6	0.42	0.02	0.42
(1,2723)	1:A:152:GLY:HA3	1:A:86:GLU:HB2	6	0.42	0.02	0.42
(1,2723)	1:A:152:GLY:HA3	1:A:153:PRO:HB2	6	0.42	0.02	0.42
(1,2723)	1:A:152:GLY:HA3	1:A:153:PRO:HG2	6	0.42	0.02	0.42
(1,2723)	1:A:152:GLY:HA3	1:A:153:PRO:HG3	6	0.42	0.02	0.42
(1,2723)	1:A:152:GLY:HA3	1:A:154:LYS:HB3	6	0.42	0.02	0.42
(1,534)	1:A:4:PRO:HD3	1:A:32:SER:HB3	6	0.4	0.28	0.32
(1,2963)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:65:PRO:HB3	6	0.31	0.08	0.33
(1,2963)	1:A:41:LYS:HE2	1:A:78:ARG:HB3	6	0.31	0.08	0.33
(1,2963)	1:A:41:LYS:HE3	1:A:78:ARG:HB3	6	0.31	0.08	0.33
(1,380)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:65:PRO:HG3	6	0.27	0.05	0.28
(1,380)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:65:PRO:HG3	6	0.27	0.05	0.28
(1,380)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:65:PRO:HG3	6	0.27	0.05	0.28
(1,3347)	1:A:101:MET:H	1:A:130:LYS:HE2	6	0.25	0.09	0.22
(1,3347)	1:A:101:MET:H	1:A:131:CYS:HB3	6	0.25	0.09	0.22
(1,2556)	1:A:71:THR:HG21	1:A:16:ASN:HB2	6	0.24	0.07	0.22
(1,2556)	1:A:71:THR:HG22	1:A:16:ASN:HB2	6	0.24	0.07	0.22
(1,2556)	1:A:71:THR:HG23	1:A:16:ASN:HB2	6	0.24	0.07	0.22
(1,2556)	1:A:71:THR:HG21	1:A:54:ASP:HB2	6	0.24	0.07	0.22
(1,2556)	1:A:71:THR:HG21	1:A:54:ASP:HB3	6	0.24	0.07	0.22
(1,2556)	1:A:71:THR:HG22	1:A:54:ASP:HB2	6	0.24	0.07	0.22
(1,2556)	1:A:71:THR:HG22	1:A:54:ASP:HB3	6	0.24	0.07	0.22
(1,2556)	1:A:71:THR:HG23	1:A:54:ASP:HB2	6	0.24	0.07	0.22
(1,2556)	1:A:71:THR:HG23	1:A:54:ASP:HB3	6	0.24	0.07	0.22
(1,3115)	1:A:6:LYS:HE3	1:A:6:LYS:HG3	6	0.23	0.01	0.23
(1,3115)	1:A:56:LYS:HE2	1:A:56:LYS:HG2	6	0.23	0.01	0.23
(1,3115)	1:A:56:LYS:HE3	1:A:56:LYS:HG2	6	0.23	0.01	0.23
(1,2252)	1:A:113:CYS:H	1:A:122:PHE:HB2	6	0.22	0.09	0.19
(1,2532)	1:A:59:HIS:HD2	1:A:27:PRO:HG2	6	0.19	0.04	0.19
(1,2532)	1:A:59:HIS:HD2	1:A:57:MET:HB3	6	0.19	0.04	0.19
(1,3265)	1:A:12:VAL:H	1:A:9:LEU:HB2	6	0.18	0.03	0.18
(1,3265)	1:A:12:VAL:H	1:A:105:GLN:HG2	6	0.18	0.03	0.18
(1,758)	1:A:64:LYS:H	1:A:64:LYS:HE2	6	0.17	0.06	0.16
(1,758)	1:A:64:LYS:H	1:A:64:LYS:HE3	6	0.17	0.06	0.16
(1,2992)	1:A:49:PHE:H	1:A:48:HIS:HB3	6	0.16	0.02	0.16
(1,2992)	1:A:16:ASN:H	1:A:13:HIS:HB3	6	0.16	0.02	0.16

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Models <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)	Median (Å)
(1,2967)	1:A:159:GLU:HB3	1:A:156:PHE:HD1	6	0.16	0.03	0.15
(1,2967)	1:A:159:GLU:HB3	1:A:156:PHE:HD2	6	0.16	0.03	0.15
(1,2967)	1:A:159:GLU:H	1:A:159:GLU:HB3	6	0.16	0.03	0.15
(1,2595)	1:A:75:THR:HG21	1:A:13:HIS:HB2	6	0.15	0.02	0.15
(1,2595)	1:A:75:THR:HG22	1:A:13:HIS:HB2	6	0.15	0.02	0.15
(1,2595)	1:A:75:THR:HG23	1:A:13:HIS:HB2	6	0.15	0.02	0.15
(1,2595)	1:A:75:THR:HG21	1:A:13:HIS:HB3	6	0.15	0.02	0.15
(1,2595)	1:A:75:THR:HG22	1:A:13:HIS:HB3	6	0.15	0.02	0.15
(1,2595)	1:A:75:THR:HG23	1:A:13:HIS:HB3	6	0.15	0.02	0.15
(1,2595)	1:A:75:THR:HG21	1:A:48:HIS:HB3	6	0.15	0.02	0.15
(1,2595)	1:A:75:THR:HG22	1:A:48:HIS:HB3	6	0.15	0.02	0.15
(1,2595)	1:A:75:THR:HG23	1:A:48:HIS:HB3	6	0.15	0.02	0.15
(1,2824)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:44:ASP:HB2	6	0.15	0.03	0.15
(1,2824)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:44:ASP:HB2	6	0.15	0.03	0.15
(1,2824)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:44:ASP:HB2	6	0.15	0.03	0.15
(1,2824)	1:A:149:VAL:HG12	1:A:125:ASN:HB2	6	0.15	0.03	0.15
(1,2824)	1:A:149:VAL:HG11	1:A:125:ASN:HB2	6	0.15	0.03	0.15
(1,2824)	1:A:149:VAL:HG13	1:A:125:ASN:HB2	6	0.15	0.03	0.15
(1,3032)	1:A:27:PRO:HG2	1:A:28:VAL:H	6	0.15	0.04	0.14
(1,3032)	1:A:27:PRO:HG2	1:A:58:CYS:H	6	0.15	0.04	0.14
(1,3051)	1:A:65:PRO:HG2	1:A:66:ASP:HB2	6	0.14	0.03	0.12
(1,3051)	1:A:108:ASP:HB2	1:A:65:PRO:HG2	6	0.14	0.03	0.12
(1,832)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:51:TYR:HA	6	0.13	0.01	0.13
(1,246)	1:A:119:CYS:HA	1:A:116:ASP:HB3	6	0.13	0.02	0.12
(1,595)	1:A:70:LEU:HB2	1:A:18:GLY:HA2	6	0.12	0.01	0.13
(1,1245)	1:A:146:VAL:HB	1:A:123:THR:HG21	6	0.12	0.02	0.12
(1,1245)	1:A:146:VAL:HB	1:A:123:THR:HG22	6	0.12	0.02	0.12
(1,1245)	1:A:146:VAL:HB	1:A:123:THR:HG23	6	0.12	0.02	0.12
(1,1547)	1:A:61:LYS:H	1:A:61:LYS:HG2	6	0.12	0.01	0.12
(1,2198)	1:A:48:HIS:H	1:A:46:CYS:HB2	6	0.12	0.01	0.12
(1,3226)	1:A:85:PHE:H	1:A:82:ARG:HG3	6	0.12	0.01	0.12
(1,3226)	1:A:85:PHE:H	1:A:150:THR:HG21	6	0.12	0.01	0.12
(1,3226)	1:A:85:PHE:H	1:A:150:THR:HG22	6	0.12	0.01	0.12
(1,3226)	1:A:85:PHE:H	1:A:150:THR:HG23	6	0.12	0.01	0.12
(1,2983)	1:A:61:LYS:HD3	1:A:21:ALA:HA	6	0.12	0.0	0.12
(1,2983)	1:A:61:LYS:HD3	1:A:23:THR:HA	6	0.12	0.0	0.12
(1,420)	1:A:111:ALA:HB2	1:A:65:PRO:HG2	5	1.14	0.22	1.27
(1,420)	1:A:111:ALA:HB1	1:A:65:PRO:HG2	5	1.14	0.22	1.27
(1,420)	1:A:111:ALA:HB3	1:A:65:PRO:HG2	5	1.14	0.22	1.27
(1,1584)	1:A:74:LYS:HG2	1:A:14:SER:HB2	5	0.53	0.21	0.44
(1,1304)	1:A:6:LYS:HD3	1:A:56:LYS:HB2	5	0.25	0.21	0.14
(1,2211)	1:A:17:LYS:H	1:A:73:GLY:HA2	5	0.22	0.08	0.2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Models <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)	Median (Å)
(1,2402)	1:A:19:SER:H	1:A:19:SER:HB3	5	0.22	0.01	0.22
(1,2971)	1:A:159:GLU:HB2	1:A:155:GLN:HA	5	0.17	0.04	0.15
(1,2971)	1:A:159:GLU:HB2	1:A:156:PHE:HA	5	0.17	0.04	0.15
(1,3044)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:87:GLN:HB2	5	0.16	0.03	0.15
(1,3044)	1:A:146:VAL:HB	1:A:88:HIS:HB2	5	0.16	0.03	0.15
(1,3044)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:147:LEU:HG	5	0.16	0.03	0.15
(1,3507)	1:A:35:GLN:HE21	1:A:4:PRO:HG2	5	0.15	0.02	0.15
(1,3507)	1:A:35:GLN:HE21	1:A:4:PRO:HG3	5	0.15	0.02	0.15
(1,3507)	1:A:35:GLN:HE21	1:A:35:GLN:HB2	5	0.15	0.02	0.15
(1,456)	1:A:38:ALA:HB2	1:A:35:GLN:HG2	5	0.15	0.03	0.15
(1,456)	1:A:38:ALA:HB2	1:A:35:GLN:HG3	5	0.15	0.03	0.15
(1,456)	1:A:38:ALA:HB1	1:A:35:GLN:HG2	5	0.15	0.03	0.15
(1,456)	1:A:38:ALA:HB1	1:A:35:GLN:HG3	5	0.15	0.03	0.15
(1,456)	1:A:38:ALA:HB3	1:A:35:GLN:HG2	5	0.15	0.03	0.15
(1,456)	1:A:38:ALA:HB3	1:A:35:GLN:HG3	5	0.15	0.03	0.15
(1,3201)	1:A:52:ASN:H	1:A:53:ASP:HB3	5	0.12	0.01	0.12
(1,3201)	1:A:52:ASN:H	1:A:54:ASP:HB2	5	0.12	0.01	0.12
(1,3201)	1:A:52:ASN:H	1:A:54:ASP:HB3	5	0.12	0.01	0.12
(1,3201)	1:A:52:ASN:H	1:A:58:CYS:HB2	5	0.12	0.01	0.12
(1,2486)	1:A:68:TYR:HD1	1:A:68:TYR:HA	5	0.12	0.01	0.12
(1,2486)	1:A:68:TYR:HD2	1:A:68:TYR:HA	5	0.12	0.01	0.12
(1,2486)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:123:THR:HA	5	0.12	0.01	0.12
(1,2486)	1:A:91:TYR:HD2	1:A:123:THR:HA	5	0.12	0.01	0.12
(1,2903)	1:A:28:VAL:HB	1:A:31:VAL:HA	5	0.12	0.01	0.12
(1,2903)	1:A:28:VAL:HB	1:A:57:MET:HA	5	0.12	0.01	0.12
(1,2839)	1:A:30:ASP:HB3	1:A:29:PRO:HB2	5	0.12	0.01	0.12
(1,2839)	1:A:30:ASP:HB3	1:A:29:PRO:HG2	5	0.12	0.01	0.12
(1,2839)	1:A:30:ASP:HB3	1:A:29:PRO:HG3	5	0.12	0.01	0.12
(1,108)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:58:CYS:HA	5	0.12	0.01	0.11
(1,108)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:58:CYS:HA	5	0.12	0.01	0.11
(1,108)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:58:CYS:HA	5	0.12	0.01	0.11
(1,3133)	1:A:23:THR:HG21	1:A:61:LYS:HA	5	0.12	0.01	0.11
(1,3133)	1:A:23:THR:HG22	1:A:61:LYS:HA	5	0.12	0.01	0.11
(1,3133)	1:A:23:THR:HG23	1:A:61:LYS:HA	5	0.12	0.01	0.11
(1,3133)	1:A:123:THR:HG21	1:A:150:THR:HA	5	0.12	0.01	0.11
(1,3133)	1:A:123:THR:HG22	1:A:150:THR:HA	5	0.12	0.01	0.11
(1,3133)	1:A:123:THR:HG23	1:A:150:THR:HA	5	0.12	0.01	0.11
(1,3121)	1:A:33:LEU:HD22	1:A:32:SER:H	5	0.11	0.0	0.11
(1,3121)	1:A:33:LEU:HD21	1:A:32:SER:H	5	0.11	0.0	0.11
(1,3121)	1:A:33:LEU:HD23	1:A:32:SER:H	5	0.11	0.0	0.11
(1,3121)	1:A:34:GLU:H	1:A:33:LEU:HD22	5	0.11	0.0	0.11
(1,3121)	1:A:34:GLU:H	1:A:33:LEU:HD21	5	0.11	0.0	0.11

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Models <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)	Median (Å)
(1,3121)	1:A:34:GLU:H	1:A:33:LEU:HD23	5	0.11	0.0	0.11
(1,1678)	1:A:70:LEU:HG	1:A:70:LEU:HA	5	0.11	0.0	0.11
(1,3488)	1:A:155:GLN:HE21	1:A:115:ALA:HA	4	0.57	0.32	0.44
(1,3488)	1:A:155:GLN:HE21	1:A:117:PRO:HA	4	0.57	0.32	0.44
(1,2962)	1:A:65:PRO:HB3	1:A:67:LEU:HG	4	0.48	0.11	0.48
(1,2962)	1:A:78:ARG:HB3	1:A:41:LYS:HG3	4	0.48	0.11	0.48
(1,2785)	1:A:130:LYS:HE2	1:A:125:ASN:HD21	4	0.46	0.21	0.48
(1,2785)	1:A:130:LYS:HE3	1:A:125:ASN:HD21	4	0.46	0.21	0.48
(1,2785)	1:A:131:CYS:HB3	1:A:112:ALA:H	4	0.46	0.21	0.48
(1,2269)	1:A:141:PHE:H	1:A:142:LYS:HB3	4	0.42	0.21	0.38
(1,1181)	1:A:64:LYS:HE2	1:A:64:LYS:HB2	4	0.24	0.02	0.24
(1,1181)	1:A:64:LYS:HE2	1:A:64:LYS:HB3	4	0.24	0.02	0.24
(1,1181)	1:A:64:LYS:HE3	1:A:64:LYS:HB2	4	0.24	0.02	0.24
(1,1181)	1:A:64:LYS:HE3	1:A:64:LYS:HB3	4	0.24	0.02	0.24
(1,899)	1:A:16:ASN:H	1:A:15:ASP:HB3	4	0.23	0.04	0.24
(1,1573)	1:A:65:PRO:HD2	1:A:64:LYS:HG3	4	0.2	0.06	0.23
(1,2998)	1:A:87:GLN:H	1:A:87:GLN:HB3	4	0.16	0.03	0.16
(1,2998)	1:A:32:SER:H	1:A:35:GLN:HB2	4	0.16	0.03	0.16
(1,2488)	1:A:68:TYR:HD1	1:A:20:ARG:HB2	4	0.16	0.03	0.16
(1,2488)	1:A:68:TYR:HD1	1:A:20:ARG:HB3	4	0.16	0.03	0.16
(1,2488)	1:A:68:TYR:HD2	1:A:20:ARG:HB2	4	0.16	0.03	0.16
(1,2488)	1:A:68:TYR:HD2	1:A:20:ARG:HB3	4	0.16	0.03	0.16
(1,2488)	1:A:142:LYS:HB3	1:A:91:TYR:HD1	4	0.16	0.03	0.16
(1,2488)	1:A:142:LYS:HB3	1:A:91:TYR:HD2	4	0.16	0.03	0.16
(1,733)	1:A:132:THR:H	1:A:131:CYS:HB2	4	0.15	0.02	0.16
(1,3146)	1:A:156:PHE:HA	1:A:159:GLU:HG2	4	0.14	0.01	0.14
(1,3146)	1:A:156:PHE:HA	1:A:159:GLU:HG3	4	0.14	0.01	0.14
(1,3411)	1:A:115:ALA:H	1:A:65:PRO:HD2	4	0.14	0.03	0.12
(1,3411)	1:A:115:ALA:H	1:A:113:CYS:HB3	4	0.14	0.03	0.12
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD22	1:A:17:LYS:HE3	4	0.13	0.02	0.12
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD21	1:A:17:LYS:HE3	4	0.13	0.02	0.12
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD23	1:A:17:LYS:HE3	4	0.13	0.02	0.12
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD22	1:A:48:HIS:HB2	4	0.13	0.02	0.12
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD21	1:A:48:HIS:HB2	4	0.13	0.02	0.12
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD23	1:A:48:HIS:HB2	4	0.13	0.02	0.12
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD22	1:A:68:TYR:HB2	4	0.13	0.02	0.12
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD21	1:A:68:TYR:HB2	4	0.13	0.02	0.12
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD23	1:A:68:TYR:HB2	4	0.13	0.02	0.12
(1,1059)	1:A:32:SER:H	1:A:35:GLN:HG2	4	0.12	0.02	0.12
(1,1059)	1:A:32:SER:H	1:A:35:GLN:HG3	4	0.12	0.02	0.12
(1,2383)	1:A:129:GLN:HE22	1:A:104:SER:HB2	3	1.28	0.06	1.32
(1,2383)	1:A:129:GLN:HE22	1:A:104:SER:HB3	3	1.28	0.06	1.32

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Models <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)	Median (Å)
(1,728)	1:A:17:LYS:HE2	1:A:17:LYS:HD2	3	0.38	0.0	0.38
(1,680)	1:A:20:ARG:H	1:A:20:ARG:HD3	3	0.23	0.08	0.23
(1,1253)	1:A:67:LEU:HD22	1:A:65:PRO:HB2	3	0.21	0.1	0.14
(1,1253)	1:A:67:LEU:HD21	1:A:65:PRO:HB2	3	0.21	0.1	0.14
(1,1253)	1:A:67:LEU:HD23	1:A:65:PRO:HB2	3	0.21	0.1	0.14
(1,1421)	1:A:108:ASP:HA	1:A:65:PRO:HG2	3	0.2	0.07	0.16
(1,2652)	1:A:78:ARG:HA	1:A:37:ALA:HB2	3	0.19	0.04	0.18
(1,2652)	1:A:78:ARG:HA	1:A:37:ALA:HB1	3	0.19	0.04	0.18
(1,2652)	1:A:78:ARG:HA	1:A:37:ALA:HB3	3	0.19	0.04	0.18
(1,2652)	1:A:94:ALA:HB2	1:A:137:GLY:HA2	3	0.19	0.04	0.18
(1,2652)	1:A:94:ALA:HB1	1:A:137:GLY:HA2	3	0.19	0.04	0.18
(1,2652)	1:A:94:ALA:HB3	1:A:137:GLY:HA2	3	0.19	0.04	0.18
(1,2907)	1:A:89:VAL:HB	1:A:151:SER:HB2	3	0.18	0.04	0.19
(1,2907)	1:A:110:GLN:HG2	1:A:77:SER:HB2	3	0.18	0.04	0.19
(1,2907)	1:A:84:CYS:HB3	1:A:154:LYS:HB3	3	0.18	0.04	0.19
(1,2907)	1:A:153:PRO:HD3	1:A:154:LYS:HB3	3	0.18	0.04	0.19
(1,1276)	1:A:143:GLU:H	1:A:142:LYS:HD2	3	0.16	0.0	0.16
(1,1276)	1:A:143:GLU:H	1:A:142:LYS:HD3	3	0.16	0.0	0.16
(1,1251)	1:A:65:PRO:HB2	1:A:75:THR:HG21	3	0.15	0.01	0.15
(1,1251)	1:A:65:PRO:HB2	1:A:75:THR:HG22	3	0.15	0.01	0.15
(1,1251)	1:A:65:PRO:HB2	1:A:75:THR:HG23	3	0.15	0.01	0.15
(1,2863)	1:A:7:LEU:HB3	1:A:34:GLU:HG2	3	0.15	0.04	0.14
(1,2863)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:9:LEU:HB2	3	0.15	0.04	0.14
(1,2716)	1:A:160:GLY:HA2	1:A:156:PHE:HD1	3	0.13	0.01	0.14
(1,2716)	1:A:160:GLY:HA2	1:A:156:PHE:HD2	3	0.13	0.01	0.14
(1,2716)	1:A:159:GLU:H	1:A:160:GLY:HA2	3	0.13	0.01	0.14
(1,888)	1:A:101:MET:HB3	1:A:102:VAL:H	3	0.13	0.02	0.12
(1,2091)	1:A:56:LYS:H	1:A:56:LYS:HB3	3	0.13	0.02	0.13
(1,3095)	1:A:13:HIS:HB2	1:A:76:ALA:HB2	3	0.13	0.02	0.11
(1,3095)	1:A:13:HIS:HB2	1:A:76:ALA:HB1	3	0.13	0.02	0.11
(1,3095)	1:A:13:HIS:HB2	1:A:76:ALA:HB3	3	0.13	0.02	0.11
(1,3095)	1:A:13:HIS:HB3	1:A:76:ALA:HB2	3	0.13	0.02	0.11
(1,3095)	1:A:13:HIS:HB3	1:A:76:ALA:HB1	3	0.13	0.02	0.11
(1,3095)	1:A:13:HIS:HB3	1:A:76:ALA:HB3	3	0.13	0.02	0.11
(1,830)	1:A:57:MET:H	1:A:52:ASN:HB2	3	0.12	0.02	0.11
(1,2390)	1:A:145:GLY:H	1:A:89:VAL:HG12	3	0.12	0.01	0.12
(1,2390)	1:A:145:GLY:H	1:A:89:VAL:HG11	3	0.12	0.01	0.12
(1,2390)	1:A:145:GLY:H	1:A:89:VAL:HG13	3	0.12	0.01	0.12
(1,2403)	1:A:19:SER:H	1:A:19:SER:HB2	3	0.12	0.0	0.12
(1,2707)	1:A:148:GLY:HA3	1:A:147:LEU:HD22	3	0.12	0.01	0.12
(1,2707)	1:A:148:GLY:HA3	1:A:147:LEU:HD21	3	0.12	0.01	0.12
(1,2707)	1:A:148:GLY:HA3	1:A:147:LEU:HD23	3	0.12	0.01	0.12

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)	Median (Å)
(1,2707)	1:A:148:GLY:HA3	1:A:149:VAL:HG22	3	0.12	0.01	0.12
(1,2707)	1:A:148:GLY:HA3	1:A:149:VAL:HG21	3	0.12	0.01	0.12
(1,2707)	1:A:148:GLY:HA3	1:A:149:VAL:HG23	3	0.12	0.01	0.12
(1,407)	1:A:142:LYS:H	1:A:140:ALA:HB2	3	0.12	0.01	0.11
(1,407)	1:A:142:LYS:H	1:A:140:ALA:HB1	3	0.12	0.01	0.11
(1,407)	1:A:142:LYS:H	1:A:140:ALA:HB3	3	0.12	0.01	0.11
(1,1658)	1:A:39:GLN:HB3	1:A:60:VAL:HG12	3	0.12	0.01	0.12
(1,1658)	1:A:39:GLN:HB3	1:A:60:VAL:HG11	3	0.12	0.01	0.12
(1,1658)	1:A:39:GLN:HB3	1:A:60:VAL:HG13	3	0.12	0.01	0.12
(1,2587)	1:A:55:SER:HA	1:A:56:LYS:HB2	3	0.12	0.01	0.11
(1,2587)	1:A:55:SER:HA	1:A:57:MET:HG2	3	0.12	0.01	0.11
(1,2587)	1:A:55:SER:HA	1:A:57:MET:HG3	3	0.12	0.01	0.11
(1,354)	1:A:129:GLN:HA	1:A:102:VAL:HG22	3	0.12	0.01	0.11
(1,354)	1:A:129:GLN:HA	1:A:102:VAL:HG21	3	0.12	0.01	0.11
(1,354)	1:A:129:GLN:HA	1:A:102:VAL:HG23	3	0.12	0.01	0.11
(1,354)	1:A:129:GLN:HA	1:A:102:VAL:HG12	3	0.12	0.01	0.11
(1,354)	1:A:129:GLN:HA	1:A:102:VAL:HG11	3	0.12	0.01	0.11
(1,354)	1:A:129:GLN:HA	1:A:102:VAL:HG13	3	0.12	0.01	0.11
(1,1223)	1:A:86:GLU:HB3	1:A:89:VAL:HG22	3	0.11	0.0	0.11
(1,1223)	1:A:86:GLU:HB3	1:A:89:VAL:HG21	3	0.11	0.0	0.11
(1,1223)	1:A:86:GLU:HB3	1:A:89:VAL:HG23	3	0.11	0.0	0.11
(1,1190)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:61:LYS:HE3	2	1.15	0.02	1.15
(1,770)	1:A:81:ASP:HB2	1:A:79:SER:HB2	2	1.05	0.49	1.05
(1,1863)	1:A:21:ALA:H	1:A:61:LYS:HE2	2	1.02	0.04	1.02
(1,454)	1:A:155:GLN:HE22	1:A:114:ALA:HB2	2	0.86	0.09	0.86
(1,454)	1:A:155:GLN:HE22	1:A:114:ALA:HB1	2	0.86	0.09	0.86
(1,454)	1:A:155:GLN:HE22	1:A:114:ALA:HB3	2	0.86	0.09	0.86
(1,44)	1:A:151:SER:HB3	1:A:123:THR:HA	2	0.56	0.01	0.56
(1,1185)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:61:LYS:HE3	2	0.44	0.01	0.44
(1,704)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:61:LYS:HE2	2	0.43	0.06	0.43
(1,704)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:61:LYS:HE2	2	0.43	0.06	0.43
(1,704)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:61:LYS:HE2	2	0.43	0.06	0.43
(1,2883)	1:A:62:GLU:HG2	1:A:22:PRO:HD2	2	0.36	0.02	0.36
(1,2883)	1:A:45:GLY:HA2	1:A:62:GLU:HG2	2	0.36	0.02	0.36
(1,2883)	1:A:149:VAL:HB	1:A:151:SER:HB3	2	0.36	0.02	0.36
(1,1133)	1:A:39:GLN:HE21	1:A:39:GLN:HG2	2	0.35	0.0	0.35
(1,3538)	1:A:152:GLY:H	1:A:151:SER:HB2	2	0.34	0.01	0.34
(1,3538)	1:A:152:GLY:H	1:A:153:PRO:HD2	2	0.34	0.01	0.34
(1,994)	1:A:61:LYS:HE3	1:A:50:THR:HB	2	0.34	0.13	0.34
(1,749)	1:A:98:MET:H	1:A:96:ASP:HB3	2	0.32	0.01	0.32
(1,2378)	1:A:87:GLN:HE21	1:A:87:GLN:HB3	2	0.27	0.01	0.27
(1,2952)	1:A:60:VAL:HB	1:A:46:CYS:HA	2	0.27	0.16	0.27

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Models <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)	Median (Å)
(1,2952)	1:A:101:MET:HG3	1:A:103:THR:HA	2	0.27	0.16	0.27
(1,1626)	1:A:130:LYS:HE2	1:A:132:THR:HG21	2	0.24	0.12	0.24
(1,1626)	1:A:130:LYS:HE2	1:A:132:THR:HG22	2	0.24	0.12	0.24
(1,1626)	1:A:130:LYS:HE2	1:A:132:THR:HG23	2	0.24	0.12	0.24
(1,932)	1:A:16:ASN:HD22	1:A:16:ASN:HB3	2	0.22	0.11	0.22
(1,1258)	1:A:86:GLU:HB2	1:A:151:SER:HB2	2	0.22	0.02	0.22
(1,2749)	1:A:82:ARG:HD3	1:A:82:ARG:HB2	2	0.21	0.0	0.21
(1,2749)	1:A:82:ARG:HD3	1:A:82:ARG:HB3	2	0.21	0.0	0.21
(1,173)	1:A:35:GLN:HE21	1:A:31:VAL:HG12	2	0.2	0.04	0.2
(1,173)	1:A:35:GLN:HE21	1:A:31:VAL:HG11	2	0.2	0.04	0.2
(1,173)	1:A:35:GLN:HE21	1:A:31:VAL:HG13	2	0.2	0.04	0.2
(1,2778)	1:A:17:LYS:HE3	1:A:17:LYS:HA	2	0.18	0.02	0.18
(1,2778)	1:A:113:CYS:HB2	1:A:133:PHE:HA	2	0.18	0.02	0.18
(1,3086)	1:A:37:ALA:HA	1:A:41:LYS:HG2	2	0.16	0.02	0.16
(1,3086)	1:A:41:LYS:HG2	1:A:40:CYS:HB3	2	0.16	0.02	0.16
(1,3220)	1:A:13:HIS:H	1:A:12:VAL:H	2	0.16	0.02	0.16
(1,3220)	1:A:13:HIS:H	1:A:13:HIS:HD2	2	0.16	0.02	0.16
(1,2311)	1:A:112:ALA:H	1:A:65:PRO:HD2	2	0.15	0.03	0.15
(1,2656)	1:A:107:ALA:HA	1:A:85:PHE:HZ	2	0.15	0.0	0.15
(1,2656)	1:A:156:PHE:H	1:A:155:GLN:HA	2	0.15	0.0	0.15
(1,1605)	1:A:33:LEU:HD22	1:A:74:LYS:HB3	2	0.14	0.01	0.14
(1,1605)	1:A:33:LEU:HD21	1:A:74:LYS:HB3	2	0.14	0.01	0.14
(1,1605)	1:A:33:LEU:HD23	1:A:74:LYS:HB3	2	0.14	0.01	0.14
(1,1841)	1:A:107:ALA:H	1:A:11:CYS:HA	2	0.14	0.0	0.14
(1,2937)	1:A:101:MET:HG2	1:A:67:LEU:H	2	0.14	0.0	0.14
(1,2937)	1:A:102:VAL:H	1:A:101:MET:HG2	2	0.14	0.0	0.14
(1,3461)	1:A:110:GLN:HE22	1:A:110:GLN:HA	2	0.14	0.01	0.14
(1,3461)	1:A:110:GLN:HE22	1:A:157:CYS:HB3	2	0.14	0.01	0.14
(1,3461)	1:A:155:GLN:HE22	1:A:154:LYS:HA	2	0.14	0.01	0.14
(1,3184)	1:A:76:ALA:H	1:A:74:LYS:HA	2	0.13	0.0	0.13
(1,3184)	1:A:76:ALA:H	1:A:48:HIS:HA	2	0.13	0.0	0.13
(1,938)	1:A:16:ASN:HD22	1:A:16:ASN:HB2	2	0.12	0.01	0.12
(1,1213)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:57:MET:HG2	2	0.12	0.02	0.12
(1,1213)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:57:MET:HG3	2	0.12	0.02	0.12
(1,2529)	1:A:116:ASP:HA	1:A:64:LYS:HG2	2	0.12	0.01	0.12
(1,2529)	1:A:115:ALA:HB2	1:A:116:ASP:HA	2	0.12	0.01	0.12
(1,2529)	1:A:115:ALA:HB1	1:A:116:ASP:HA	2	0.12	0.01	0.12
(1,2529)	1:A:115:ALA:HB3	1:A:116:ASP:HA	2	0.12	0.01	0.12
(1,2858)	1:A:16:ASN:HB3	1:A:17:LYS:HG3	2	0.12	0.02	0.12
(1,2858)	1:A:16:ASN:HB3	1:A:71:THR:HG21	2	0.12	0.02	0.12
(1,2858)	1:A:16:ASN:HB3	1:A:71:THR:HG22	2	0.12	0.02	0.12
(1,2858)	1:A:16:ASN:HB3	1:A:71:THR:HG23	2	0.12	0.02	0.12

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

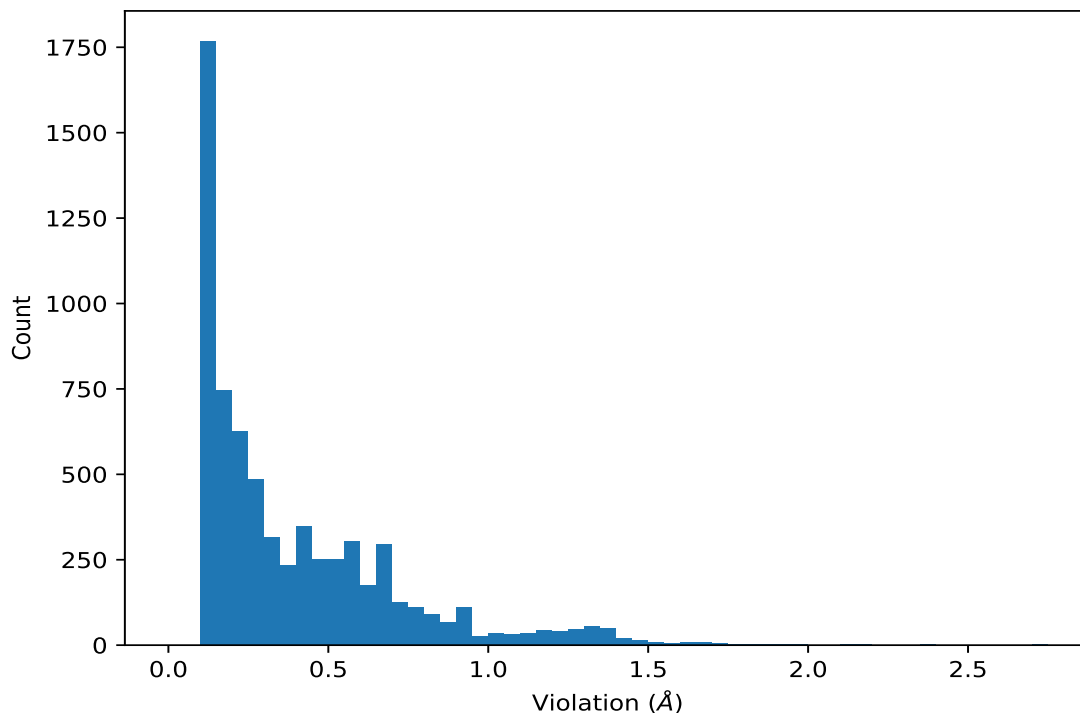
Key	Atom-1	Atom-2	Models <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)	Median (Å)
(1,1179)	1:A:64:LYS:HB2	1:A:112:ALA:HA	2	0.12	0.0	0.12
(1,1179)	1:A:64:LYS:HB3	1:A:112:ALA:HA	2	0.12	0.0	0.12
(1,1215)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:28:VAL:HG22	2	0.12	0.01	0.12
(1,1215)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:28:VAL:HG21	2	0.12	0.01	0.12
(1,1215)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:28:VAL:HG23	2	0.12	0.01	0.12
(1,1215)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:28:VAL:HG12	2	0.12	0.01	0.12
(1,1215)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:28:VAL:HG11	2	0.12	0.01	0.12
(1,1215)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:28:VAL:HG13	2	0.12	0.01	0.12
(1,1799)	1:A:120:GLU:H	1:A:120:GLU:HG3	2	0.12	0.01	0.12
(1,3355)	1:A:146:VAL:H	1:A:145:GLY:HA3	2	0.12	0.0	0.12
(1,3355)	1:A:64:LYS:H	1:A:112:ALA:HA	2	0.12	0.0	0.12
(1,755)	1:A:113:CYS:HB3	1:A:112:ALA:HB2	2	0.12	0.0	0.12
(1,755)	1:A:113:CYS:HB3	1:A:112:ALA:HB1	2	0.12	0.0	0.12
(1,755)	1:A:113:CYS:HB3	1:A:112:ALA:HB3	2	0.12	0.0	0.12
(1,894)	1:A:102:VAL:H	1:A:101:MET:HB2	2	0.12	0.0	0.12
(1,1637)	1:A:106:SER:HA	1:A:103:THR:HG21	2	0.12	0.0	0.12
(1,1637)	1:A:106:SER:HA	1:A:103:THR:HG22	2	0.12	0.0	0.12
(1,1637)	1:A:106:SER:HA	1:A:103:THR:HG23	2	0.12	0.0	0.12
(1,2928)	1:A:39:GLN:HG2	1:A:36:CYS:HA	2	0.12	0.0	0.12
(1,2928)	1:A:39:GLN:HG3	1:A:27:PRO:HA	2	0.12	0.0	0.12
(1,2928)	1:A:39:GLN:HG3	1:A:36:CYS:HA	2	0.12	0.0	0.12
(1,2938)	1:A:57:MET:HG2	1:A:50:THR:HG21	2	0.12	0.0	0.12
(1,2938)	1:A:57:MET:HG2	1:A:50:THR:HG22	2	0.12	0.0	0.12
(1,2938)	1:A:57:MET:HG2	1:A:50:THR:HG23	2	0.12	0.0	0.12
(1,2938)	1:A:57:MET:HG3	1:A:50:THR:HG21	2	0.12	0.0	0.12
(1,2938)	1:A:57:MET:HG3	1:A:50:THR:HG22	2	0.12	0.0	0.12
(1,2938)	1:A:57:MET:HG3	1:A:50:THR:HG23	2	0.12	0.0	0.12
(1,2938)	1:A:101:MET:HG2	1:A:103:THR:HG21	2	0.12	0.0	0.12
(1,2938)	1:A:101:MET:HG2	1:A:103:THR:HG22	2	0.12	0.0	0.12
(1,2938)	1:A:101:MET:HG2	1:A:103:THR:HG23	2	0.12	0.0	0.12
(1,1130)	1:A:39:GLN:HE22	1:A:39:GLN:HG2	2	0.11	0.0	0.11
(1,2586)	1:A:55:SER:HA	1:A:52:ASN:HB3	2	0.11	0.0	0.11
(1,2586)	1:A:55:SER:HA	1:A:56:LYS:HE3	2	0.11	0.0	0.11
(1,3139)	1:A:9:LEU:HB2	1:A:12:VAL:HG12	2	0.11	0.0	0.11
(1,3139)	1:A:9:LEU:HB2	1:A:12:VAL:HG11	2	0.11	0.0	0.11
(1,3139)	1:A:9:LEU:HB2	1:A:12:VAL:HG13	2	0.11	0.0	0.11
(1,3139)	1:A:12:VAL:HG12	1:A:33:LEU:HB3	2	0.11	0.0	0.11
(1,3139)	1:A:12:VAL:HG11	1:A:33:LEU:HB3	2	0.11	0.0	0.11
(1,3139)	1:A:12:VAL:HG13	1:A:33:LEU:HB3	2	0.11	0.0	0.11
(1,3302)	1:A:142:LYS:H	1:A:141:PHE:HD1	2	0.11	0.0	0.11
(1,3302)	1:A:142:LYS:H	1:A:141:PHE:HD2	2	0.11	0.0	0.11
(1,3302)	1:A:142:LYS:H	1:A:140:ALA:H	2	0.11	0.0	0.11

<sup>1</sup>Number of violated models, <sup>2</sup>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)
(1,1414)	1:A:134:LYS:HG3	1:A:96:ASP:HB2	10	2.72
(1,535)	1:A:4:PRO:HD3	1:A:35:GLN:HB3	1	2.4
(1,535)	1:A:4:PRO:HD3	1:A:35:GLN:HB3	6	2.17
(1,535)	1:A:4:PRO:HD3	1:A:35:GLN:HB3	8	2.14
(1,1405)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:145:GLY:HA3	4	1.99
(1,1405)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:145:GLY:HA3	5	1.99
(1,1405)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:145:GLY:HA3	6	1.96

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,535)	1:A:4:PRO:HD3	1:A:35:GLN:HB3	4	1.95
(1,1405)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:145:GLY:HA3	2	1.95
(1,535)	1:A:4:PRO:HD3	1:A:35:GLN:HB3	5	1.9
(1,535)	1:A:4:PRO:HD3	1:A:35:GLN:HB3	3	1.86
(1,1405)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:145:GLY:HA3	7	1.82
(1,1447)	1:A:97:VAL:HB	1:A:118:SER:HB2	7	1.81
(1,1405)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:145:GLY:HA3	3	1.78
(1,1405)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:145:GLY:HA3	8	1.78
(1,1405)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:145:GLY:HA3	1	1.77
(1,1447)	1:A:97:VAL:HB	1:A:118:SER:HB2	1	1.74
(1,1081)	1:A:4:PRO:HB3	1:A:32:SER:HB3	8	1.74
(1,1447)	1:A:97:VAL:HB	1:A:118:SER:HB2	4	1.73
(1,535)	1:A:4:PRO:HD3	1:A:35:GLN:HB3	7	1.72
(1,1405)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:145:GLY:HA3	9	1.72
(1,1447)	1:A:97:VAL:HB	1:A:118:SER:HB2	6	1.7
(1,1081)	1:A:4:PRO:HB3	1:A:32:SER:HB3	5	1.7
(1,1318)	1:A:127:HIS:HB2	1:A:128:ASP:HB2	8	1.69
(1,1081)	1:A:4:PRO:HB3	1:A:32:SER:HB3	3	1.69
(1,1405)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:145:GLY:HA3	10	1.67
(1,1318)	1:A:127:HIS:HB2	1:A:128:ASP:HB2	2	1.67
(1,1318)	1:A:127:HIS:HB2	1:A:128:ASP:HB2	10	1.67
(1,800)	1:A:128:ASP:HB2	1:A:130:LYS:HB3	9	1.66
(1,1447)	1:A:97:VAL:HB	1:A:118:SER:HB2	8	1.65
(1,1318)	1:A:127:HIS:HB2	1:A:128:ASP:HB2	7	1.65
(1,1318)	1:A:127:HIS:HB2	1:A:128:ASP:HB2	4	1.62
(1,1318)	1:A:127:HIS:HB2	1:A:128:ASP:HB2	6	1.62
(1,535)	1:A:4:PRO:HD3	1:A:35:GLN:HB3	10	1.61
(1,973)	1:A:85:PHE:HB3	1:A:82:ARG:HB2	8	1.6
(1,1318)	1:A:127:HIS:HB2	1:A:128:ASP:HB2	5	1.6
(1,1447)	1:A:97:VAL:HB	1:A:118:SER:HB2	10	1.58
(1,1278)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:77:SER:H	3	1.58
(1,535)	1:A:4:PRO:HD3	1:A:35:GLN:HB3	2	1.57
(1,1447)	1:A:97:VAL:HB	1:A:118:SER:HB2	2	1.57
(1,1318)	1:A:127:HIS:HB2	1:A:128:ASP:HB2	3	1.57
(1,770)	1:A:81:ASP:HB2	1:A:79:SER:HB2	4	1.54
(1,1447)	1:A:97:VAL:HB	1:A:118:SER:HB2	3	1.53
(1,535)	1:A:4:PRO:HD3	1:A:35:GLN:HB3	9	1.52
(1,1374)	1:A:27:PRO:HG2	1:A:23:THR:HB	2	1.52
(1,973)	1:A:85:PHE:HB3	1:A:82:ARG:HB2	7	1.51
(1,1318)	1:A:127:HIS:HB2	1:A:128:ASP:HB2	1	1.51
(1,1191)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:61:LYS:HG2	5	1.51
(1,1278)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:77:SER:H	8	1.5

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,973)	1:A:85:PHE:HB3	1:A:82:ARG:HB2	9	1.49
(1,1278)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:77:SER:H	2	1.49
(1,1191)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:61:LYS:HG2	7	1.49
(1,973)	1:A:85:PHE:HB3	1:A:82:ARG:HB2	4	1.48
(1,329)	1:A:100:ALA:HB2	1:A:130:LYS:HE2	4	1.47
(1,329)	1:A:100:ALA:HB1	1:A:130:LYS:HE2	4	1.47
(1,329)	1:A:100:ALA:HB3	1:A:130:LYS:HE2	4	1.47
(1,1278)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:77:SER:H	6	1.47
(1,1278)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:77:SER:H	7	1.47
(1,1191)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:61:LYS:HG2	2	1.47
(1,1191)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:61:LYS:HG2	10	1.47
(1,973)	1:A:85:PHE:HB3	1:A:82:ARG:HB2	3	1.46
(1,1191)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:61:LYS:HG2	6	1.46
(1,2811)	1:A:128:ASP:HB2	1:A:130:LYS:HG2	9	1.45
(1,2811)	1:A:128:ASP:HB2	1:A:130:LYS:HG3	9	1.45
(1,1278)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:77:SER:H	9	1.45
(1,1191)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:61:LYS:HG2	3	1.45
(1,973)	1:A:85:PHE:HB3	1:A:82:ARG:HB2	6	1.44
(1,2747)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:59:HIS:HB3	3	1.44
(1,2747)	1:A:82:ARG:HD3	1:A:85:PHE:HB3	3	1.44
(1,1852)	1:A:60:VAL:H	1:A:27:PRO:HG2	2	1.44
(1,1081)	1:A:4:PRO:HB3	1:A:32:SER:HB3	6	1.44
(1,1191)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:61:LYS:HG2	9	1.43
(1,973)	1:A:85:PHE:HB3	1:A:82:ARG:HB2	2	1.42
(1,1954)	1:A:144:ARG:H	1:A:142:LYS:HG3	8	1.42
(1,1852)	1:A:60:VAL:H	1:A:27:PRO:HG2	9	1.42
(1,1374)	1:A:27:PRO:HG2	1:A:23:THR:HB	5	1.42
(1,1191)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:61:LYS:HG2	8	1.42
(1,1131)	1:A:57:MET:HG2	1:A:59:HIS:HB3	5	1.42
(1,1131)	1:A:57:MET:HG3	1:A:59:HIS:HB3	5	1.42
(1,3274)	1:A:67:LEU:H	1:A:17:LYS:HE2	10	1.41
(1,3274)	1:A:67:LEU:H	1:A:68:TYR:HB2	10	1.41
(1,329)	1:A:100:ALA:HB2	1:A:130:LYS:HE2	6	1.4
(1,329)	1:A:100:ALA:HB1	1:A:130:LYS:HE2	6	1.4
(1,329)	1:A:100:ALA:HB3	1:A:130:LYS:HE2	6	1.4
(1,3274)	1:A:67:LEU:H	1:A:17:LYS:HE2	7	1.4
(1,3274)	1:A:67:LEU:H	1:A:68:TYR:HB2	7	1.4
(1,2981)	1:A:41:LYS:HD3	1:A:38:ALA:H	8	1.4
(1,2981)	1:A:40:CYS:H	1:A:41:LYS:HD3	8	1.4
(1,152)	1:A:40:CYS:HA	1:A:39:GLN:HG2	2	1.4
(1,1191)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:61:LYS:HG2	1	1.4
(1,1131)	1:A:57:MET:HG2	1:A:59:HIS:HB3	2	1.4

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1131)	1:A:57:MET:HG3	1:A:59:HIS:HB3	2	1.4
(1,1081)	1:A:4:PRO:HB3	1:A:32:SER:HB3	2	1.4
(1,2981)	1:A:41:LYS:HD3	1:A:38:ALA:H	1	1.39
(1,2981)	1:A:40:CYS:H	1:A:41:LYS:HD3	1	1.39
(1,1131)	1:A:57:MET:HG2	1:A:59:HIS:HB3	10	1.39
(1,1131)	1:A:57:MET:HG3	1:A:59:HIS:HB3	10	1.39
(1,329)	1:A:100:ALA:HB2	1:A:130:LYS:HE2	5	1.38
(1,329)	1:A:100:ALA:HB1	1:A:130:LYS:HE2	5	1.38
(1,329)	1:A:100:ALA:HB3	1:A:130:LYS:HE2	5	1.38
(1,3274)	1:A:67:LEU:H	1:A:17:LYS:HE2	6	1.38
(1,3274)	1:A:67:LEU:H	1:A:68:TYR:HB2	6	1.38
(1,2981)	1:A:41:LYS:HD3	1:A:38:ALA:H	10	1.38
(1,2981)	1:A:40:CYS:H	1:A:41:LYS:HD3	10	1.38
(1,1852)	1:A:60:VAL:H	1:A:27:PRO:HG2	4	1.38
(1,1476)	1:A:33:LEU:HD12	1:A:14:SER:HB2	3	1.38
(1,1476)	1:A:33:LEU:HD11	1:A:14:SER:HB2	3	1.38
(1,1476)	1:A:33:LEU:HD13	1:A:14:SER:HB2	3	1.38
(1,1374)	1:A:27:PRO:HG2	1:A:23:THR:HB	3	1.38
(1,1278)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:77:SER:H	1	1.38
(1,1131)	1:A:57:MET:HG2	1:A:59:HIS:HB3	4	1.38
(1,1131)	1:A:57:MET:HG3	1:A:59:HIS:HB3	4	1.38
(1,2275)	1:A:40:CYS:H	1:A:41:LYS:HB3	9	1.37
(1,1852)	1:A:60:VAL:H	1:A:27:PRO:HG2	3	1.37
(1,1852)	1:A:60:VAL:H	1:A:27:PRO:HG2	6	1.37
(1,1298)	1:A:48:HIS:HB3	1:A:65:PRO:HG2	4	1.37
(1,1297)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:76:ALA:HB2	3	1.37
(1,1297)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:76:ALA:HB1	3	1.37
(1,1297)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:76:ALA:HB3	3	1.37
(1,1131)	1:A:57:MET:HG2	1:A:59:HIS:HB3	6	1.36
(1,1131)	1:A:57:MET:HG3	1:A:59:HIS:HB3	6	1.36
(1,973)	1:A:85:PHE:HB3	1:A:82:ARG:HB2	5	1.35
(1,2275)	1:A:40:CYS:H	1:A:41:LYS:HB3	3	1.35
(1,2275)	1:A:40:CYS:H	1:A:41:LYS:HB3	5	1.35
(1,2275)	1:A:40:CYS:H	1:A:41:LYS:HB3	7	1.35
(1,2275)	1:A:40:CYS:H	1:A:41:LYS:HB3	8	1.35
(1,2275)	1:A:40:CYS:H	1:A:41:LYS:HB3	10	1.35
(1,1852)	1:A:60:VAL:H	1:A:27:PRO:HG2	5	1.35
(1,1131)	1:A:57:MET:HG2	1:A:59:HIS:HB3	7	1.35
(1,1131)	1:A:57:MET:HG3	1:A:59:HIS:HB3	7	1.35
(1,437)	1:A:38:ALA:HA	1:A:41:LYS:HB3	3	1.34
(1,329)	1:A:100:ALA:HB2	1:A:130:LYS:HE2	7	1.34
(1,329)	1:A:100:ALA:HB1	1:A:130:LYS:HE2	7	1.34

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,329)	1:A:100:ALA:HB3	1:A:130:LYS:HE2	7	1.34
(1,2698)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:74:LYS:HB3	4	1.34
(1,2698)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:52:ASN:HB2	4	1.34
(1,2698)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:74:LYS:HB3	9	1.34
(1,2698)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:52:ASN:HB2	9	1.34
(1,2275)	1:A:40:CYS:H	1:A:41:LYS:HB3	1	1.34
(1,2275)	1:A:40:CYS:H	1:A:41:LYS:HB3	2	1.34
(1,2275)	1:A:40:CYS:H	1:A:41:LYS:HB3	4	1.34
(1,1852)	1:A:60:VAL:H	1:A:27:PRO:HG2	7	1.34
(1,1852)	1:A:60:VAL:H	1:A:27:PRO:HG2	8	1.34
(1,152)	1:A:40:CYS:HA	1:A:39:GLN:HG2	6	1.34
(1,1414)	1:A:134:LYS:HG3	1:A:96:ASP:HB2	9	1.34
(1,1131)	1:A:57:MET:HG2	1:A:59:HIS:HB3	3	1.34
(1,1131)	1:A:57:MET:HG3	1:A:59:HIS:HB3	3	1.34
(1,437)	1:A:38:ALA:HA	1:A:41:LYS:HB3	10	1.33
(1,2747)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:59:HIS:HB3	8	1.33
(1,2747)	1:A:82:ARG:HD3	1:A:85:PHE:HB3	8	1.33
(1,2383)	1:A:129:GLN:HE22	1:A:104:SER:HB2	9	1.33
(1,2383)	1:A:129:GLN:HE22	1:A:104:SER:HB3	9	1.33
(1,2275)	1:A:40:CYS:H	1:A:41:LYS:HB3	6	1.33
(1,1819)	1:A:53:ASP:H	1:A:74:LYS:HB3	1	1.33
(1,152)	1:A:40:CYS:HA	1:A:39:GLN:HG2	1	1.33
(1,152)	1:A:40:CYS:HA	1:A:39:GLN:HG2	3	1.33
(1,152)	1:A:40:CYS:HA	1:A:39:GLN:HG2	10	1.33
(1,1476)	1:A:33:LEU:HD12	1:A:14:SER:HB2	8	1.33
(1,1476)	1:A:33:LEU:HD11	1:A:14:SER:HB2	8	1.33
(1,1476)	1:A:33:LEU:HD13	1:A:14:SER:HB2	8	1.33
(1,1131)	1:A:57:MET:HG2	1:A:59:HIS:HB3	1	1.33
(1,1131)	1:A:57:MET:HG3	1:A:59:HIS:HB3	1	1.33
(1,1131)	1:A:57:MET:HG2	1:A:59:HIS:HB3	9	1.33
(1,1131)	1:A:57:MET:HG3	1:A:59:HIS:HB3	9	1.33
(1,1081)	1:A:4:PRO:HB3	1:A:32:SER:HB3	1	1.33
(1,797)	1:A:130:LYS:H	1:A:128:ASP:HB2	9	1.32
(1,2383)	1:A:129:GLN:HE22	1:A:104:SER:HB2	10	1.32
(1,2383)	1:A:129:GLN:HE22	1:A:104:SER:HB3	10	1.32
(1,1819)	1:A:53:ASP:H	1:A:74:LYS:HB3	9	1.32
(1,152)	1:A:40:CYS:HA	1:A:39:GLN:HG2	4	1.32
(1,152)	1:A:40:CYS:HA	1:A:39:GLN:HG2	5	1.32
(1,152)	1:A:40:CYS:HA	1:A:39:GLN:HG2	9	1.32
(1,118)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:52:ASN:HA	4	1.32
(1,973)	1:A:85:PHE:HB3	1:A:82:ARG:HB2	10	1.31
(1,420)	1:A:111:ALA:HB2	1:A:65:PRO:HG2	4	1.31

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,420)	1:A:111:ALA:HB1	1:A:65:PRO:HG2	4	1.31
(1,420)	1:A:111:ALA:HB3	1:A:65:PRO:HG2	4	1.31
(1,1374)	1:A:27:PRO:HG2	1:A:23:THR:HB	4	1.31
(1,1131)	1:A:57:MET:HG2	1:A:59:HIS:HB3	8	1.31
(1,1131)	1:A:57:MET:HG3	1:A:59:HIS:HB3	8	1.31
(1,1081)	1:A:4:PRO:HB3	1:A:32:SER:HB3	10	1.31
(1,2698)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:74:LYS:HB3	3	1.3
(1,2698)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:52:ASN:HB2	3	1.3
(1,1852)	1:A:60:VAL:H	1:A:27:PRO:HG2	10	1.3
(1,1081)	1:A:4:PRO:HB3	1:A:32:SER:HB3	9	1.3
(1,973)	1:A:85:PHE:HB3	1:A:82:ARG:HB2	1	1.29
(1,329)	1:A:100:ALA:HB2	1:A:130:LYS:HE2	2	1.29
(1,329)	1:A:100:ALA:HB1	1:A:130:LYS:HE2	2	1.29
(1,329)	1:A:100:ALA:HB3	1:A:130:LYS:HE2	2	1.29
(1,2981)	1:A:41:LYS:HD3	1:A:38:ALA:H	4	1.29
(1,2981)	1:A:40:CYS:H	1:A:41:LYS:HD3	4	1.29
(1,2698)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:74:LYS:HB3	2	1.29
(1,2698)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:52:ASN:HB2	2	1.29
(1,1414)	1:A:134:LYS:HG3	1:A:96:ASP:HB2	3	1.29
(1,1297)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:76:ALA:HB2	9	1.29
(1,1297)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:76:ALA:HB1	9	1.29
(1,1297)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:76:ALA:HB3	9	1.29
(1,1191)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:61:LYS:HG2	4	1.29
(1,437)	1:A:38:ALA:HA	1:A:41:LYS:HB3	8	1.28
(1,1819)	1:A:53:ASP:H	1:A:74:LYS:HB3	6	1.28
(1,1819)	1:A:53:ASP:H	1:A:74:LYS:HB3	10	1.28
(1,1374)	1:A:27:PRO:HG2	1:A:23:THR:HB	1	1.28
(1,420)	1:A:111:ALA:HB2	1:A:65:PRO:HG2	5	1.27
(1,420)	1:A:111:ALA:HB1	1:A:65:PRO:HG2	5	1.27
(1,420)	1:A:111:ALA:HB3	1:A:65:PRO:HG2	5	1.27
(1,420)	1:A:111:ALA:HB2	1:A:65:PRO:HG2	9	1.27
(1,420)	1:A:111:ALA:HB1	1:A:65:PRO:HG2	9	1.27
(1,420)	1:A:111:ALA:HB3	1:A:65:PRO:HG2	9	1.27
(1,1852)	1:A:60:VAL:H	1:A:27:PRO:HG2	1	1.27
(1,152)	1:A:40:CYS:HA	1:A:39:GLN:HG2	7	1.27
(1,1476)	1:A:33:LEU:HD12	1:A:14:SER:HB2	2	1.27
(1,1476)	1:A:33:LEU:HD11	1:A:14:SER:HB2	2	1.27
(1,1476)	1:A:33:LEU:HD13	1:A:14:SER:HB2	2	1.27
(1,437)	1:A:38:ALA:HA	1:A:41:LYS:HB3	7	1.26
(1,2981)	1:A:41:LYS:HD3	1:A:38:ALA:H	5	1.26
(1,2981)	1:A:40:CYS:H	1:A:41:LYS:HD3	5	1.26
(1,2981)	1:A:41:LYS:HD3	1:A:38:ALA:H	9	1.26

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2981)	1:A:40:CYS:H	1:A:41:LYS:HD3	9	1.26
(1,2698)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:74:LYS:HB3	5	1.26
(1,2698)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:52:ASN:HB2	5	1.26
(1,1454)	1:A:78:ARG:HG3	1:A:156:PHE:HZ	1	1.26
(1,2981)	1:A:41:LYS:HD3	1:A:38:ALA:H	3	1.25
(1,2981)	1:A:40:CYS:H	1:A:41:LYS:HD3	3	1.25
(1,2698)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:74:LYS:HB3	8	1.25
(1,2698)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:52:ASN:HB2	8	1.25
(1,152)	1:A:40:CYS:HA	1:A:39:GLN:HG2	8	1.25
(1,1476)	1:A:33:LEU:HD12	1:A:14:SER:HB2	5	1.25
(1,1476)	1:A:33:LEU:HD11	1:A:14:SER:HB2	5	1.25
(1,1476)	1:A:33:LEU:HD13	1:A:14:SER:HB2	5	1.25
(1,1081)	1:A:4:PRO:HB3	1:A:32:SER:HB3	7	1.25
(1,729)	1:A:17:LYS:HE2	1:A:67:LEU:HD22	10	1.24
(1,729)	1:A:17:LYS:HE2	1:A:67:LEU:HD21	10	1.24
(1,729)	1:A:17:LYS:HE2	1:A:67:LEU:HD23	10	1.24
(1,437)	1:A:38:ALA:HA	1:A:41:LYS:HB3	1	1.24
(1,437)	1:A:38:ALA:HA	1:A:41:LYS:HB3	5	1.24
(1,2698)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:74:LYS:HB3	10	1.24
(1,2698)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:52:ASN:HB2	10	1.24
(1,1819)	1:A:53:ASP:H	1:A:74:LYS:HB3	3	1.24
(1,1454)	1:A:78:ARG:HG3	1:A:156:PHE:HZ	2	1.24
(1,1374)	1:A:27:PRO:HG2	1:A:23:THR:HB	8	1.24
(1,1298)	1:A:48:HIS:HB3	1:A:65:PRO:HG2	9	1.24
(1,437)	1:A:38:ALA:HA	1:A:41:LYS:HB3	4	1.23
(1,437)	1:A:38:ALA:HA	1:A:41:LYS:HB3	9	1.23
(1,2698)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:74:LYS:HB3	7	1.23
(1,2698)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:52:ASN:HB2	7	1.23
(1,1454)	1:A:78:ARG:HG3	1:A:156:PHE:HZ	4	1.23
(1,1454)	1:A:78:ARG:HG3	1:A:156:PHE:HZ	7	1.23
(1,1414)	1:A:134:LYS:HG3	1:A:96:ASP:HB2	7	1.23
(1,1297)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:76:ALA:HB2	1	1.23
(1,1297)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:76:ALA:HB1	1	1.23
(1,1297)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:76:ALA:HB3	1	1.23
(1,2698)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:74:LYS:HB3	6	1.22
(1,2698)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:52:ASN:HB2	6	1.22
(1,1476)	1:A:33:LEU:HD12	1:A:14:SER:HB2	9	1.22
(1,1476)	1:A:33:LEU:HD11	1:A:14:SER:HB2	9	1.22
(1,1476)	1:A:33:LEU:HD13	1:A:14:SER:HB2	9	1.22
(1,1414)	1:A:134:LYS:HG3	1:A:96:ASP:HB2	4	1.22
(1,1297)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:76:ALA:HB2	2	1.22
(1,1297)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:76:ALA:HB1	2	1.22

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1297)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:76:ALA:HB3	2	1.22
(1,1297)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:76:ALA:HB2	8	1.22
(1,1297)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:76:ALA:HB1	8	1.22
(1,1297)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:76:ALA:HB3	8	1.22
(1,1183)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:58:CYS:HA	3	1.22
(1,1374)	1:A:27:PRO:HG2	1:A:23:THR:HB	10	1.21
(1,1279)	1:A:105:GLN:HG3	1:A:67:LEU:HD12	10	1.21
(1,1279)	1:A:105:GLN:HG3	1:A:67:LEU:HD11	10	1.21
(1,1279)	1:A:105:GLN:HG3	1:A:67:LEU:HD13	10	1.21
(1,1183)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:58:CYS:HA	2	1.21
(1,1183)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:58:CYS:HA	8	1.21
(1,2981)	1:A:41:LYS:HD3	1:A:38:ALA:H	7	1.2
(1,2981)	1:A:40:CYS:H	1:A:41:LYS:HD3	7	1.2
(1,2698)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:74:LYS:HB3	1	1.2
(1,2698)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:52:ASN:HB2	1	1.2
(1,2383)	1:A:129:GLN:HE22	1:A:104:SER:HB2	2	1.2
(1,2383)	1:A:129:GLN:HE22	1:A:104:SER:HB3	2	1.2
(1,1819)	1:A:53:ASP:H	1:A:74:LYS:HB3	2	1.2
(1,1183)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:58:CYS:HA	1	1.2
(1,1183)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:58:CYS:HA	6	1.2
(1,1183)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:58:CYS:HA	7	1.2
(1,1183)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:58:CYS:HA	9	1.2
(1,1476)	1:A:33:LEU:HD12	1:A:14:SER:HB2	4	1.19
(1,1476)	1:A:33:LEU:HD11	1:A:14:SER:HB2	4	1.19
(1,1476)	1:A:33:LEU:HD13	1:A:14:SER:HB2	4	1.19
(1,1183)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:58:CYS:HA	5	1.19
(1,1183)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:58:CYS:HA	10	1.19
(1,118)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:52:ASN:HA	3	1.19
(1,437)	1:A:38:ALA:HA	1:A:41:LYS:HB3	2	1.18
(1,437)	1:A:38:ALA:HA	1:A:41:LYS:HB3	6	1.18
(1,1414)	1:A:134:LYS:HG3	1:A:96:ASP:HB2	6	1.18
(1,1279)	1:A:105:GLN:HG3	1:A:67:LEU:HD12	5	1.18
(1,1279)	1:A:105:GLN:HG3	1:A:67:LEU:HD11	5	1.18
(1,1279)	1:A:105:GLN:HG3	1:A:67:LEU:HD13	5	1.18
(1,1183)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:58:CYS:HA	4	1.18
(1,118)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:52:ASN:HA	2	1.18
(1,2981)	1:A:41:LYS:HD3	1:A:38:ALA:H	2	1.17
(1,2981)	1:A:40:CYS:H	1:A:41:LYS:HD3	2	1.17
(1,1819)	1:A:53:ASP:H	1:A:74:LYS:HB3	8	1.17
(1,1454)	1:A:78:ARG:HG3	1:A:156:PHE:HZ	10	1.17
(1,1374)	1:A:27:PRO:HG2	1:A:23:THR:HB	7	1.17
(1,1297)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:76:ALA:HB2	6	1.17

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1297)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:76:ALA:HB1	6	1.17
(1,1297)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:76:ALA:HB3	6	1.17
(1,1297)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:76:ALA:HB2	7	1.17
(1,1297)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:76:ALA:HB1	7	1.17
(1,1297)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:76:ALA:HB3	7	1.17
(1,1190)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:61:LYS:HE3	4	1.17
(1,1454)	1:A:78:ARG:HG3	1:A:156:PHE:HZ	9	1.16
(1,1414)	1:A:134:LYS:HG3	1:A:96:ASP:HB2	2	1.16
(1,1414)	1:A:134:LYS:HG3	1:A:96:ASP:HB2	8	1.16
(1,1279)	1:A:105:GLN:HG3	1:A:67:LEU:HD12	3	1.16
(1,1279)	1:A:105:GLN:HG3	1:A:67:LEU:HD11	3	1.16
(1,1279)	1:A:105:GLN:HG3	1:A:67:LEU:HD13	3	1.16
(1,420)	1:A:111:ALA:HB2	1:A:65:PRO:HG2	6	1.15
(1,420)	1:A:111:ALA:HB1	1:A:65:PRO:HG2	6	1.15
(1,420)	1:A:111:ALA:HB3	1:A:65:PRO:HG2	6	1.15
(1,1437)	1:A:7:LEU:HG	1:A:32:SER:HB3	3	1.15
(1,1279)	1:A:105:GLN:HG3	1:A:67:LEU:HD12	9	1.15
(1,1279)	1:A:105:GLN:HG3	1:A:67:LEU:HD11	9	1.15
(1,1279)	1:A:105:GLN:HG3	1:A:67:LEU:HD13	9	1.15
(1,118)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:52:ASN:HA	9	1.15
(1,1374)	1:A:27:PRO:HG2	1:A:23:THR:HB	6	1.14
(1,1233)	1:A:146:VAL:HB	1:A:88:HIS:HB2	10	1.14
(1,1190)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:61:LYS:HE3	3	1.14
(1,329)	1:A:100:ALA:HB2	1:A:130:LYS:HE2	9	1.13
(1,329)	1:A:100:ALA:HB1	1:A:130:LYS:HE2	9	1.13
(1,329)	1:A:100:ALA:HB3	1:A:130:LYS:HE2	9	1.13
(1,1454)	1:A:78:ARG:HG3	1:A:156:PHE:HZ	5	1.13
(1,1454)	1:A:78:ARG:HG3	1:A:156:PHE:HZ	6	1.13
(1,1414)	1:A:134:LYS:HG3	1:A:96:ASP:HB2	5	1.13
(1,1298)	1:A:48:HIS:HB3	1:A:65:PRO:HG2	5	1.13
(1,1279)	1:A:105:GLN:HG3	1:A:67:LEU:HD12	4	1.13
(1,1279)	1:A:105:GLN:HG3	1:A:67:LEU:HD11	4	1.13
(1,1279)	1:A:105:GLN:HG3	1:A:67:LEU:HD13	4	1.13
(1,118)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:52:ASN:HA	5	1.13
(1,1819)	1:A:53:ASP:H	1:A:74:LYS:HB3	5	1.12
(1,1437)	1:A:7:LEU:HG	1:A:32:SER:HB3	7	1.12
(1,2981)	1:A:41:LYS:HD3	1:A:38:ALA:H	6	1.11
(1,2981)	1:A:40:CYS:H	1:A:41:LYS:HD3	6	1.11
(1,1389)	1:A:20:ARG:H	1:A:19:SER:HB2	1	1.11
(1,1389)	1:A:20:ARG:H	1:A:19:SER:HB2	6	1.11
(1,1374)	1:A:27:PRO:HG2	1:A:23:THR:HB	9	1.11
(1,1278)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:77:SER:H	4	1.11

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3488)	1:A:155:GLN:HE21	1:A:115:ALA:HA	9	1.1
(1,3488)	1:A:155:GLN:HE21	1:A:117:PRO:HA	9	1.1
(1,1819)	1:A:53:ASP:H	1:A:74:LYS:HB3	4	1.1
(1,1298)	1:A:48:HIS:HB3	1:A:65:PRO:HG2	6	1.1
(1,729)	1:A:17:LYS:HE2	1:A:67:LEU:HD22	7	1.09
(1,729)	1:A:17:LYS:HE2	1:A:67:LEU:HD21	7	1.09
(1,729)	1:A:17:LYS:HE2	1:A:67:LEU:HD23	7	1.09
(1,1279)	1:A:105:GLN:HG3	1:A:67:LEU:HD12	6	1.09
(1,1279)	1:A:105:GLN:HG3	1:A:67:LEU:HD11	6	1.09
(1,1279)	1:A:105:GLN:HG3	1:A:67:LEU:HD13	6	1.09
(1,1278)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:77:SER:H	5	1.09
(1,1278)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:77:SER:H	10	1.09
(1,118)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:52:ASN:HA	10	1.09
(1,1819)	1:A:53:ASP:H	1:A:74:LYS:HB3	7	1.08
(1,1389)	1:A:20:ARG:H	1:A:19:SER:HB2	9	1.08
(1,1298)	1:A:48:HIS:HB3	1:A:65:PRO:HG2	1	1.08
(1,1081)	1:A:4:PRO:HB3	1:A:32:SER:HB3	4	1.08
(1,3274)	1:A:67:LEU:H	1:A:17:LYS:HE2	1	1.07
(1,3274)	1:A:67:LEU:H	1:A:68:TYR:HB2	1	1.07
(1,1389)	1:A:20:ARG:H	1:A:19:SER:HB2	2	1.07
(1,1389)	1:A:20:ARG:H	1:A:19:SER:HB2	7	1.07
(1,118)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:52:ASN:HA	6	1.07
(1,2357)	1:A:97:VAL:H	1:A:134:LYS:HG3	10	1.06
(1,1863)	1:A:21:ALA:H	1:A:61:LYS:HE2	4	1.06
(1,1437)	1:A:7:LEU:HG	1:A:32:SER:HB3	8	1.06
(1,1437)	1:A:7:LEU:HG	1:A:32:SER:HB3	9	1.06
(1,1437)	1:A:7:LEU:HG	1:A:32:SER:HB3	10	1.06
(1,1233)	1:A:146:VAL:HB	1:A:88:HIS:HB2	3	1.06
(1,1233)	1:A:146:VAL:HB	1:A:88:HIS:HB2	4	1.06
(1,118)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:52:ASN:HA	1	1.06
(1,118)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:52:ASN:HA	7	1.06
(1,118)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:52:ASN:HA	8	1.06
(1,2317)	1:A:125:ASN:HD22	1:A:128:ASP:HB2	9	1.05
(1,1437)	1:A:7:LEU:HG	1:A:32:SER:HB3	2	1.05
(1,1233)	1:A:146:VAL:HB	1:A:88:HIS:HB2	2	1.05
(1,1233)	1:A:146:VAL:HB	1:A:88:HIS:HB2	6	1.05
(1,1233)	1:A:146:VAL:HB	1:A:88:HIS:HB2	8	1.05
(1,329)	1:A:100:ALA:HB2	1:A:130:LYS:HE2	3	1.04
(1,329)	1:A:100:ALA:HB1	1:A:130:LYS:HE2	3	1.04
(1,329)	1:A:100:ALA:HB3	1:A:130:LYS:HE2	3	1.04
(1,1414)	1:A:134:LYS:HG3	1:A:96:ASP:HB2	1	1.04
(1,1297)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:76:ALA:HB2	4	1.04

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1297)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:76:ALA:HB1	4	1.04
(1,1297)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:76:ALA:HB3	4	1.04
(1,1279)	1:A:105:GLN:HG3	1:A:67:LEU:HD12	2	1.04
(1,1279)	1:A:105:GLN:HG3	1:A:67:LEU:HD11	2	1.04
(1,1279)	1:A:105:GLN:HG3	1:A:67:LEU:HD13	2	1.04
(1,1233)	1:A:146:VAL:HB	1:A:88:HIS:HB2	1	1.04
(1,2923)	1:A:39:GLN:HG2	1:A:41:LYS:H	2	1.03
(1,2923)	1:A:39:GLN:HG2	1:A:42:ALA:H	2	1.03
(1,1279)	1:A:105:GLN:HG3	1:A:67:LEU:HD12	8	1.03
(1,1279)	1:A:105:GLN:HG3	1:A:67:LEU:HD11	8	1.03
(1,1279)	1:A:105:GLN:HG3	1:A:67:LEU:HD13	8	1.03
(1,1233)	1:A:146:VAL:HB	1:A:88:HIS:HB2	5	1.03
(1,1233)	1:A:146:VAL:HB	1:A:88:HIS:HB2	7	1.03
(1,1233)	1:A:146:VAL:HB	1:A:88:HIS:HB2	9	1.03
(1,729)	1:A:17:LYS:HE2	1:A:67:LEU:HD22	6	1.02
(1,729)	1:A:17:LYS:HE2	1:A:67:LEU:HD21	6	1.02
(1,729)	1:A:17:LYS:HE2	1:A:67:LEU:HD23	6	1.02
(1,1297)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:76:ALA:HB2	5	1.02
(1,1297)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:76:ALA:HB1	5	1.02
(1,1297)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:76:ALA:HB3	5	1.02
(1,1545)	1:A:61:LYS:HG2	1:A:60:VAL:HA	10	1.01
(1,2923)	1:A:39:GLN:HG2	1:A:41:LYS:H	3	1.0
(1,2923)	1:A:39:GLN:HG2	1:A:42:ALA:H	3	1.0
(1,2923)	1:A:39:GLN:HG2	1:A:41:LYS:H	5	1.0
(1,2923)	1:A:39:GLN:HG2	1:A:42:ALA:H	5	1.0
(1,2923)	1:A:39:GLN:HG2	1:A:41:LYS:H	9	1.0
(1,2923)	1:A:39:GLN:HG2	1:A:42:ALA:H	9	1.0
(1,1545)	1:A:61:LYS:HG2	1:A:60:VAL:HA	9	1.0
(1,1279)	1:A:105:GLN:HG3	1:A:67:LEU:HD12	7	1.0
(1,1279)	1:A:105:GLN:HG3	1:A:67:LEU:HD11	7	1.0
(1,1279)	1:A:105:GLN:HG3	1:A:67:LEU:HD13	7	1.0
(1,2923)	1:A:39:GLN:HG2	1:A:41:LYS:H	1	0.99
(1,2923)	1:A:39:GLN:HG2	1:A:42:ALA:H	1	0.99
(1,1545)	1:A:61:LYS:HG2	1:A:60:VAL:HA	5	0.99
(1,1279)	1:A:105:GLN:HG3	1:A:67:LEU:HD12	1	0.99
(1,1279)	1:A:105:GLN:HG3	1:A:67:LEU:HD11	1	0.99
(1,1279)	1:A:105:GLN:HG3	1:A:67:LEU:HD13	1	0.99
(1,1863)	1:A:21:ALA:H	1:A:61:LYS:HE2	3	0.98
(1,1624)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG21	10	0.98
(1,1624)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG22	10	0.98
(1,1624)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG23	10	0.98
(1,438)	1:A:38:ALA:HA	1:A:41:LYS:HD3	8	0.97

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3019)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:9:LEU:HD12	9	0.97
(1,3019)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:9:LEU:HD11	9	0.97
(1,3019)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:9:LEU:HD13	9	0.97
(1,3019)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:35:GLN:HB2	9	0.97
(1,3019)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:35:GLN:HB2	9	0.97
(1,3019)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:35:GLN:HB2	9	0.97
(1,2923)	1:A:39:GLN:HG2	1:A:41:LYS:H	4	0.97
(1,2923)	1:A:39:GLN:HG2	1:A:42:ALA:H	4	0.97
(1,2747)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:59:HIS:HB3	4	0.97
(1,2747)	1:A:82:ARG:HD3	1:A:85:PHE:HB3	4	0.97
(1,2923)	1:A:39:GLN:HG2	1:A:41:LYS:H	7	0.96
(1,2923)	1:A:39:GLN:HG2	1:A:42:ALA:H	7	0.96
(1,1437)	1:A:7:LEU:HG	1:A:32:SER:HB3	4	0.96
(1,1027)	1:A:75:THR:HB	1:A:18:GLY:HA3	9	0.96
(1,74)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:31:VAL:HA	2	0.95
(1,74)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:31:VAL:HA	10	0.95
(1,454)	1:A:155:GLN:HE22	1:A:114:ALA:HB2	2	0.95
(1,454)	1:A:155:GLN:HE22	1:A:114:ALA:HB1	2	0.95
(1,454)	1:A:155:GLN:HE22	1:A:114:ALA:HB3	2	0.95
(1,1545)	1:A:61:LYS:HG2	1:A:60:VAL:HA	7	0.95
(1,74)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:31:VAL:HA	1	0.94
(1,74)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:31:VAL:HA	9	0.94
(1,3019)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:9:LEU:HD12	2	0.94
(1,3019)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:9:LEU:HD11	2	0.94
(1,3019)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:9:LEU:HD13	2	0.94
(1,3019)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:35:GLN:HB2	2	0.94
(1,3019)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:35:GLN:HB2	2	0.94
(1,3019)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:35:GLN:HB2	2	0.94
(1,3019)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:9:LEU:HD12	10	0.94
(1,3019)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:9:LEU:HD11	10	0.94
(1,3019)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:9:LEU:HD13	10	0.94
(1,3019)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:35:GLN:HB2	10	0.94
(1,3019)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:35:GLN:HB2	10	0.94
(1,3019)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:35:GLN:HB2	10	0.94
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:89:VAL:H	10	0.94
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:91:TYR:HD1	10	0.94
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:91:TYR:HD2	10	0.94
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:142:LYS:H	10	0.94
(1,171)	1:A:12:VAL:HG22	1:A:74:LYS:HB2	5	0.94
(1,171)	1:A:12:VAL:HG21	1:A:74:LYS:HB2	5	0.94
(1,171)	1:A:12:VAL:HG23	1:A:74:LYS:HB2	5	0.94
(1,1584)	1:A:74:LYS:HG2	1:A:14:SER:HB2	3	0.94

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1545)	1:A:61:LYS:HG2	1:A:60:VAL:HA	2	0.94
(1,1545)	1:A:61:LYS:HG2	1:A:60:VAL:HA	6	0.94
(1,1129)	1:A:39:GLN:HG2	1:A:40:CYS:H	2	0.94
(1,1129)	1:A:39:GLN:HG2	1:A:40:CYS:H	3	0.94
(1,1129)	1:A:39:GLN:HG2	1:A:40:CYS:H	10	0.94
(1,438)	1:A:38:ALA:HA	1:A:41:LYS:HD3	10	0.93
(1,3019)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:9:LEU:HD12	3	0.93
(1,3019)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:9:LEU:HD11	3	0.93
(1,3019)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:9:LEU:HD13	3	0.93
(1,3019)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:35:GLN:HB2	3	0.93
(1,3019)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:35:GLN:HB2	3	0.93
(1,3019)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:35:GLN:HB2	3	0.93
(1,2923)	1:A:39:GLN:HG2	1:A:41:LYS:H	10	0.93
(1,2923)	1:A:39:GLN:HG2	1:A:42:ALA:H	10	0.93
(1,171)	1:A:12:VAL:HG22	1:A:74:LYS:HB2	3	0.93
(1,171)	1:A:12:VAL:HG21	1:A:74:LYS:HB2	3	0.93
(1,171)	1:A:12:VAL:HG23	1:A:74:LYS:HB2	3	0.93
(1,1624)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG21	3	0.93
(1,1624)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG22	3	0.93
(1,1624)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG23	3	0.93
(1,74)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:31:VAL:HA	5	0.92
(1,534)	1:A:4:PRO:HD3	1:A:32:SER:HB3	1	0.92
(1,3019)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:9:LEU:HD12	5	0.92
(1,3019)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:9:LEU:HD11	5	0.92
(1,3019)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:9:LEU:HD13	5	0.92
(1,3019)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:35:GLN:HB2	5	0.92
(1,3019)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:35:GLN:HB2	5	0.92
(1,3019)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:35:GLN:HB2	5	0.92
(1,3019)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:9:LEU:HD12	7	0.92
(1,3019)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:9:LEU:HD11	7	0.92
(1,3019)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:9:LEU:HD13	7	0.92
(1,3019)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:35:GLN:HB2	7	0.92
(1,3019)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:35:GLN:HB2	7	0.92
(1,3019)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:35:GLN:HB2	7	0.92
(1,2923)	1:A:39:GLN:HG2	1:A:41:LYS:H	6	0.92
(1,2923)	1:A:39:GLN:HG2	1:A:42:ALA:H	6	0.92
(1,2923)	1:A:39:GLN:HG2	1:A:41:LYS:H	8	0.92
(1,2923)	1:A:39:GLN:HG2	1:A:42:ALA:H	8	0.92
(1,2908)	1:A:142:LYS:HB2	1:A:139:SER:HB3	8	0.92
(1,2908)	1:A:154:LYS:HB3	1:A:160:GLY:HA3	8	0.92
(1,2908)	1:A:110:GLN:HG2	1:A:79:SER:HB2	8	0.92
(1,1624)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG21	2	0.92

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1624)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG22	2	0.92
(1,1624)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG23	2	0.92
(1,1624)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG21	9	0.92
(1,1624)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG22	9	0.92
(1,1624)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG23	9	0.92
(1,908)	1:A:130:LYS:HB3	1:A:129:GLN:H	10	0.91
(1,74)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:31:VAL:HA	4	0.91
(1,1624)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG21	5	0.91
(1,1624)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG22	5	0.91
(1,1624)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG23	5	0.91
(1,1437)	1:A:7:LEU:HG	1:A:32:SER:HB3	5	0.91
(1,1437)	1:A:7:LEU:HG	1:A:32:SER:HB3	6	0.91
(1,1297)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:76:ALA:HB2	10	0.91
(1,1297)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:76:ALA:HB1	10	0.91
(1,1297)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:76:ALA:HB3	10	0.91
(1,1129)	1:A:39:GLN:HG2	1:A:40:CYS:H	1	0.91
(1,3274)	1:A:67:LEU:H	1:A:17:LYS:HE2	2	0.9
(1,3274)	1:A:67:LEU:H	1:A:68:TYR:HB2	2	0.9
(1,3019)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:9:LEU:HD12	1	0.9
(1,3019)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:9:LEU:HD11	1	0.9
(1,3019)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:9:LEU:HD13	1	0.9
(1,3019)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:35:GLN:HB2	1	0.9
(1,3019)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:35:GLN:HB2	1	0.9
(1,3019)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:35:GLN:HB2	1	0.9
(1,3019)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:9:LEU:HD12	6	0.9
(1,3019)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:9:LEU:HD11	6	0.9
(1,3019)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:9:LEU:HD13	6	0.9
(1,3019)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:35:GLN:HB2	6	0.9
(1,3019)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:35:GLN:HB2	6	0.9
(1,3019)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:35:GLN:HB2	6	0.9
(1,3019)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:9:LEU:HD12	8	0.9
(1,3019)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:9:LEU:HD11	8	0.9
(1,3019)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:9:LEU:HD13	8	0.9
(1,3019)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:35:GLN:HB2	8	0.9
(1,3019)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:35:GLN:HB2	8	0.9
(1,3019)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:35:GLN:HB2	8	0.9
(1,171)	1:A:12:VAL:HG22	1:A:74:LYS:HB2	4	0.9
(1,171)	1:A:12:VAL:HG21	1:A:74:LYS:HB2	4	0.9
(1,171)	1:A:12:VAL:HG23	1:A:74:LYS:HB2	4	0.9
(1,1186)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:50:THR:HG21	9	0.9
(1,1186)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:50:THR:HG22	9	0.9
(1,1186)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:50:THR:HG23	9	0.9

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,438)	1:A:38:ALA:HA	1:A:41:LYS:HD3	1	0.89
(1,3019)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:9:LEU:HD12	4	0.89
(1,3019)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:9:LEU:HD11	4	0.89
(1,3019)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:9:LEU:HD13	4	0.89
(1,3019)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:35:GLN:HB2	4	0.89
(1,3019)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:35:GLN:HB2	4	0.89
(1,3019)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:35:GLN:HB2	4	0.89
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:89:VAL:H	4	0.89
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:91:TYR:HD1	4	0.89
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:91:TYR:HD2	4	0.89
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:142:LYS:H	4	0.89
(1,171)	1:A:12:VAL:HG22	1:A:74:LYS:HB2	1	0.89
(1,171)	1:A:12:VAL:HG21	1:A:74:LYS:HB2	1	0.89
(1,171)	1:A:12:VAL:HG23	1:A:74:LYS:HB2	1	0.89
(1,171)	1:A:12:VAL:HG22	1:A:74:LYS:HB2	2	0.89
(1,171)	1:A:12:VAL:HG21	1:A:74:LYS:HB2	2	0.89
(1,171)	1:A:12:VAL:HG23	1:A:74:LYS:HB2	2	0.89
(1,171)	1:A:12:VAL:HG22	1:A:74:LYS:HB2	8	0.89
(1,171)	1:A:12:VAL:HG21	1:A:74:LYS:HB2	8	0.89
(1,171)	1:A:12:VAL:HG23	1:A:74:LYS:HB2	8	0.89
(1,1545)	1:A:61:LYS:HG2	1:A:60:VAL:HA	8	0.89
(1,1129)	1:A:39:GLN:HG2	1:A:40:CYS:H	4	0.89
(1,1129)	1:A:39:GLN:HG2	1:A:40:CYS:H	6	0.89
(1,780)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HB3	5	0.88
(1,780)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HB3	6	0.88
(1,780)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HB3	9	0.88
(1,171)	1:A:12:VAL:HG22	1:A:74:LYS:HB2	7	0.88
(1,171)	1:A:12:VAL:HG21	1:A:74:LYS:HB2	7	0.88
(1,171)	1:A:12:VAL:HG23	1:A:74:LYS:HB2	7	0.88
(1,1545)	1:A:61:LYS:HG2	1:A:60:VAL:HA	1	0.88
(1,1173)	1:A:117:PRO:HD2	1:A:117:PRO:HB2	5	0.88
(1,780)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HB3	1	0.87
(1,780)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HB3	2	0.87
(1,780)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HB3	3	0.87
(1,780)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HB3	4	0.87
(1,780)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HB3	7	0.87
(1,780)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HB3	8	0.87
(1,780)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HB3	10	0.87
(1,3274)	1:A:67:LEU:H	1:A:17:LYS:HE2	3	0.87
(1,3274)	1:A:67:LEU:H	1:A:68:TYR:HB2	3	0.87
(1,171)	1:A:12:VAL:HG22	1:A:74:LYS:HB2	10	0.87
(1,171)	1:A:12:VAL:HG21	1:A:74:LYS:HB2	10	0.87

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,171)	1:A:12:VAL:HG23	1:A:74:LYS:HB2	10	0.87
(1,1624)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG21	4	0.87
(1,1624)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG22	4	0.87
(1,1624)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG23	4	0.87
(1,1624)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG21	8	0.87
(1,1624)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG22	8	0.87
(1,1624)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG23	8	0.87
(1,1396)	1:A:95:PRO:HG2	1:A:95:PRO:HA	10	0.87
(1,1173)	1:A:117:PRO:HD2	1:A:117:PRO:HB2	9	0.87
(1,1129)	1:A:39:GLN:HG2	1:A:40:CYS:H	5	0.87
(1,74)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:31:VAL:HA	8	0.86
(1,2908)	1:A:142:LYS:HB2	1:A:139:SER:HB3	7	0.86
(1,2908)	1:A:154:LYS:HB3	1:A:160:GLY:HA3	7	0.86
(1,2908)	1:A:110:GLN:HG2	1:A:79:SER:HB2	7	0.86
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:89:VAL:H	9	0.86
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:91:TYR:HD1	9	0.86
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:91:TYR:HD2	9	0.86
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:142:LYS:H	9	0.86
(1,1869)	1:A:7:LEU:H	1:A:7:LEU:HB3	1	0.86
(1,171)	1:A:12:VAL:HG22	1:A:74:LYS:HB2	6	0.86
(1,171)	1:A:12:VAL:HG21	1:A:74:LYS:HB2	6	0.86
(1,171)	1:A:12:VAL:HG23	1:A:74:LYS:HB2	6	0.86
(1,1454)	1:A:78:ARG:HG3	1:A:156:PHE:HZ	3	0.86
(1,1173)	1:A:117:PRO:HD2	1:A:117:PRO:HB2	3	0.86
(1,1129)	1:A:39:GLN:HG2	1:A:40:CYS:H	8	0.86
(1,1129)	1:A:39:GLN:HG2	1:A:40:CYS:H	9	0.86
(1,2908)	1:A:142:LYS:HB2	1:A:139:SER:HB3	3	0.85
(1,2908)	1:A:154:LYS:HB3	1:A:160:GLY:HA3	3	0.85
(1,2908)	1:A:110:GLN:HG2	1:A:79:SER:HB2	3	0.85
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:89:VAL:H	2	0.85
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:91:TYR:HD1	2	0.85
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:91:TYR:HD2	2	0.85
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:142:LYS:H	2	0.85
(1,1954)	1:A:144:ARG:H	1:A:142:LYS:HG3	9	0.85
(1,1869)	1:A:7:LEU:H	1:A:7:LEU:HB3	6	0.85
(1,1173)	1:A:117:PRO:HD2	1:A:117:PRO:HB2	2	0.85
(1,1173)	1:A:117:PRO:HD2	1:A:117:PRO:HB2	8	0.85
(1,1129)	1:A:39:GLN:HG2	1:A:40:CYS:H	7	0.85
(1,703)	1:A:61:LYS:HE2	1:A:59:HIS:HB2	5	0.84
(1,594)	1:A:70:LEU:HB2	1:A:73:GLY:HA2	1	0.84
(1,3274)	1:A:67:LEU:H	1:A:17:LYS:HE2	9	0.84
(1,3274)	1:A:67:LEU:H	1:A:68:TYR:HB2	9	0.84

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:89:VAL:H	5	0.84
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:91:TYR:HD1	5	0.84
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:91:TYR:HD2	5	0.84
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:142:LYS:H	5	0.84
(1,171)	1:A:12:VAL:HG22	1:A:74:LYS:HB2	9	0.84
(1,171)	1:A:12:VAL:HG21	1:A:74:LYS:HB2	9	0.84
(1,171)	1:A:12:VAL:HG23	1:A:74:LYS:HB2	9	0.84
(1,1624)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG21	7	0.84
(1,1624)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG22	7	0.84
(1,1624)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG23	7	0.84
(1,1240)	1:A:78:ARG:HB2	1:A:47:THR:HA	6	0.84
(1,594)	1:A:70:LEU:HB2	1:A:73:GLY:HA2	8	0.83
(1,550)	1:A:53:ASP:H	1:A:73:GLY:HA3	4	0.83
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:89:VAL:H	3	0.83
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:91:TYR:HD1	3	0.83
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:91:TYR:HD2	3	0.83
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:142:LYS:H	3	0.83
(1,1869)	1:A:7:LEU:H	1:A:7:LEU:HB3	5	0.83
(1,1624)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG21	1	0.83
(1,1624)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG22	1	0.83
(1,1624)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG23	1	0.83
(1,1624)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG21	6	0.83
(1,1624)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG22	6	0.83
(1,1624)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG23	6	0.83
(1,1406)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:147:LEU:HD22	5	0.83
(1,1406)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:147:LEU:HD21	5	0.83
(1,1406)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:147:LEU:HD23	5	0.83
(1,1173)	1:A:117:PRO:HD2	1:A:117:PRO:HB2	4	0.83
(1,1173)	1:A:117:PRO:HD2	1:A:117:PRO:HB2	6	0.83
(1,74)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:31:VAL:HA	7	0.82
(1,3449)	1:A:130:LYS:H	1:A:128:ASP:HB2	9	0.82
(1,3449)	1:A:130:LYS:H	1:A:129:GLN:HB2	9	0.82
(1,2777)	1:A:17:LYS:HE3	1:A:18:GLY:H	6	0.82
(1,2777)	1:A:142:LYS:HE3	1:A:144:ARG:H	6	0.82
(1,2777)	1:A:17:LYS:HE3	1:A:18:GLY:H	7	0.82
(1,2777)	1:A:142:LYS:HE3	1:A:144:ARG:H	7	0.82
(1,1869)	1:A:7:LEU:H	1:A:7:LEU:HB3	3	0.82
(1,1869)	1:A:7:LEU:H	1:A:7:LEU:HB3	7	0.82
(1,1545)	1:A:61:LYS:HG2	1:A:60:VAL:HA	3	0.82
(1,1396)	1:A:95:PRO:HG2	1:A:95:PRO:HA	1	0.82
(1,1173)	1:A:117:PRO:HD2	1:A:117:PRO:HB2	10	0.82
(1,724)	1:A:8:ASP:H	1:A:7:LEU:HB2	10	0.81

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,363)	1:A:108:ASP:HA	1:A:77:SER:HB3	4	0.81
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:57:MET:HG2	5	0.81
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:57:MET:HG3	5	0.81
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:57:MET:HG2	5	0.81
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:57:MET:HG3	5	0.81
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:57:MET:HG2	5	0.81
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:57:MET:HG3	5	0.81
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:39:GLN:HG3	5	0.81
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:39:GLN:HG3	5	0.81
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:39:GLN:HG3	5	0.81
(1,1954)	1:A:144:ARG:H	1:A:142:LYS:HG3	3	0.81
(1,1869)	1:A:7:LEU:H	1:A:7:LEU:HB3	2	0.81
(1,1869)	1:A:7:LEU:H	1:A:7:LEU:HB3	4	0.81
(1,1869)	1:A:7:LEU:H	1:A:7:LEU:HB3	8	0.81
(1,1447)	1:A:97:VAL:HB	1:A:118:SER:HB2	5	0.81
(1,1173)	1:A:117:PRO:HD2	1:A:117:PRO:HB2	1	0.81
(1,594)	1:A:70:LEU:HB2	1:A:73:GLY:HA2	7	0.8
(1,594)	1:A:70:LEU:HB2	1:A:73:GLY:HA2	9	0.8
(1,438)	1:A:38:ALA:HA	1:A:41:LYS:HD3	3	0.8
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG21	3	0.8
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG22	3	0.8
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG23	3	0.8
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:61:LYS:HD2	3	0.8
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:89:VAL:H	7	0.8
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:91:TYR:HD1	7	0.8
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:91:TYR:HD2	7	0.8
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:142:LYS:H	7	0.8
(1,1954)	1:A:144:ARG:H	1:A:142:LYS:HG3	1	0.8
(1,1869)	1:A:7:LEU:H	1:A:7:LEU:HB3	9	0.8
(1,1869)	1:A:7:LEU:H	1:A:7:LEU:HB3	10	0.8
(1,1396)	1:A:95:PRO:HG2	1:A:95:PRO:HA	7	0.8
(1,1173)	1:A:117:PRO:HD2	1:A:117:PRO:HB2	7	0.8
(1,678)	1:A:20:ARG:HD2	1:A:20:ARG:HA	3	0.79
(1,678)	1:A:20:ARG:HD2	1:A:20:ARG:HA	9	0.79
(1,468)	1:A:97:VAL:HG22	1:A:98:MET:HG3	3	0.79
(1,468)	1:A:97:VAL:HG21	1:A:98:MET:HG3	3	0.79
(1,468)	1:A:97:VAL:HG23	1:A:98:MET:HG3	3	0.79
(1,438)	1:A:38:ALA:HA	1:A:41:LYS:HD3	4	0.79
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:57:MET:HG2	2	0.79
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:57:MET:HG3	2	0.79
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:57:MET:HG2	2	0.79
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:57:MET:HG3	2	0.79

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:57:MET:HG2	2	0.79
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:57:MET:HG3	2	0.79
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:39:GLN:HG3	2	0.79
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:39:GLN:HG3	2	0.79
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:39:GLN:HG3	2	0.79
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:89:VAL:H	1	0.79
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:91:TYR:HD1	1	0.79
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:91:TYR:HD2	1	0.79
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:142:LYS:H	1	0.79
(1,1396)	1:A:95:PRO:HG2	1:A:95:PRO:HA	2	0.79
(1,1396)	1:A:95:PRO:HG2	1:A:95:PRO:HA	4	0.79
(1,1396)	1:A:95:PRO:HG2	1:A:95:PRO:HA	5	0.79
(1,1396)	1:A:95:PRO:HG2	1:A:95:PRO:HA	6	0.79
(1,1015)	1:A:121:ILE:H	1:A:120:GLU:HG3	7	0.79
(1,3195)	1:A:125:ASN:H	1:A:129:GLN:HB2	9	0.78
(1,3195)	1:A:125:ASN:H	1:A:92:GLU:HG2	9	0.78
(1,3195)	1:A:125:ASN:H	1:A:92:GLU:HG3	9	0.78
(1,3195)	1:A:125:ASN:H	1:A:128:ASP:HB2	9	0.78
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:57:MET:HG2	1	0.78
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:57:MET:HG3	1	0.78
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:57:MET:HG2	1	0.78
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:57:MET:HG3	1	0.78
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:57:MET:HG2	1	0.78
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:57:MET:HG3	1	0.78
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:39:GLN:HG3	1	0.78
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:39:GLN:HG3	1	0.78
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:39:GLN:HG3	1	0.78
(1,2234)	1:A:98:MET:H	1:A:98:MET:HG3	2	0.78
(1,2212)	1:A:17:LYS:H	1:A:17:LYS:HG3	4	0.78
(1,2212)	1:A:17:LYS:H	1:A:17:LYS:HG3	9	0.78
(1,1396)	1:A:95:PRO:HG2	1:A:95:PRO:HA	8	0.78
(1,1396)	1:A:95:PRO:HG2	1:A:95:PRO:HA	9	0.78
(1,678)	1:A:20:ARG:HD2	1:A:20:ARG:HA	4	0.77
(1,678)	1:A:20:ARG:HD2	1:A:20:ARG:HA	7	0.77
(1,678)	1:A:20:ARG:HD2	1:A:20:ARG:HA	8	0.77
(1,594)	1:A:70:LEU:HB2	1:A:73:GLY:HA2	5	0.77
(1,594)	1:A:70:LEU:HB2	1:A:73:GLY:HA2	6	0.77
(1,594)	1:A:70:LEU:HB2	1:A:73:GLY:HA2	10	0.77
(1,468)	1:A:97:VAL:HG22	1:A:98:MET:HG3	5	0.77
(1,468)	1:A:97:VAL:HG21	1:A:98:MET:HG3	5	0.77
(1,468)	1:A:97:VAL:HG23	1:A:98:MET:HG3	5	0.77
(1,454)	1:A:155:GLN:HE22	1:A:114:ALA:HB2	7	0.77

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,454)	1:A:155:GLN:HE22	1:A:114:ALA:HB1	7	0.77
(1,454)	1:A:155:GLN:HE22	1:A:114:ALA:HB3	7	0.77
(1,3274)	1:A:67:LEU:H	1:A:17:LYS:HE2	8	0.77
(1,3274)	1:A:67:LEU:H	1:A:68:TYR:HB2	8	0.77
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:57:MET:HG2	4	0.77
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:57:MET:HG3	4	0.77
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:57:MET:HG2	4	0.77
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:57:MET:HG3	4	0.77
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:57:MET:HG2	4	0.77
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:57:MET:HG3	4	0.77
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:39:GLN:HG3	4	0.77
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:39:GLN:HG3	4	0.77
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:39:GLN:HG3	4	0.77
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:57:MET:HG2	8	0.77
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:57:MET:HG3	8	0.77
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:57:MET:HG2	8	0.77
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:57:MET:HG3	8	0.77
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:57:MET:HG2	8	0.77
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:57:MET:HG3	8	0.77
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:39:GLN:HG3	8	0.77
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:39:GLN:HG3	8	0.77
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:39:GLN:HG3	8	0.77
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:89:VAL:H	6	0.77
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:91:TYR:HD1	6	0.77
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:91:TYR:HD2	6	0.77
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:142:LYS:H	6	0.77
(1,2234)	1:A:98:MET:H	1:A:98:MET:HG3	5	0.77
(1,2234)	1:A:98:MET:H	1:A:98:MET:HG3	6	0.77
(1,1396)	1:A:95:PRO:HG2	1:A:95:PRO:HA	3	0.77
(1,1015)	1:A:121:ILE:H	1:A:120:GLU:HG3	9	0.77
(1,678)	1:A:20:ARG:HD2	1:A:20:ARG:HA	2	0.76
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG21	10	0.76
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG22	10	0.76
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG23	10	0.76
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:61:LYS:HD2	10	0.76
(1,1404)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:146:VAL:H	4	0.76
(1,1320)	1:A:128:ASP:H	1:A:127:HIS:HB2	2	0.76
(1,1240)	1:A:78:ARG:HB2	1:A:47:THR:HA	2	0.76
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG21	4	0.75
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG22	4	0.75
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG23	4	0.75
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:61:LYS:HD2	4	0.75

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:57:MET:HG2	9	0.75
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:57:MET:HG3	9	0.75
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:57:MET:HG2	9	0.75
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:57:MET:HG3	9	0.75
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:57:MET:HG2	9	0.75
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:57:MET:HG3	9	0.75
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:39:GLN:HG3	9	0.75
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:39:GLN:HG3	9	0.75
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:39:GLN:HG3	9	0.75
(1,2234)	1:A:98:MET:H	1:A:98:MET:HG3	8	0.75
(1,2212)	1:A:17:LYS:H	1:A:17:LYS:HG3	8	0.75
(1,2097)	1:A:127:HIS:H	1:A:125:ASN:HD22	9	0.75
(1,1954)	1:A:144:ARG:H	1:A:142:LYS:HG3	5	0.75
(1,1406)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:147:LEU:HD22	1	0.75
(1,1406)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:147:LEU:HD21	1	0.75
(1,1406)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:147:LEU:HD23	1	0.75
(1,1404)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:146:VAL:H	2	0.75
(1,1240)	1:A:78:ARG:HB2	1:A:47:THR:HA	10	0.75
(1,724)	1:A:8:ASP:H	1:A:7:LEU:HB2	3	0.74
(1,724)	1:A:8:ASP:H	1:A:7:LEU:HB2	7	0.74
(1,703)	1:A:61:LYS:HE2	1:A:59:HIS:HB2	10	0.74
(1,550)	1:A:53:ASP:H	1:A:73:GLY:HA3	2	0.74
(1,550)	1:A:53:ASP:H	1:A:73:GLY:HA3	3	0.74
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:57:MET:HG2	10	0.74
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:57:MET:HG3	10	0.74
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:57:MET:HG2	10	0.74
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:57:MET:HG3	10	0.74
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:57:MET:HG2	10	0.74
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:57:MET:HG3	10	0.74
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:39:GLN:HG3	10	0.74
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:39:GLN:HG3	10	0.74
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:39:GLN:HG3	10	0.74
(1,2785)	1:A:130:LYS:HE2	1:A:125:ASN:HD21	8	0.74
(1,2785)	1:A:130:LYS:HE3	1:A:125:ASN:HD21	8	0.74
(1,2785)	1:A:131:CYS:HB3	1:A:112:ALA:H	8	0.74
(1,2530)	1:A:13:HIS:HD2	1:A:67:LEU:HG	10	0.74
(1,2530)	1:A:88:HIS:HD2	1:A:87:GLN:HB2	10	0.74
(1,2530)	1:A:88:HIS:HD2	1:A:147:LEU:HB3	10	0.74
(1,2530)	1:A:88:HIS:HD2	1:A:147:LEU:HG	10	0.74
(1,2509)	1:A:130:LYS:HB3	1:A:102:VAL:HA	2	0.74
(1,2509)	1:A:130:LYS:HD2	1:A:102:VAL:HA	2	0.74
(1,2509)	1:A:130:LYS:HB3	1:A:102:VAL:HA	3	0.74

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2509)	1:A:130:LYS:HD2	1:A:102:VAL:HA	3	0.74
(1,2509)	1:A:130:LYS:HB3	1:A:102:VAL:HA	6	0.74
(1,2509)	1:A:130:LYS:HD2	1:A:102:VAL:HA	6	0.74
(1,2509)	1:A:130:LYS:HB3	1:A:102:VAL:HA	8	0.74
(1,2509)	1:A:130:LYS:HD2	1:A:102:VAL:HA	8	0.74
(1,2097)	1:A:127:HIS:H	1:A:125:ASN:HD22	8	0.74
(1,1954)	1:A:144:ARG:H	1:A:142:LYS:HG3	4	0.74
(1,1437)	1:A:7:LEU:HG	1:A:32:SER:HB3	1	0.74
(1,1404)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:146:VAL:H	10	0.74
(1,1186)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:50:THR:HG21	4	0.74
(1,1186)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:50:THR:HG22	4	0.74
(1,1186)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:50:THR:HG23	4	0.74
(1,918)	1:A:130:LYS:HB2	1:A:130:LYS:HE3	7	0.73
(1,678)	1:A:20:ARG:HD2	1:A:20:ARG:HA	10	0.73
(1,677)	1:A:20:ARG:HD2	1:A:68:TYR:HE1	6	0.73
(1,677)	1:A:20:ARG:HD2	1:A:68:TYR:HE2	6	0.73
(1,638)	1:A:122:PHE:HB2	1:A:113:CYS:HB3	5	0.73
(1,468)	1:A:97:VAL:HG22	1:A:98:MET:HG3	8	0.73
(1,468)	1:A:97:VAL:HG21	1:A:98:MET:HG3	8	0.73
(1,468)	1:A:97:VAL:HG23	1:A:98:MET:HG3	8	0.73
(1,2509)	1:A:130:LYS:HB3	1:A:102:VAL:HA	5	0.73
(1,2509)	1:A:130:LYS:HD2	1:A:102:VAL:HA	5	0.73
(1,2509)	1:A:130:LYS:HB3	1:A:102:VAL:HA	7	0.73
(1,2509)	1:A:130:LYS:HD2	1:A:102:VAL:HA	7	0.73
(1,2269)	1:A:141:PHE:H	1:A:142:LYS:HB3	8	0.73
(1,2234)	1:A:98:MET:H	1:A:98:MET:HG3	1	0.73
(1,2097)	1:A:127:HIS:H	1:A:125:ASN:HD22	5	0.73
(1,1918)	1:A:105:GLN:H	1:A:105:GLN:HE22	1	0.73
(1,1404)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:146:VAL:H	5	0.73
(1,1240)	1:A:78:ARG:HB2	1:A:47:THR:HA	4	0.73
(1,1240)	1:A:78:ARG:HB2	1:A:47:THR:HA	9	0.73
(1,1015)	1:A:121:ILE:H	1:A:120:GLU:HG3	10	0.73
(1,724)	1:A:8:ASP:H	1:A:7:LEU:HB2	8	0.72
(1,703)	1:A:61:LYS:HE2	1:A:59:HIS:HB2	6	0.72
(1,678)	1:A:20:ARG:HD2	1:A:20:ARG:HA	1	0.72
(1,678)	1:A:20:ARG:HD2	1:A:20:ARG:HA	6	0.72
(1,677)	1:A:20:ARG:HD2	1:A:68:TYR:HE1	8	0.72
(1,677)	1:A:20:ARG:HD2	1:A:68:TYR:HE2	8	0.72
(1,638)	1:A:122:PHE:HB2	1:A:113:CYS:HB3	1	0.72
(1,420)	1:A:111:ALA:HB2	1:A:65:PRO:HG2	1	0.72
(1,420)	1:A:111:ALA:HB1	1:A:65:PRO:HG2	1	0.72
(1,420)	1:A:111:ALA:HB3	1:A:65:PRO:HG2	1	0.72

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,396)	1:A:107:ALA:HB2	1:A:77:SER:HB2	5	0.72
(1,396)	1:A:107:ALA:HB1	1:A:77:SER:HB2	5	0.72
(1,396)	1:A:107:ALA:HB3	1:A:77:SER:HB2	5	0.72
(1,3274)	1:A:67:LEU:H	1:A:17:LYS:HE2	5	0.72
(1,3274)	1:A:67:LEU:H	1:A:68:TYR:HB2	5	0.72
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG21	2	0.72
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG22	2	0.72
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG23	2	0.72
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:61:LYS:HD2	2	0.72
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG21	5	0.72
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG22	5	0.72
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG23	5	0.72
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:61:LYS:HD2	5	0.72
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG21	8	0.72
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG22	8	0.72
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG23	8	0.72
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:61:LYS:HD2	8	0.72
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:57:MET:HG2	7	0.72
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:57:MET:HG3	7	0.72
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:57:MET:HG2	7	0.72
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:57:MET:HG3	7	0.72
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:57:MET:HG2	7	0.72
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:57:MET:HG3	7	0.72
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:39:GLN:HG3	7	0.72
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:39:GLN:HG3	7	0.72
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:39:GLN:HG3	7	0.72
(1,2234)	1:A:98:MET:H	1:A:98:MET:HG3	4	0.72
(1,2212)	1:A:17:LYS:H	1:A:17:LYS:HG3	3	0.72
(1,1404)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:146:VAL:H	6	0.72
(1,1015)	1:A:121:ILE:H	1:A:120:GLU:HG3	8	0.72
(1,677)	1:A:20:ARG:HD2	1:A:68:TYR:HE1	1	0.71
(1,677)	1:A:20:ARG:HD2	1:A:68:TYR:HE2	1	0.71
(1,363)	1:A:108:ASP:HA	1:A:77:SER:HB3	2	0.71
(1,3142)	1:A:47:THR:HG21	1:A:62:GLU:HB2	8	0.71
(1,3142)	1:A:47:THR:HG22	1:A:62:GLU:HB2	8	0.71
(1,3142)	1:A:47:THR:HG23	1:A:62:GLU:HB2	8	0.71
(1,3142)	1:A:47:THR:HG21	1:A:62:GLU:HG2	8	0.71
(1,3142)	1:A:47:THR:HG22	1:A:62:GLU:HG2	8	0.71
(1,3142)	1:A:47:THR:HG23	1:A:62:GLU:HG2	8	0.71
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:57:MET:HG2	3	0.71
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:57:MET:HG3	3	0.71
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:57:MET:HG2	3	0.71

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:57:MET:HG3	3	0.71
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:57:MET:HG2	3	0.71
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:57:MET:HG3	3	0.71
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:39:GLN:HG3	3	0.71
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:39:GLN:HG3	3	0.71
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:39:GLN:HG3	3	0.71
(1,2530)	1:A:13:HIS:HD2	1:A:67:LEU:HG	5	0.71
(1,2530)	1:A:88:HIS:HD2	1:A:87:GLN:HB2	5	0.71
(1,2530)	1:A:88:HIS:HD2	1:A:147:LEU:HB3	5	0.71
(1,2530)	1:A:88:HIS:HD2	1:A:147:LEU:HG	5	0.71
(1,2509)	1:A:130:LYS:HB3	1:A:102:VAL:HA	9	0.71
(1,2509)	1:A:130:LYS:HD2	1:A:102:VAL:HA	9	0.71
(1,2234)	1:A:98:MET:H	1:A:98:MET:HG3	3	0.71
(1,2234)	1:A:98:MET:H	1:A:98:MET:HG3	7	0.71
(1,2097)	1:A:127:HIS:H	1:A:125:ASN:HD22	6	0.71
(1,1404)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:146:VAL:H	1	0.71
(1,908)	1:A:130:LYS:HB3	1:A:129:GLN:H	9	0.7
(1,724)	1:A:8:ASP:H	1:A:7:LEU:HB2	6	0.7
(1,677)	1:A:20:ARG:HD2	1:A:68:TYR:HE1	2	0.7
(1,677)	1:A:20:ARG:HD2	1:A:68:TYR:HE2	2	0.7
(1,550)	1:A:53:ASP:H	1:A:73:GLY:HA3	9	0.7
(1,468)	1:A:97:VAL:HG22	1:A:98:MET:HG3	7	0.7
(1,468)	1:A:97:VAL:HG21	1:A:98:MET:HG3	7	0.7
(1,468)	1:A:97:VAL:HG23	1:A:98:MET:HG3	7	0.7
(1,438)	1:A:38:ALA:HA	1:A:41:LYS:HD3	5	0.7
(1,438)	1:A:38:ALA:HA	1:A:41:LYS:HD3	9	0.7
(1,3142)	1:A:47:THR:HG21	1:A:62:GLU:HB2	3	0.7
(1,3142)	1:A:47:THR:HG22	1:A:62:GLU:HB2	3	0.7
(1,3142)	1:A:47:THR:HG23	1:A:62:GLU:HB2	3	0.7
(1,3142)	1:A:47:THR:HG21	1:A:62:GLU:HG2	3	0.7
(1,3142)	1:A:47:THR:HG22	1:A:62:GLU:HG2	3	0.7
(1,3142)	1:A:47:THR:HG23	1:A:62:GLU:HG2	3	0.7
(1,2234)	1:A:98:MET:H	1:A:98:MET:HG3	9	0.7
(1,1918)	1:A:105:GLN:H	1:A:105:GLN:HE22	7	0.7
(1,1703)	1:A:27:PRO:HA	1:A:27:PRO:HG2	2	0.7
(1,1703)	1:A:27:PRO:HA	1:A:27:PRO:HG2	4	0.7
(1,1703)	1:A:27:PRO:HA	1:A:27:PRO:HG2	9	0.7
(1,1404)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:146:VAL:H	8	0.7
(1,1404)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:146:VAL:H	9	0.7
(1,801)	1:A:128:ASP:HB2	1:A:130:LYS:HB2	9	0.69
(1,703)	1:A:61:LYS:HE2	1:A:59:HIS:HB2	2	0.69
(1,677)	1:A:20:ARG:HD2	1:A:68:TYR:HE1	10	0.69

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,677)	1:A:20:ARG:HD2	1:A:68:TYR:HE2	10	0.69
(1,638)	1:A:122:PHE:HB2	1:A:113:CYS:HB3	4	0.69
(1,550)	1:A:53:ASP:H	1:A:73:GLY:HA3	1	0.69
(1,438)	1:A:38:ALA:HA	1:A:41:LYS:HD3	2	0.69
(1,438)	1:A:38:ALA:HA	1:A:41:LYS:HD3	6	0.69
(1,438)	1:A:38:ALA:HA	1:A:41:LYS:HD3	7	0.69
(1,339)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:88:HIS:HB2	1	0.69
(1,339)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:88:HIS:HB2	1	0.69
(1,339)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:88:HIS:HB2	1	0.69
(1,339)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:88:HIS:HB2	10	0.69
(1,339)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:88:HIS:HB2	10	0.69
(1,339)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:88:HIS:HB2	10	0.69
(1,3142)	1:A:47:THR:HG21	1:A:62:GLU:HB2	1	0.69
(1,3142)	1:A:47:THR:HG22	1:A:62:GLU:HB2	1	0.69
(1,3142)	1:A:47:THR:HG23	1:A:62:GLU:HB2	1	0.69
(1,3142)	1:A:47:THR:HG21	1:A:62:GLU:HG2	1	0.69
(1,3142)	1:A:47:THR:HG22	1:A:62:GLU:HG2	1	0.69
(1,3142)	1:A:47:THR:HG23	1:A:62:GLU:HG2	1	0.69
(1,3142)	1:A:47:THR:HG21	1:A:62:GLU:HB2	2	0.69
(1,3142)	1:A:47:THR:HG22	1:A:62:GLU:HB2	2	0.69
(1,3142)	1:A:47:THR:HG23	1:A:62:GLU:HB2	2	0.69
(1,3142)	1:A:47:THR:HG21	1:A:62:GLU:HG2	2	0.69
(1,3142)	1:A:47:THR:HG22	1:A:62:GLU:HG2	2	0.69
(1,3142)	1:A:47:THR:HG23	1:A:62:GLU:HG2	2	0.69
(1,3142)	1:A:47:THR:HG21	1:A:62:GLU:HB2	7	0.69
(1,3142)	1:A:47:THR:HG22	1:A:62:GLU:HB2	7	0.69
(1,3142)	1:A:47:THR:HG23	1:A:62:GLU:HB2	7	0.69
(1,3142)	1:A:47:THR:HG21	1:A:62:GLU:HG2	7	0.69
(1,3142)	1:A:47:THR:HG22	1:A:62:GLU:HG2	7	0.69
(1,3142)	1:A:47:THR:HG23	1:A:62:GLU:HG2	7	0.69
(1,3142)	1:A:47:THR:HG21	1:A:62:GLU:HB2	10	0.69
(1,3142)	1:A:47:THR:HG22	1:A:62:GLU:HB2	10	0.69
(1,3142)	1:A:47:THR:HG23	1:A:62:GLU:HB2	10	0.69
(1,3142)	1:A:47:THR:HG21	1:A:62:GLU:HG2	10	0.69
(1,3142)	1:A:47:THR:HG22	1:A:62:GLU:HG2	10	0.69
(1,3142)	1:A:47:THR:HG23	1:A:62:GLU:HG2	10	0.69
(1,3012)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:32:SER:HB2	7	0.69
(1,3012)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:35:GLN:HA	7	0.69
(1,2530)	1:A:13:HIS:HD2	1:A:67:LEU:HG	9	0.69
(1,2530)	1:A:88:HIS:HD2	1:A:87:GLN:HB2	9	0.69
(1,2530)	1:A:88:HIS:HD2	1:A:147:LEU:HB3	9	0.69
(1,2530)	1:A:88:HIS:HD2	1:A:147:LEU:HG	9	0.69

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2509)	1:A:130:LYS:HB3	1:A:102:VAL:HA	1	0.69
(1,2509)	1:A:130:LYS:HD2	1:A:102:VAL:HA	1	0.69
(1,2509)	1:A:130:LYS:HB3	1:A:102:VAL:HA	10	0.69
(1,2509)	1:A:130:LYS:HD2	1:A:102:VAL:HA	10	0.69
(1,1703)	1:A:27:PRO:HA	1:A:27:PRO:HG2	1	0.69
(1,1703)	1:A:27:PRO:HA	1:A:27:PRO:HG2	3	0.69
(1,1703)	1:A:27:PRO:HA	1:A:27:PRO:HG2	5	0.69
(1,1703)	1:A:27:PRO:HA	1:A:27:PRO:HG2	6	0.69
(1,1703)	1:A:27:PRO:HA	1:A:27:PRO:HG2	7	0.69
(1,1703)	1:A:27:PRO:HA	1:A:27:PRO:HG2	8	0.69
(1,1320)	1:A:128:ASP:H	1:A:127:HIS:HB2	10	0.69
(1,1295)	1:A:87:GLN:HE21	1:A:87:GLN:HB2	5	0.69
(1,1015)	1:A:121:ILE:H	1:A:120:GLU:HG3	5	0.69
(1,724)	1:A:8:ASP:H	1:A:7:LEU:HB2	9	0.68
(1,677)	1:A:20:ARG:HD2	1:A:68:TYR:HE1	9	0.68
(1,677)	1:A:20:ARG:HD2	1:A:68:TYR:HE2	9	0.68
(1,638)	1:A:122:PHE:HB2	1:A:113:CYS:HB3	6	0.68
(1,638)	1:A:122:PHE:HB2	1:A:113:CYS:HB3	7	0.68
(1,3142)	1:A:47:THR:HG21	1:A:62:GLU:HB2	5	0.68
(1,3142)	1:A:47:THR:HG22	1:A:62:GLU:HB2	5	0.68
(1,3142)	1:A:47:THR:HG23	1:A:62:GLU:HB2	5	0.68
(1,3142)	1:A:47:THR:HG21	1:A:62:GLU:HG2	5	0.68
(1,3142)	1:A:47:THR:HG22	1:A:62:GLU:HG2	5	0.68
(1,3142)	1:A:47:THR:HG23	1:A:62:GLU:HG2	5	0.68
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG22	7	0.68
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG21	7	0.68
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG23	7	0.68
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG12	7	0.68
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG11	7	0.68
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG13	7	0.68
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:33:LEU:HD22	7	0.68
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:33:LEU:HD21	7	0.68
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:33:LEU:HD23	7	0.68
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD22	7	0.68
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD21	7	0.68
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD23	7	0.68
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD12	7	0.68
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD11	7	0.68
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD13	7	0.68
(1,2761)	1:A:49:PHE:HB2	1:A:39:GLN:HB2	1	0.68
(1,2761)	1:A:49:PHE:HB2	1:A:39:GLN:HG2	1	0.68
(1,2761)	1:A:49:PHE:HB2	1:A:39:GLN:HG3	1	0.68

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2761)	1:A:61:LYS:HE3	1:A:62:GLU:HG3	1	0.68
(1,2761)	1:A:49:PHE:HB2	1:A:39:GLN:HB2	9	0.68
(1,2761)	1:A:49:PHE:HB2	1:A:39:GLN:HG2	9	0.68
(1,2761)	1:A:49:PHE:HB2	1:A:39:GLN:HG3	9	0.68
(1,2761)	1:A:61:LYS:HE3	1:A:62:GLU:HG3	9	0.68
(1,2530)	1:A:13:HIS:HD2	1:A:67:LEU:HG	8	0.68
(1,2530)	1:A:88:HIS:HD2	1:A:87:GLN:HB2	8	0.68
(1,2530)	1:A:88:HIS:HD2	1:A:147:LEU:HB3	8	0.68
(1,2530)	1:A:88:HIS:HD2	1:A:147:LEU:HG	8	0.68
(1,2509)	1:A:130:LYS:HB3	1:A:102:VAL:HA	4	0.68
(1,2509)	1:A:130:LYS:HD2	1:A:102:VAL:HA	4	0.68
(1,2212)	1:A:17:LYS:H	1:A:17:LYS:HG3	5	0.68
(1,1918)	1:A:105:GLN:H	1:A:105:GLN:HE22	3	0.68
(1,1703)	1:A:27:PRO:HA	1:A:27:PRO:HG2	10	0.68
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD22	1:A:4:PRO:HD3	2	0.68
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD21	1:A:4:PRO:HD3	2	0.68
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD23	1:A:4:PRO:HD3	2	0.68
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD12	1:A:4:PRO:HD3	2	0.68
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD11	1:A:4:PRO:HD3	2	0.68
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD13	1:A:4:PRO:HD3	2	0.68
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD22	1:A:4:PRO:HD3	4	0.68
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD21	1:A:4:PRO:HD3	4	0.68
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD23	1:A:4:PRO:HD3	4	0.68
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD12	1:A:4:PRO:HD3	4	0.68
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD11	1:A:4:PRO:HD3	4	0.68
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD13	1:A:4:PRO:HD3	4	0.68
(1,137)	1:A:59:HIS:HD2	1:A:27:PRO:HB2	8	0.68
(1,1295)	1:A:87:GLN:HE21	1:A:87:GLN:HB2	2	0.68
(1,1186)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:50:THR:HG21	1	0.68
(1,1186)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:50:THR:HG22	1	0.68
(1,1186)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:50:THR:HG23	1	0.68
(1,1015)	1:A:121:ILE:H	1:A:120:GLU:HG3	1	0.68
(1,1015)	1:A:121:ILE:H	1:A:120:GLU:HG3	6	0.68
(1,74)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:31:VAL:HA	3	0.67
(1,74)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:31:VAL:HA	6	0.67
(1,703)	1:A:61:LYS:HE2	1:A:59:HIS:HB2	7	0.67
(1,703)	1:A:61:LYS:HE2	1:A:59:HIS:HB2	8	0.67
(1,678)	1:A:20:ARG:HD2	1:A:20:ARG:HA	5	0.67
(1,550)	1:A:53:ASP:H	1:A:73:GLY:HA3	5	0.67
(1,550)	1:A:53:ASP:H	1:A:73:GLY:HA3	6	0.67
(1,468)	1:A:97:VAL:HG22	1:A:98:MET:HG3	4	0.67
(1,468)	1:A:97:VAL:HG21	1:A:98:MET:HG3	4	0.67

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,468)	1:A:97:VAL:HG23	1:A:98:MET:HG3	4	0.67
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG21	9	0.67
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG22	9	0.67
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG23	9	0.67
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:61:LYS:HD2	9	0.67
(1,2908)	1:A:142:LYS:HB2	1:A:139:SER:HB3	1	0.67
(1,2908)	1:A:154:LYS:HB3	1:A:160:GLY:HA3	1	0.67
(1,2908)	1:A:110:GLN:HG2	1:A:79:SER:HB2	1	0.67
(1,2747)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:59:HIS:HB3	1	0.67
(1,2747)	1:A:82:ARG:HD3	1:A:85:PHE:HB3	1	0.67
(1,2288)	1:A:41:LYS:H	1:A:41:LYS:HB3	8	0.67
(1,2288)	1:A:41:LYS:H	1:A:41:LYS:HB3	10	0.67
(1,1918)	1:A:105:GLN:H	1:A:105:GLN:HE22	8	0.67
(1,1324)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:35:GLN:H	7	0.67
(1,1304)	1:A:6:LYS:HD3	1:A:56:LYS:HB2	6	0.67
(1,1015)	1:A:121:ILE:H	1:A:120:GLU:HG3	2	0.67
(1,703)	1:A:61:LYS:HE2	1:A:59:HIS:HB2	9	0.66
(1,468)	1:A:97:VAL:HG22	1:A:98:MET:HG3	6	0.66
(1,468)	1:A:97:VAL:HG21	1:A:98:MET:HG3	6	0.66
(1,468)	1:A:97:VAL:HG23	1:A:98:MET:HG3	6	0.66
(1,3274)	1:A:67:LEU:H	1:A:17:LYS:HE2	4	0.66
(1,3274)	1:A:67:LEU:H	1:A:68:TYR:HB2	4	0.66
(1,3142)	1:A:47:THR:HG21	1:A:62:GLU:HB2	4	0.66
(1,3142)	1:A:47:THR:HG22	1:A:62:GLU:HB2	4	0.66
(1,3142)	1:A:47:THR:HG23	1:A:62:GLU:HB2	4	0.66
(1,3142)	1:A:47:THR:HG21	1:A:62:GLU:HG2	4	0.66
(1,3142)	1:A:47:THR:HG22	1:A:62:GLU:HG2	4	0.66
(1,3142)	1:A:47:THR:HG23	1:A:62:GLU:HG2	4	0.66
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG22	9	0.66
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG21	9	0.66
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG23	9	0.66
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG12	9	0.66
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG11	9	0.66
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG13	9	0.66
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:33:LEU:HD22	9	0.66
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:33:LEU:HD21	9	0.66
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:33:LEU:HD23	9	0.66
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD22	9	0.66
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD21	9	0.66
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD23	9	0.66
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD12	9	0.66
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD11	9	0.66

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD13	9	0.66
(1,3012)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:32:SER:HB2	10	0.66
(1,3012)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:35:GLN:HA	10	0.66
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG21	1	0.66
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG22	1	0.66
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG23	1	0.66
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:61:LYS:HD2	1	0.66
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG21	6	0.66
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG22	6	0.66
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG23	6	0.66
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:61:LYS:HD2	6	0.66
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG21	7	0.66
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG22	7	0.66
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:23:THR:HG23	7	0.66
(1,2936)	1:A:59:HIS:HB2	1:A:61:LYS:HD2	7	0.66
(1,2777)	1:A:17:LYS:HE3	1:A:18:GLY:H	1	0.66
(1,2777)	1:A:142:LYS:HE3	1:A:144:ARG:H	1	0.66
(1,2747)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:59:HIS:HB3	7	0.66
(1,2747)	1:A:82:ARG:HD3	1:A:85:PHE:HB3	7	0.66
(1,2288)	1:A:41:LYS:H	1:A:41:LYS:HB3	1	0.66
(1,2288)	1:A:41:LYS:H	1:A:41:LYS:HB3	3	0.66
(1,2288)	1:A:41:LYS:H	1:A:41:LYS:HB3	5	0.66
(1,2288)	1:A:41:LYS:H	1:A:41:LYS:HB3	6	0.66
(1,218)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:151:SER:HB2	3	0.66
(1,218)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:151:SER:HB2	3	0.66
(1,218)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:151:SER:HB2	3	0.66
(1,1954)	1:A:144:ARG:H	1:A:142:LYS:HG3	7	0.66
(1,1947)	1:A:69:ASP:H	1:A:68:TYR:HB3	2	0.66
(1,1545)	1:A:61:LYS:HG2	1:A:60:VAL:HA	4	0.66
(1,1406)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:147:LEU:HD22	6	0.66
(1,1406)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:147:LEU:HD21	6	0.66
(1,1406)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:147:LEU:HD23	6	0.66
(1,1404)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:146:VAL:H	3	0.66
(1,908)	1:A:130:LYS:HB3	1:A:129:GLN:H	4	0.65
(1,724)	1:A:8:ASP:H	1:A:7:LEU:HB2	2	0.65
(1,615)	1:A:146:VAL:H	1:A:145:GLY:HA3	1	0.65
(1,615)	1:A:146:VAL:H	1:A:145:GLY:HA3	3	0.65
(1,615)	1:A:146:VAL:H	1:A:145:GLY:HA3	7	0.65
(1,468)	1:A:97:VAL:HG22	1:A:98:MET:HG3	2	0.65
(1,468)	1:A:97:VAL:HG21	1:A:98:MET:HG3	2	0.65
(1,468)	1:A:97:VAL:HG23	1:A:98:MET:HG3	2	0.65
(1,468)	1:A:97:VAL:HG22	1:A:98:MET:HG3	9	0.65

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,468)	1:A:97:VAL:HG21	1:A:98:MET:HG3	9	0.65
(1,468)	1:A:97:VAL:HG23	1:A:98:MET:HG3	9	0.65
(1,3142)	1:A:47:THR:HG21	1:A:62:GLU:HB2	6	0.65
(1,3142)	1:A:47:THR:HG22	1:A:62:GLU:HB2	6	0.65
(1,3142)	1:A:47:THR:HG23	1:A:62:GLU:HB2	6	0.65
(1,3142)	1:A:47:THR:HG21	1:A:62:GLU:HG2	6	0.65
(1,3142)	1:A:47:THR:HG22	1:A:62:GLU:HG2	6	0.65
(1,3142)	1:A:47:THR:HG23	1:A:62:GLU:HG2	6	0.65
(1,3142)	1:A:47:THR:HG21	1:A:62:GLU:HB2	9	0.65
(1,3142)	1:A:47:THR:HG22	1:A:62:GLU:HB2	9	0.65
(1,3142)	1:A:47:THR:HG23	1:A:62:GLU:HB2	9	0.65
(1,3142)	1:A:47:THR:HG21	1:A:62:GLU:HG2	9	0.65
(1,3142)	1:A:47:THR:HG22	1:A:62:GLU:HG2	9	0.65
(1,3142)	1:A:47:THR:HG23	1:A:62:GLU:HG2	9	0.65
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG22	1	0.65
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG21	1	0.65
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG23	1	0.65
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG12	1	0.65
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG11	1	0.65
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG13	1	0.65
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:33:LEU:HD22	1	0.65
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:33:LEU:HD21	1	0.65
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:33:LEU:HD23	1	0.65
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD22	1	0.65
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD21	1	0.65
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD23	1	0.65
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD12	1	0.65
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD11	1	0.65
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD13	1	0.65
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG22	2	0.65
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG21	2	0.65
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG23	2	0.65
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG12	2	0.65
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG11	2	0.65
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG13	2	0.65
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:33:LEU:HD22	2	0.65
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:33:LEU:HD21	2	0.65
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:33:LEU:HD23	2	0.65
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD22	2	0.65
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD21	2	0.65
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD23	2	0.65
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD12	2	0.65

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD11	2	0.65
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD13	2	0.65
(1,2960)	1:A:78:ARG:HB2	1:A:40:CYS:HA	10	0.65
(1,2960)	1:A:78:ARG:HB2	1:A:77:SER:HA	10	0.65
(1,2288)	1:A:41:LYS:H	1:A:41:LYS:HB3	2	0.65
(1,2288)	1:A:41:LYS:H	1:A:41:LYS:HB3	4	0.65
(1,2288)	1:A:41:LYS:H	1:A:41:LYS:HB3	7	0.65
(1,2288)	1:A:41:LYS:H	1:A:41:LYS:HB3	9	0.65
(1,2212)	1:A:17:LYS:H	1:A:17:LYS:HG3	2	0.65
(1,1918)	1:A:105:GLN:H	1:A:105:GLN:HE22	6	0.65
(1,1406)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:147:LEU:HD22	9	0.65
(1,1406)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:147:LEU:HD21	9	0.65
(1,1406)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:147:LEU:HD23	9	0.65
(1,1295)	1:A:87:GLN:HE21	1:A:87:GLN:HB2	3	0.65
(1,1061)	1:A:35:GLN:HE22	1:A:35:GLN:HG3	1	0.65
(1,1061)	1:A:35:GLN:HE22	1:A:35:GLN:HG3	8	0.65
(1,918)	1:A:130:LYS:HB2	1:A:130:LYS:HE3	2	0.64
(1,918)	1:A:130:LYS:HB2	1:A:130:LYS:HE3	4	0.64
(1,615)	1:A:146:VAL:H	1:A:145:GLY:HA3	5	0.64
(1,615)	1:A:146:VAL:H	1:A:145:GLY:HA3	6	0.64
(1,615)	1:A:146:VAL:H	1:A:145:GLY:HA3	10	0.64
(1,468)	1:A:97:VAL:HG22	1:A:98:MET:HG3	1	0.64
(1,468)	1:A:97:VAL:HG21	1:A:98:MET:HG3	1	0.64
(1,468)	1:A:97:VAL:HG23	1:A:98:MET:HG3	1	0.64
(1,363)	1:A:108:ASP:HA	1:A:77:SER:HB3	3	0.64
(1,339)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:88:HIS:HB2	8	0.64
(1,339)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:88:HIS:HB2	8	0.64
(1,339)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:88:HIS:HB2	8	0.64
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG22	4	0.64
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG21	4	0.64
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG23	4	0.64
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG12	4	0.64
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG11	4	0.64
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG13	4	0.64
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:33:LEU:HD22	4	0.64
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:33:LEU:HD21	4	0.64
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:33:LEU:HD23	4	0.64
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD22	4	0.64
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD21	4	0.64
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD23	4	0.64
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD12	4	0.64
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD11	4	0.64

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD13	4	0.64
(1,3012)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:32:SER:HB2	2	0.64
(1,3012)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:35:GLN:HA	2	0.64
(1,2960)	1:A:78:ARG:HB2	1:A:40:CYS:HA	9	0.64
(1,2960)	1:A:78:ARG:HB2	1:A:77:SER:HA	9	0.64
(1,2950)	1:A:71:THR:HB	1:A:16:ASN:HB2	5	0.64
(1,2950)	1:A:71:THR:HB	1:A:54:ASP:HB2	5	0.64
(1,2950)	1:A:71:THR:HB	1:A:54:ASP:HB3	5	0.64
(1,2777)	1:A:17:LYS:HE3	1:A:18:GLY:H	10	0.64
(1,2777)	1:A:142:LYS:HE3	1:A:144:ARG:H	10	0.64
(1,2530)	1:A:13:HIS:HD2	1:A:67:LEU:HG	3	0.64
(1,2530)	1:A:88:HIS:HD2	1:A:87:GLN:HB2	3	0.64
(1,2530)	1:A:88:HIS:HD2	1:A:147:LEU:HB3	3	0.64
(1,2530)	1:A:88:HIS:HD2	1:A:147:LEU:HG	3	0.64
(1,2097)	1:A:127:HIS:H	1:A:125:ASN:HD22	10	0.64
(1,1947)	1:A:69:ASP:H	1:A:68:TYR:HB3	3	0.64
(1,1947)	1:A:69:ASP:H	1:A:68:TYR:HB3	4	0.64
(1,1454)	1:A:78:ARG:HG3	1:A:156:PHE:HZ	8	0.64
(1,1406)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:147:LEU:HD22	4	0.64
(1,1406)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:147:LEU:HD21	4	0.64
(1,1406)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:147:LEU:HD23	4	0.64
(1,1404)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:146:VAL:H	7	0.64
(1,1323)	1:A:34:GLU:H	1:A:34:GLU:HB3	5	0.64
(1,1015)	1:A:121:ILE:H	1:A:120:GLU:HG3	3	0.64
(1,918)	1:A:130:LYS:HB2	1:A:130:LYS:HE3	3	0.63
(1,918)	1:A:130:LYS:HB2	1:A:130:LYS:HE3	9	0.63
(1,724)	1:A:8:ASP:H	1:A:7:LEU:HB2	5	0.63
(1,703)	1:A:61:LYS:HE2	1:A:59:HIS:HB2	1	0.63
(1,638)	1:A:122:PHE:HB2	1:A:113:CYS:HB3	9	0.63
(1,615)	1:A:146:VAL:H	1:A:145:GLY:HA3	2	0.63
(1,615)	1:A:146:VAL:H	1:A:145:GLY:HA3	9	0.63
(1,339)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:88:HIS:HB2	9	0.63
(1,339)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:88:HIS:HB2	9	0.63
(1,339)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:88:HIS:HB2	9	0.63
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG22	8	0.63
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG21	8	0.63
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG23	8	0.63
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG12	8	0.63
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG11	8	0.63
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG13	8	0.63
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:33:LEU:HD22	8	0.63
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:33:LEU:HD21	8	0.63

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:33:LEU:HD23	8	0.63
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD22	8	0.63
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD21	8	0.63
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD23	8	0.63
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD12	8	0.63
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD11	8	0.63
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD13	8	0.63
(1,2962)	1:A:65:PRO:HB3	1:A:67:LEU:HG	4	0.63
(1,2962)	1:A:78:ARG:HB3	1:A:41:LYS:HG3	4	0.63
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:57:MET:HG2	6	0.63
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:57:MET:HG3	6	0.63
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:57:MET:HG2	6	0.63
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:57:MET:HG3	6	0.63
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:57:MET:HG2	6	0.63
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:57:MET:HG3	6	0.63
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:39:GLN:HG3	6	0.63
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:39:GLN:HG3	6	0.63
(1,2927)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:39:GLN:HG3	6	0.63
(1,2748)	1:A:82:ARG:HD3	1:A:82:ARG:HA	3	0.63
(1,2748)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:THR:HB	3	0.63
(1,2212)	1:A:17:LYS:H	1:A:17:LYS:HG3	6	0.63
(1,2212)	1:A:17:LYS:H	1:A:17:LYS:HG3	10	0.63
(1,1954)	1:A:144:ARG:H	1:A:142:LYS:HG3	6	0.63
(1,1918)	1:A:105:GLN:H	1:A:105:GLN:HE22	9	0.63
(1,1392)	1:A:19:SER:HB2	1:A:21:ALA:HB2	5	0.63
(1,1392)	1:A:19:SER:HB2	1:A:21:ALA:HB1	5	0.63
(1,1392)	1:A:19:SER:HB2	1:A:21:ALA:HB3	5	0.63
(1,1389)	1:A:20:ARG:H	1:A:19:SER:HB2	5	0.63
(1,1187)	1:A:60:VAL:H	1:A:59:HIS:HB2	3	0.63
(1,1187)	1:A:60:VAL:H	1:A:59:HIS:HB2	5	0.63
(1,1187)	1:A:60:VAL:H	1:A:59:HIS:HB2	9	0.63
(1,1154)	1:A:118:SER:H	1:A:117:PRO:HB3	7	0.63
(1,1061)	1:A:35:GLN:HE22	1:A:35:GLN:HG3	3	0.63
(1,1061)	1:A:35:GLN:HE22	1:A:35:GLN:HG3	5	0.63
(1,1061)	1:A:35:GLN:HE22	1:A:35:GLN:HG3	6	0.63
(1,1061)	1:A:35:GLN:HE22	1:A:35:GLN:HG3	10	0.63
(1,638)	1:A:122:PHE:HB2	1:A:113:CYS:HB3	2	0.62
(1,638)	1:A:122:PHE:HB2	1:A:113:CYS:HB3	8	0.62
(1,638)	1:A:122:PHE:HB2	1:A:113:CYS:HB3	10	0.62
(1,615)	1:A:146:VAL:H	1:A:145:GLY:HA3	4	0.62
(1,615)	1:A:146:VAL:H	1:A:145:GLY:HA3	8	0.62
(1,550)	1:A:53:ASP:H	1:A:73:GLY:HA3	7	0.62

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,550)	1:A:53:ASP:H	1:A:73:GLY:HA3	8	0.62
(1,550)	1:A:53:ASP:H	1:A:73:GLY:HA3	10	0.62
(1,339)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:88:HIS:HB2	2	0.62
(1,339)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:88:HIS:HB2	2	0.62
(1,339)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:88:HIS:HB2	2	0.62
(1,339)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:88:HIS:HB2	3	0.62
(1,339)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:88:HIS:HB2	3	0.62
(1,339)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:88:HIS:HB2	3	0.62
(1,3012)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:32:SER:HB2	4	0.62
(1,3012)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:35:GLN:HA	4	0.62
(1,3012)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:32:SER:HB2	9	0.62
(1,3012)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:35:GLN:HA	9	0.62
(1,2960)	1:A:78:ARG:HB2	1:A:40:CYS:HA	2	0.62
(1,2960)	1:A:78:ARG:HB2	1:A:77:SER:HA	2	0.62
(1,2212)	1:A:17:LYS:H	1:A:17:LYS:HG3	1	0.62
(1,2097)	1:A:127:HIS:H	1:A:125:ASN:HD22	2	0.62
(1,1883)	1:A:94:ALA:H	1:A:134:LYS:HG2	10	0.62
(1,1323)	1:A:34:GLU:H	1:A:34:GLU:HB3	3	0.62
(1,1323)	1:A:34:GLU:H	1:A:34:GLU:HB3	4	0.62
(1,1323)	1:A:34:GLU:H	1:A:34:GLU:HB3	6	0.62
(1,1323)	1:A:34:GLU:H	1:A:34:GLU:HB3	8	0.62
(1,1323)	1:A:34:GLU:H	1:A:34:GLU:HB3	10	0.62
(1,1295)	1:A:87:GLN:HE21	1:A:87:GLN:HB2	4	0.62
(1,1187)	1:A:60:VAL:H	1:A:59:HIS:HB2	1	0.62
(1,1187)	1:A:60:VAL:H	1:A:59:HIS:HB2	2	0.62
(1,1187)	1:A:60:VAL:H	1:A:59:HIS:HB2	6	0.62
(1,1187)	1:A:60:VAL:H	1:A:59:HIS:HB2	7	0.62
(1,1187)	1:A:60:VAL:H	1:A:59:HIS:HB2	8	0.62
(1,1187)	1:A:60:VAL:H	1:A:59:HIS:HB2	10	0.62
(1,1154)	1:A:118:SER:H	1:A:117:PRO:HB3	1	0.62
(1,724)	1:A:8:ASP:H	1:A:7:LEU:HB2	4	0.61
(1,594)	1:A:70:LEU:HB2	1:A:73:GLY:HA2	3	0.61
(1,339)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:88:HIS:HB2	7	0.61
(1,339)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:88:HIS:HB2	7	0.61
(1,339)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:88:HIS:HB2	7	0.61
(1,3012)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:32:SER:HB2	5	0.61
(1,3012)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:35:GLN:HA	5	0.61
(1,2960)	1:A:78:ARG:HB2	1:A:40:CYS:HA	4	0.61
(1,2960)	1:A:78:ARG:HB2	1:A:77:SER:HA	4	0.61
(1,2634)	1:A:111:ALA:HB2	1:A:78:ARG:HG3	4	0.61
(1,2634)	1:A:111:ALA:HB1	1:A:78:ARG:HG3	4	0.61
(1,2634)	1:A:111:ALA:HB3	1:A:78:ARG:HG3	4	0.61

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:111:ALA:HB2	4	0.61
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:111:ALA:HB1	4	0.61
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:111:ALA:HB3	4	0.61
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:111:ALA:HB2	4	0.61
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:111:ALA:HB1	4	0.61
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:111:ALA:HB3	4	0.61
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:111:ALA:HB2	4	0.61
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:111:ALA:HB1	4	0.61
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:111:ALA:HB3	4	0.61
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD22	1:A:4:PRO:HD3	9	0.61
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD21	1:A:4:PRO:HD3	9	0.61
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD23	1:A:4:PRO:HD3	9	0.61
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD12	1:A:4:PRO:HD3	9	0.61
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD11	1:A:4:PRO:HD3	9	0.61
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD13	1:A:4:PRO:HD3	9	0.61
(1,1323)	1:A:34:GLU:H	1:A:34:GLU:HB3	1	0.61
(1,1323)	1:A:34:GLU:H	1:A:34:GLU:HB3	2	0.61
(1,1323)	1:A:34:GLU:H	1:A:34:GLU:HB3	7	0.61
(1,1323)	1:A:34:GLU:H	1:A:34:GLU:HB3	9	0.61
(1,1320)	1:A:128:ASP:H	1:A:127:HIS:HB2	6	0.61
(1,1320)	1:A:128:ASP:H	1:A:127:HIS:HB2	7	0.61
(1,1295)	1:A:87:GLN:HE21	1:A:87:GLN:HB2	6	0.61
(1,1295)	1:A:87:GLN:HE21	1:A:87:GLN:HB2	7	0.61
(1,1187)	1:A:60:VAL:H	1:A:59:HIS:HB2	4	0.61
(1,918)	1:A:130:LYS:HB2	1:A:130:LYS:HE3	6	0.6
(1,677)	1:A:20:ARG:HD2	1:A:68:TYR:HE1	4	0.6
(1,677)	1:A:20:ARG:HD2	1:A:68:TYR:HE2	4	0.6
(1,594)	1:A:70:LEU:HB2	1:A:73:GLY:HA2	2	0.6
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG22	6	0.6
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG21	6	0.6
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG23	6	0.6
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG12	6	0.6
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG11	6	0.6
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG13	6	0.6
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:33:LEU:HD22	6	0.6
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:33:LEU:HD21	6	0.6
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:33:LEU:HD23	6	0.6
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD22	6	0.6
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD21	6	0.6
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD23	6	0.6
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD12	6	0.6
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD11	6	0.6

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD13	6	0.6
(1,3012)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:32:SER:HB2	6	0.6
(1,3012)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:35:GLN:HA	6	0.6
(1,3012)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:32:SER:HB2	8	0.6
(1,3012)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:35:GLN:HA	8	0.6
(1,2960)	1:A:78:ARG:HB2	1:A:40:CYS:HA	6	0.6
(1,2960)	1:A:78:ARG:HB2	1:A:77:SER:HA	6	0.6
(1,2761)	1:A:49:PHE:HB2	1:A:39:GLN:HB2	5	0.6
(1,2761)	1:A:49:PHE:HB2	1:A:39:GLN:HG2	5	0.6
(1,2761)	1:A:49:PHE:HB2	1:A:39:GLN:HG3	5	0.6
(1,2761)	1:A:61:LYS:HE3	1:A:62:GLU:HG3	5	0.6
(1,2761)	1:A:49:PHE:HB2	1:A:39:GLN:HB2	8	0.6
(1,2761)	1:A:49:PHE:HB2	1:A:39:GLN:HG2	8	0.6
(1,2761)	1:A:49:PHE:HB2	1:A:39:GLN:HG3	8	0.6
(1,2761)	1:A:61:LYS:HE3	1:A:62:GLU:HG3	8	0.6
(1,2530)	1:A:13:HIS:HD2	1:A:67:LEU:HG	2	0.6
(1,2530)	1:A:88:HIS:HD2	1:A:87:GLN:HB2	2	0.6
(1,2530)	1:A:88:HIS:HD2	1:A:147:LEU:HB3	2	0.6
(1,2530)	1:A:88:HIS:HD2	1:A:147:LEU:HG	2	0.6
(1,1947)	1:A:69:ASP:H	1:A:68:TYR:HB3	8	0.6
(1,137)	1:A:59:HIS:HD2	1:A:27:PRO:HB2	1	0.6
(1,1324)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:35:GLN:H	5	0.6
(1,1320)	1:A:128:ASP:H	1:A:127:HIS:HB2	3	0.6
(1,1320)	1:A:128:ASP:H	1:A:127:HIS:HB2	4	0.6
(1,1240)	1:A:78:ARG:HB2	1:A:47:THR:HA	3	0.6
(1,1186)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:50:THR:HG21	3	0.6
(1,1186)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:50:THR:HG22	3	0.6
(1,1186)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:50:THR:HG23	3	0.6
(1,1154)	1:A:118:SER:H	1:A:117:PRO:HB3	10	0.6
(1,1015)	1:A:121:ILE:H	1:A:120:GLU:HG3	4	0.6
(1,908)	1:A:130:LYS:HB3	1:A:129:GLN:H	1	0.59
(1,702)	1:A:61:LYS:HE2	1:A:19:SER:H	3	0.59
(1,702)	1:A:61:LYS:HE2	1:A:19:SER:H	4	0.59
(1,677)	1:A:20:ARG:HD2	1:A:68:TYR:HE1	5	0.59
(1,677)	1:A:20:ARG:HD2	1:A:68:TYR:HE2	5	0.59
(1,677)	1:A:20:ARG:HD2	1:A:68:TYR:HE1	7	0.59
(1,677)	1:A:20:ARG:HD2	1:A:68:TYR:HE2	7	0.59
(1,638)	1:A:122:PHE:HB2	1:A:113:CYS:HB3	3	0.59
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG22	10	0.59
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG21	10	0.59
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG23	10	0.59
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG12	10	0.59

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG11	10	0.59
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG13	10	0.59
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:33:LEU:HD22	10	0.59
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:33:LEU:HD21	10	0.59
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:33:LEU:HD23	10	0.59
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD22	10	0.59
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD21	10	0.59
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD23	10	0.59
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD12	10	0.59
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD11	10	0.59
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD13	10	0.59
(1,3012)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:32:SER:HB2	1	0.59
(1,3012)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:35:GLN:HA	1	0.59
(1,2960)	1:A:78:ARG:HB2	1:A:40:CYS:HA	8	0.59
(1,2960)	1:A:78:ARG:HB2	1:A:77:SER:HA	8	0.59
(1,2761)	1:A:49:PHE:HB2	1:A:39:GLN:HB2	2	0.59
(1,2761)	1:A:49:PHE:HB2	1:A:39:GLN:HG2	2	0.59
(1,2761)	1:A:49:PHE:HB2	1:A:39:GLN:HG3	2	0.59
(1,2761)	1:A:61:LYS:HE3	1:A:62:GLU:HG3	2	0.59
(1,218)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:151:SER:HB2	4	0.59
(1,218)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:151:SER:HB2	4	0.59
(1,218)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:151:SER:HB2	4	0.59
(1,2106)	1:A:42:ALA:H	1:A:41:LYS:HB3	6	0.59
(1,1320)	1:A:128:ASP:H	1:A:127:HIS:HB2	8	0.59
(1,1316)	1:A:127:HIS:H	1:A:127:HIS:HB3	9	0.59
(1,724)	1:A:8:ASP:H	1:A:7:LEU:HB2	1	0.58
(1,339)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:88:HIS:HB2	4	0.58
(1,339)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:88:HIS:HB2	4	0.58
(1,339)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:88:HIS:HB2	4	0.58
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG22	3	0.58
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG21	3	0.58
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG23	3	0.58
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG12	3	0.58
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG11	3	0.58
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG13	3	0.58
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:33:LEU:HD22	3	0.58
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:33:LEU:HD21	3	0.58
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:33:LEU:HD23	3	0.58
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD22	3	0.58
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD21	3	0.58
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD23	3	0.58
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD12	3	0.58

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD11	3	0.58
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD13	3	0.58
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG22	5	0.58
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG21	5	0.58
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG23	5	0.58
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG12	5	0.58
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG11	5	0.58
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:28:VAL:HG13	5	0.58
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:33:LEU:HD22	5	0.58
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:33:LEU:HD21	5	0.58
(1,3018)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:33:LEU:HD23	5	0.58
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD22	5	0.58
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD21	5	0.58
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD23	5	0.58
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD12	5	0.58
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD11	5	0.58
(1,3018)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:33:LEU:HD13	5	0.58
(1,3012)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:32:SER:HB2	3	0.58
(1,3012)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:35:GLN:HA	3	0.58
(1,2634)	1:A:111:ALA:HB2	1:A:78:ARG:HG3	5	0.58
(1,2634)	1:A:111:ALA:HB1	1:A:78:ARG:HG3	5	0.58
(1,2634)	1:A:111:ALA:HB3	1:A:78:ARG:HG3	5	0.58
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:111:ALA:HB2	5	0.58
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:111:ALA:HB1	5	0.58
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:111:ALA:HB3	5	0.58
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:111:ALA:HB2	5	0.58
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:111:ALA:HB1	5	0.58
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:111:ALA:HB3	5	0.58
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:111:ALA:HB2	5	0.58
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:111:ALA:HB1	5	0.58
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:111:ALA:HB3	5	0.58
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:92:GLU:HG2	7	0.58
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:92:GLU:HG3	7	0.58
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:92:GLU:HG2	7	0.58
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:92:GLU:HG3	7	0.58
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:92:GLU:HG2	7	0.58
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:92:GLU:HG3	7	0.58
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:126:GLU:HG2	7	0.58
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:126:GLU:HG2	7	0.58
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:126:GLU:HG2	7	0.58
(1,2212)	1:A:17:LYS:H	1:A:17:LYS:HG3	7	0.58
(1,218)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:151:SER:HB2	5	0.58

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,218)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:151:SER:HB2	5	0.58
(1,218)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:151:SER:HB2	5	0.58
(1,218)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:151:SER:HB2	9	0.58
(1,218)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:151:SER:HB2	9	0.58
(1,218)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:151:SER:HB2	9	0.58
(1,1947)	1:A:69:ASP:H	1:A:68:TYR:HB3	7	0.58
(1,1803)	1:A:87:GLN:H	1:A:87:GLN:HB3	2	0.58
(1,1154)	1:A:118:SER:H	1:A:117:PRO:HB3	2	0.58
(1,1154)	1:A:118:SER:H	1:A:117:PRO:HB3	4	0.58
(1,1154)	1:A:118:SER:H	1:A:117:PRO:HB3	5	0.58
(1,1154)	1:A:118:SER:H	1:A:117:PRO:HB3	6	0.58
(1,1154)	1:A:118:SER:H	1:A:117:PRO:HB3	8	0.58
(1,581)	1:A:148:GLY:HA2	1:A:125:ASN:HA	6	0.57
(1,548)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:64:LYS:HB2	4	0.57
(1,548)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:64:LYS:HB3	4	0.57
(1,339)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:88:HIS:HB2	5	0.57
(1,339)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:88:HIS:HB2	5	0.57
(1,339)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:88:HIS:HB2	5	0.57
(1,2960)	1:A:78:ARG:HB2	1:A:40:CYS:HA	5	0.57
(1,2960)	1:A:78:ARG:HB2	1:A:77:SER:HA	5	0.57
(1,2950)	1:A:71:THR:HB	1:A:16:ASN:HB2	7	0.57
(1,2950)	1:A:71:THR:HB	1:A:54:ASP:HB2	7	0.57
(1,2950)	1:A:71:THR:HB	1:A:54:ASP:HB3	7	0.57
(1,2748)	1:A:82:ARG:HD3	1:A:82:ARG:HA	8	0.57
(1,2748)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:THR:HB	8	0.57
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:92:GLU:HG2	6	0.57
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:92:GLU:HG3	6	0.57
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:92:GLU:HG2	6	0.57
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:92:GLU:HG3	6	0.57
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:92:GLU:HG2	6	0.57
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:92:GLU:HG3	6	0.57
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:126:GLU:HG2	6	0.57
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:126:GLU:HG2	6	0.57
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:126:GLU:HG2	6	0.57
(1,2530)	1:A:13:HIS:HD2	1:A:67:LEU:HG	6	0.57
(1,2530)	1:A:88:HIS:HD2	1:A:87:GLN:HB2	6	0.57
(1,2530)	1:A:88:HIS:HD2	1:A:147:LEU:HB3	6	0.57
(1,2530)	1:A:88:HIS:HD2	1:A:147:LEU:HG	6	0.57
(1,1918)	1:A:105:GLN:H	1:A:105:GLN:HE22	2	0.57
(1,1803)	1:A:87:GLN:H	1:A:87:GLN:HB3	6	0.57
(1,1663)	1:A:149:VAL:HG12	1:A:148:GLY:HA2	4	0.57
(1,1663)	1:A:149:VAL:HG11	1:A:148:GLY:HA2	4	0.57

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1663)	1:A:149:VAL:HG13	1:A:148:GLY:HA2	4	0.57
(1,1488)	1:A:41:LYS:H	1:A:41:LYS:HG2	6	0.57
(1,1324)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:35:GLN:H	2	0.57
(1,770)	1:A:81:ASP:HB2	1:A:79:SER:HB2	3	0.56
(1,548)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:64:LYS:HB2	9	0.56
(1,548)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:64:LYS:HB3	9	0.56
(1,44)	1:A:151:SER:HB3	1:A:123:THR:HA	2	0.56
(1,363)	1:A:108:ASP:HA	1:A:77:SER:HB3	8	0.56
(1,2960)	1:A:78:ARG:HB2	1:A:40:CYS:HA	7	0.56
(1,2960)	1:A:78:ARG:HB2	1:A:77:SER:HA	7	0.56
(1,2950)	1:A:71:THR:HB	1:A:16:ASN:HB2	1	0.56
(1,2950)	1:A:71:THR:HB	1:A:54:ASP:HB2	1	0.56
(1,2950)	1:A:71:THR:HB	1:A:54:ASP:HB3	1	0.56
(1,2761)	1:A:49:PHE:HB2	1:A:39:GLN:HB2	6	0.56
(1,2761)	1:A:49:PHE:HB2	1:A:39:GLN:HG2	6	0.56
(1,2761)	1:A:49:PHE:HB2	1:A:39:GLN:HG3	6	0.56
(1,2761)	1:A:61:LYS:HE3	1:A:62:GLU:HG3	6	0.56
(1,2634)	1:A:111:ALA:HB2	1:A:78:ARG:HG3	1	0.56
(1,2634)	1:A:111:ALA:HB1	1:A:78:ARG:HG3	1	0.56
(1,2634)	1:A:111:ALA:HB3	1:A:78:ARG:HG3	1	0.56
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:111:ALA:HB2	1	0.56
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:111:ALA:HB1	1	0.56
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:111:ALA:HB3	1	0.56
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:111:ALA:HB2	1	0.56
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:111:ALA:HB1	1	0.56
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:111:ALA:HB3	1	0.56
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:111:ALA:HB2	1	0.56
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:111:ALA:HB1	1	0.56
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:111:ALA:HB3	1	0.56
(1,2634)	1:A:111:ALA:HB2	1:A:78:ARG:HG3	6	0.56
(1,2634)	1:A:111:ALA:HB1	1:A:78:ARG:HG3	6	0.56
(1,2634)	1:A:111:ALA:HB3	1:A:78:ARG:HG3	6	0.56
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:111:ALA:HB2	6	0.56
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:111:ALA:HB1	6	0.56
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:111:ALA:HB3	6	0.56
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:111:ALA:HB2	6	0.56
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:111:ALA:HB1	6	0.56
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:111:ALA:HB3	6	0.56
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:111:ALA:HB2	6	0.56
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:111:ALA:HB1	6	0.56
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:111:ALA:HB3	6	0.56
(1,2634)	1:A:111:ALA:HB2	1:A:78:ARG:HG3	9	0.56

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2634)	1:A:111:ALA:HB1	1:A:78:ARG:HG3	9	0.56
(1,2634)	1:A:111:ALA:HB3	1:A:78:ARG:HG3	9	0.56
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:111:ALA:HB2	9	0.56
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:111:ALA:HB1	9	0.56
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:111:ALA:HB3	9	0.56
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:111:ALA:HB2	9	0.56
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:111:ALA:HB1	9	0.56
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:111:ALA:HB3	9	0.56
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:111:ALA:HB2	9	0.56
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:111:ALA:HB1	9	0.56
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:111:ALA:HB3	9	0.56
(1,218)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:151:SER:HB2	6	0.56
(1,218)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:151:SER:HB2	6	0.56
(1,218)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:151:SER:HB2	6	0.56
(1,2106)	1:A:42:ALA:H	1:A:41:LYS:HB3	10	0.56
(1,1803)	1:A:87:GLN:H	1:A:87:GLN:HB3	7	0.56
(1,1803)	1:A:87:GLN:H	1:A:87:GLN:HB3	9	0.56
(1,1663)	1:A:149:VAL:HG12	1:A:148:GLY:HA2	6	0.56
(1,1663)	1:A:149:VAL:HG11	1:A:148:GLY:HA2	6	0.56
(1,1663)	1:A:149:VAL:HG13	1:A:148:GLY:HA2	6	0.56
(1,1663)	1:A:149:VAL:HG12	1:A:148:GLY:HA2	9	0.56
(1,1663)	1:A:149:VAL:HG11	1:A:148:GLY:HA2	9	0.56
(1,1663)	1:A:149:VAL:HG13	1:A:148:GLY:HA2	9	0.56
(1,1324)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:35:GLN:H	10	0.56
(1,1320)	1:A:128:ASP:H	1:A:127:HIS:HB2	1	0.56
(1,1206)	1:A:27:PRO:HD2	1:A:27:PRO:HB3	4	0.56
(1,1206)	1:A:27:PRO:HD2	1:A:27:PRO:HB3	8	0.56
(1,1186)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:50:THR:HG21	5	0.56
(1,1186)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:50:THR:HG22	5	0.56
(1,1186)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:50:THR:HG23	5	0.56
(1,117)	1:A:134:LYS:HG3	1:A:134:LYS:HA	10	0.56
(1,918)	1:A:130:LYS:HB2	1:A:130:LYS:HE3	5	0.55
(1,677)	1:A:20:ARG:HD2	1:A:68:TYR:HE1	3	0.55
(1,677)	1:A:20:ARG:HD2	1:A:68:TYR:HE2	3	0.55
(1,581)	1:A:148:GLY:HA2	1:A:125:ASN:HA	9	0.55
(1,44)	1:A:151:SER:HB3	1:A:123:THR:HA	10	0.55
(1,363)	1:A:108:ASP:HA	1:A:77:SER:HB3	6	0.55
(1,3459)	1:A:118:SER:H	1:A:117:PRO:HD3	9	0.55
(1,3459)	1:A:118:SER:H	1:A:118:SER:HB2	9	0.55
(1,339)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:88:HIS:HB2	6	0.55
(1,339)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:88:HIS:HB2	6	0.55
(1,339)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:88:HIS:HB2	6	0.55

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2785)	1:A:130:LYS:HE2	1:A:125:ASN:HD21	1	0.55
(1,2785)	1:A:130:LYS:HE3	1:A:125:ASN:HD21	1	0.55
(1,2785)	1:A:131:CYS:HB3	1:A:112:ALA:H	1	0.55
(1,2761)	1:A:49:PHE:HB2	1:A:39:GLN:HB2	4	0.55
(1,2761)	1:A:49:PHE:HB2	1:A:39:GLN:HG2	4	0.55
(1,2761)	1:A:49:PHE:HB2	1:A:39:GLN:HG3	4	0.55
(1,2761)	1:A:61:LYS:HE3	1:A:62:GLU:HG3	4	0.55
(1,2679)	1:A:22:PRO:HD3	1:A:62:GLU:HB3	10	0.55
(1,2679)	1:A:22:PRO:HD3	1:A:22:PRO:HB3	10	0.55
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:92:GLU:HG2	9	0.55
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:92:GLU:HG3	9	0.55
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:92:GLU:HG2	9	0.55
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:92:GLU:HG3	9	0.55
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:92:GLU:HG2	9	0.55
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:92:GLU:HG3	9	0.55
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:126:GLU:HG2	9	0.55
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:126:GLU:HG2	9	0.55
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:126:GLU:HG2	9	0.55
(1,2106)	1:A:42:ALA:H	1:A:41:LYS:HB3	8	0.55
(1,2097)	1:A:127:HIS:H	1:A:125:ASN:HD22	3	0.55
(1,1803)	1:A:87:GLN:H	1:A:87:GLN:HB3	3	0.55
(1,1663)	1:A:149:VAL:HG12	1:A:148:GLY:HA2	2	0.55
(1,1663)	1:A:149:VAL:HG11	1:A:148:GLY:HA2	2	0.55
(1,1663)	1:A:149:VAL:HG13	1:A:148:GLY:HA2	2	0.55
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD22	1:A:4:PRO:HD3	10	0.55
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD21	1:A:4:PRO:HD3	10	0.55
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD23	1:A:4:PRO:HD3	10	0.55
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD12	1:A:4:PRO:HD3	10	0.55
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD11	1:A:4:PRO:HD3	10	0.55
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD13	1:A:4:PRO:HD3	10	0.55
(1,1206)	1:A:27:PRO:HD2	1:A:27:PRO:HB3	6	0.55
(1,1206)	1:A:27:PRO:HD2	1:A:27:PRO:HB3	7	0.55
(1,1206)	1:A:27:PRO:HD2	1:A:27:PRO:HB3	10	0.55
(1,908)	1:A:130:LYS:HB3	1:A:129:GLN:H	2	0.54
(1,581)	1:A:148:GLY:HA2	1:A:125:ASN:HA	5	0.54
(1,548)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:64:LYS:HB2	5	0.54
(1,548)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:64:LYS:HB3	5	0.54
(1,534)	1:A:4:PRO:HD3	1:A:32:SER:HB3	4	0.54
(1,2950)	1:A:71:THR:HB	1:A:16:ASN:HB2	6	0.54
(1,2950)	1:A:71:THR:HB	1:A:54:ASP:HB2	6	0.54
(1,2950)	1:A:71:THR:HB	1:A:54:ASP:HB3	6	0.54
(1,2950)	1:A:71:THR:HB	1:A:16:ASN:HB2	10	0.54

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2950)	1:A:71:THR:HB	1:A:54:ASP:HB2	10	0.54
(1,2950)	1:A:71:THR:HB	1:A:54:ASP:HB3	10	0.54
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HB2	10	0.54
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HB3	10	0.54
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:28:VAL:HB	10	0.54
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:35:GLN:HB2	10	0.54
(1,2894)	1:A:80:CYS:HB2	1:A:9:LEU:HB3	10	0.54
(1,2859)	1:A:16:ASN:HB2	1:A:17:LYS:HG3	8	0.54
(1,2859)	1:A:71:THR:HG21	1:A:16:ASN:HB2	8	0.54
(1,2859)	1:A:71:THR:HG22	1:A:16:ASN:HB2	8	0.54
(1,2859)	1:A:71:THR:HG23	1:A:16:ASN:HB2	8	0.54
(1,2679)	1:A:22:PRO:HD3	1:A:62:GLU:HB3	2	0.54
(1,2679)	1:A:22:PRO:HD3	1:A:22:PRO:HB3	2	0.54
(1,1947)	1:A:69:ASP:H	1:A:68:TYR:HB3	6	0.54
(1,1947)	1:A:69:ASP:H	1:A:68:TYR:HB3	10	0.54
(1,1803)	1:A:87:GLN:H	1:A:87:GLN:HB3	5	0.54
(1,1488)	1:A:41:LYS:H	1:A:41:LYS:HG2	9	0.54
(1,1324)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:35:GLN:H	3	0.54
(1,1206)	1:A:27:PRO:HD2	1:A:27:PRO:HB3	1	0.54
(1,1206)	1:A:27:PRO:HD2	1:A:27:PRO:HB3	9	0.54
(1,1186)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:50:THR:HG21	8	0.54
(1,1186)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:50:THR:HG22	8	0.54
(1,1186)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:50:THR:HG23	8	0.54
(1,1154)	1:A:118:SER:H	1:A:117:PRO:HB3	3	0.54
(1,1154)	1:A:118:SER:H	1:A:117:PRO:HB3	9	0.54
(1,918)	1:A:130:LYS:HB2	1:A:130:LYS:HE3	10	0.53
(1,2761)	1:A:49:PHE:HB2	1:A:39:GLN:HB2	7	0.53
(1,2761)	1:A:49:PHE:HB2	1:A:39:GLN:HG2	7	0.53
(1,2761)	1:A:49:PHE:HB2	1:A:39:GLN:HG3	7	0.53
(1,2761)	1:A:61:LYS:HE3	1:A:62:GLU:HG3	7	0.53
(1,2761)	1:A:49:PHE:HB2	1:A:39:GLN:HB2	10	0.53
(1,2761)	1:A:49:PHE:HB2	1:A:39:GLN:HG2	10	0.53
(1,2761)	1:A:49:PHE:HB2	1:A:39:GLN:HG3	10	0.53
(1,2761)	1:A:61:LYS:HE3	1:A:62:GLU:HG3	10	0.53
(1,2696)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:64:LYS:HG2	10	0.53
(1,2696)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:65:PRO:HB3	10	0.53
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:92:GLU:HG2	5	0.53
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:92:GLU:HG3	5	0.53
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:92:GLU:HG2	5	0.53
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:92:GLU:HG3	5	0.53
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:92:GLU:HG2	5	0.53
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:92:GLU:HG3	5	0.53

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:126:GLU:HG2	5	0.53
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:126:GLU:HG2	5	0.53
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:126:GLU:HG2	5	0.53
(1,218)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:151:SER:HB2	1	0.53
(1,218)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:151:SER:HB2	1	0.53
(1,218)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:151:SER:HB2	1	0.53
(1,2097)	1:A:127:HIS:H	1:A:125:ASN:HD22	7	0.53
(1,1825)	1:A:85:PHE:H	1:A:85:PHE:HB3	10	0.53
(1,1663)	1:A:149:VAL:HG12	1:A:148:GLY:HA2	7	0.53
(1,1663)	1:A:149:VAL:HG11	1:A:148:GLY:HA2	7	0.53
(1,1663)	1:A:149:VAL:HG13	1:A:148:GLY:HA2	7	0.53
(1,1570)	1:A:74:LYS:HG2	1:A:74:LYS:HB2	5	0.53
(1,1570)	1:A:74:LYS:HG2	1:A:74:LYS:HB2	8	0.53
(1,1488)	1:A:41:LYS:H	1:A:41:LYS:HG2	5	0.53
(1,1324)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:35:GLN:H	8	0.53
(1,1240)	1:A:78:ARG:HB2	1:A:47:THR:HA	5	0.53
(1,1240)	1:A:78:ARG:HB2	1:A:47:THR:HA	7	0.53
(1,1240)	1:A:78:ARG:HB2	1:A:47:THR:HA	8	0.53
(1,1206)	1:A:27:PRO:HD2	1:A:27:PRO:HB3	2	0.53
(1,1206)	1:A:27:PRO:HD2	1:A:27:PRO:HB3	3	0.53
(1,1206)	1:A:27:PRO:HD2	1:A:27:PRO:HB3	5	0.53
(1,1186)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:50:THR:HG21	2	0.53
(1,1186)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:50:THR:HG22	2	0.53
(1,1186)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:50:THR:HG23	2	0.53
(1,1186)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:50:THR:HG21	10	0.53
(1,1186)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:50:THR:HG22	10	0.53
(1,1186)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:50:THR:HG23	10	0.53
(1,918)	1:A:130:LYS:HB2	1:A:130:LYS:HE3	1	0.52
(1,825)	1:A:125:ASN:HD22	1:A:125:ASN:HB2	8	0.52
(1,722)	1:A:7:LEU:HB3	1:A:34:GLU:HG2	1	0.52
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB3	1:A:23:THR:HG21	2	0.52
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB3	1:A:23:THR:HG22	2	0.52
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB3	1:A:23:THR:HG23	2	0.52
(1,2976)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:98:MET:HG2	2	0.52
(1,2976)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:98:MET:HG2	2	0.52
(1,2976)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:98:MET:HG2	2	0.52
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB2	1:A:23:THR:HG21	2	0.52
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB2	1:A:23:THR:HG22	2	0.52
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB2	1:A:23:THR:HG23	2	0.52
(1,2679)	1:A:22:PRO:HD3	1:A:62:GLU:HB3	9	0.52
(1,2679)	1:A:22:PRO:HD3	1:A:22:PRO:HB3	9	0.52
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:92:GLU:HG2	4	0.52

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:92:GLU:HG3	4	0.52
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:92:GLU:HG2	4	0.52
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:92:GLU:HG3	4	0.52
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:92:GLU:HG2	4	0.52
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:92:GLU:HG3	4	0.52
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:126:GLU:HG2	4	0.52
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:126:GLU:HG2	4	0.52
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:126:GLU:HG2	4	0.52
(1,2124)	1:A:68:TYR:H	1:A:67:LEU:HB2	4	0.52
(1,1825)	1:A:85:PHE:H	1:A:85:PHE:HB3	2	0.52
(1,1825)	1:A:85:PHE:H	1:A:85:PHE:HB3	4	0.52
(1,1825)	1:A:85:PHE:H	1:A:85:PHE:HB3	7	0.52
(1,1803)	1:A:87:GLN:H	1:A:87:GLN:HB3	4	0.52
(1,1672)	1:A:147:LEU:HB2	1:A:147:LEU:HD22	2	0.52
(1,1672)	1:A:147:LEU:HB2	1:A:147:LEU:HD21	2	0.52
(1,1672)	1:A:147:LEU:HB2	1:A:147:LEU:HD23	2	0.52
(1,1672)	1:A:147:LEU:HB2	1:A:147:LEU:HD22	3	0.52
(1,1672)	1:A:147:LEU:HB2	1:A:147:LEU:HD21	3	0.52
(1,1672)	1:A:147:LEU:HB2	1:A:147:LEU:HD23	3	0.52
(1,1672)	1:A:147:LEU:HB2	1:A:147:LEU:HD22	4	0.52
(1,1672)	1:A:147:LEU:HB2	1:A:147:LEU:HD21	4	0.52
(1,1672)	1:A:147:LEU:HB2	1:A:147:LEU:HD23	4	0.52
(1,1672)	1:A:147:LEU:HB2	1:A:147:LEU:HD22	5	0.52
(1,1672)	1:A:147:LEU:HB2	1:A:147:LEU:HD21	5	0.52
(1,1672)	1:A:147:LEU:HB2	1:A:147:LEU:HD23	5	0.52
(1,1672)	1:A:147:LEU:HB2	1:A:147:LEU:HD22	6	0.52
(1,1672)	1:A:147:LEU:HB2	1:A:147:LEU:HD21	6	0.52
(1,1672)	1:A:147:LEU:HB2	1:A:147:LEU:HD23	6	0.52
(1,1672)	1:A:147:LEU:HB2	1:A:147:LEU:HD22	7	0.52
(1,1672)	1:A:147:LEU:HB2	1:A:147:LEU:HD21	7	0.52
(1,1672)	1:A:147:LEU:HB2	1:A:147:LEU:HD23	7	0.52
(1,1672)	1:A:147:LEU:HB2	1:A:147:LEU:HD22	8	0.52
(1,1672)	1:A:147:LEU:HB2	1:A:147:LEU:HD21	8	0.52
(1,1672)	1:A:147:LEU:HB2	1:A:147:LEU:HD23	8	0.52
(1,1672)	1:A:147:LEU:HB2	1:A:147:LEU:HD22	9	0.52
(1,1672)	1:A:147:LEU:HB2	1:A:147:LEU:HD21	9	0.52
(1,1672)	1:A:147:LEU:HB2	1:A:147:LEU:HD23	9	0.52
(1,1672)	1:A:147:LEU:HB2	1:A:147:LEU:HD22	10	0.52
(1,1672)	1:A:147:LEU:HB2	1:A:147:LEU:HD21	10	0.52
(1,1672)	1:A:147:LEU:HB2	1:A:147:LEU:HD23	10	0.52
(1,1663)	1:A:149:VAL:HG12	1:A:148:GLY:HA2	5	0.52
(1,1663)	1:A:149:VAL:HG11	1:A:148:GLY:HA2	5	0.52

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1663)	1:A:149:VAL:HG13	1:A:148:GLY:HA2	5	0.52
(1,1663)	1:A:149:VAL:HG12	1:A:148:GLY:HA2	8	0.52
(1,1663)	1:A:149:VAL:HG11	1:A:148:GLY:HA2	8	0.52
(1,1663)	1:A:149:VAL:HG13	1:A:148:GLY:HA2	8	0.52
(1,1663)	1:A:149:VAL:HG12	1:A:148:GLY:HA2	10	0.52
(1,1663)	1:A:149:VAL:HG11	1:A:148:GLY:HA2	10	0.52
(1,1663)	1:A:149:VAL:HG13	1:A:148:GLY:HA2	10	0.52
(1,1584)	1:A:74:LYS:HG2	1:A:14:SER:HB2	8	0.52
(1,1570)	1:A:74:LYS:HG2	1:A:74:LYS:HB2	1	0.52
(1,1570)	1:A:74:LYS:HG2	1:A:74:LYS:HB2	2	0.52
(1,1570)	1:A:74:LYS:HG2	1:A:74:LYS:HB2	3	0.52
(1,1570)	1:A:74:LYS:HG2	1:A:74:LYS:HB2	4	0.52
(1,1570)	1:A:74:LYS:HG2	1:A:74:LYS:HB2	6	0.52
(1,1570)	1:A:74:LYS:HG2	1:A:74:LYS:HB2	7	0.52
(1,1570)	1:A:74:LYS:HG2	1:A:74:LYS:HB2	9	0.52
(1,1570)	1:A:74:LYS:HG2	1:A:74:LYS:HB2	10	0.52
(1,1488)	1:A:41:LYS:H	1:A:41:LYS:HG2	1	0.52
(1,548)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:64:LYS:HB2	1	0.51
(1,548)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:64:LYS:HB3	1	0.51
(1,3441)	1:A:40:CYS:H	1:A:49:PHE:HB2	1	0.51
(1,3441)	1:A:40:CYS:H	1:A:60:VAL:HB	1	0.51
(1,3323)	1:A:116:ASP:H	1:A:98:MET:HG2	9	0.51
(1,3323)	1:A:116:ASP:H	1:A:117:PRO:HG2	9	0.51
(1,3323)	1:A:116:ASP:H	1:A:117:PRO:HG3	9	0.51
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HB2	2	0.51
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HB3	2	0.51
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:28:VAL:HB	2	0.51
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:35:GLN:HB2	2	0.51
(1,2894)	1:A:80:CYS:HB2	1:A:9:LEU:HB3	2	0.51
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HB2	4	0.51
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HB3	4	0.51
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:28:VAL:HB	4	0.51
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:35:GLN:HB2	4	0.51
(1,2894)	1:A:80:CYS:HB2	1:A:9:LEU:HB3	4	0.51
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HB2	9	0.51
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HB3	9	0.51
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:28:VAL:HB	9	0.51
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:35:GLN:HB2	9	0.51
(1,2894)	1:A:80:CYS:HB2	1:A:9:LEU:HB3	9	0.51
(1,2777)	1:A:17:LYS:HE3	1:A:18:GLY:H	2	0.51
(1,2777)	1:A:142:LYS:HE3	1:A:144:ARG:H	2	0.51
(1,2777)	1:A:17:LYS:HE3	1:A:18:GLY:H	5	0.51

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2777)	1:A:142:LYS:HE3	1:A:144:ARG:H	5	0.51
(1,2761)	1:A:49:PHE:HB2	1:A:39:GLN:HB2	3	0.51
(1,2761)	1:A:49:PHE:HB2	1:A:39:GLN:HG2	3	0.51
(1,2761)	1:A:49:PHE:HB2	1:A:39:GLN:HG3	3	0.51
(1,2761)	1:A:61:LYS:HE3	1:A:62:GLU:HG3	3	0.51
(1,2679)	1:A:22:PRO:HD3	1:A:62:GLU:HB3	3	0.51
(1,2679)	1:A:22:PRO:HD3	1:A:22:PRO:HB3	3	0.51
(1,2679)	1:A:22:PRO:HD3	1:A:62:GLU:HB3	4	0.51
(1,2679)	1:A:22:PRO:HD3	1:A:22:PRO:HB3	4	0.51
(1,2679)	1:A:22:PRO:HD3	1:A:62:GLU:HB3	7	0.51
(1,2679)	1:A:22:PRO:HD3	1:A:22:PRO:HB3	7	0.51
(1,2679)	1:A:22:PRO:HD3	1:A:62:GLU:HB3	8	0.51
(1,2679)	1:A:22:PRO:HD3	1:A:22:PRO:HB3	8	0.51
(1,2124)	1:A:68:TYR:H	1:A:67:LEU:HB2	2	0.51
(1,2106)	1:A:42:ALA:H	1:A:41:LYS:HB3	4	0.51
(1,2097)	1:A:127:HIS:H	1:A:125:ASN:HD22	4	0.51
(1,1925)	1:A:43:VAL:H	1:A:41:LYS:HB3	6	0.51
(1,1825)	1:A:85:PHE:H	1:A:85:PHE:HB3	3	0.51
(1,1825)	1:A:85:PHE:H	1:A:85:PHE:HB3	8	0.51
(1,1803)	1:A:87:GLN:H	1:A:87:GLN:HB3	8	0.51
(1,1672)	1:A:147:LEU:HB2	1:A:147:LEU:HD22	1	0.51
(1,1672)	1:A:147:LEU:HB2	1:A:147:LEU:HD21	1	0.51
(1,1672)	1:A:147:LEU:HB2	1:A:147:LEU:HD23	1	0.51
(1,1488)	1:A:41:LYS:H	1:A:41:LYS:HG2	10	0.51
(1,1324)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:35:GLN:H	9	0.51
(1,1320)	1:A:128:ASP:H	1:A:127:HIS:HB2	5	0.51
(1,1240)	1:A:78:ARG:HB2	1:A:47:THR:HA	1	0.51
(1,1186)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:50:THR:HG21	7	0.51
(1,1186)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:50:THR:HG22	7	0.51
(1,1186)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:50:THR:HG23	7	0.51
(1,594)	1:A:70:LEU:HB2	1:A:73:GLY:HA2	4	0.5
(1,363)	1:A:108:ASP:HA	1:A:77:SER:HB3	7	0.5
(1,3488)	1:A:155:GLN:HE21	1:A:115:ALA:HA	10	0.5
(1,3488)	1:A:155:GLN:HE21	1:A:117:PRO:HA	10	0.5
(1,2960)	1:A:78:ARG:HB2	1:A:40:CYS:HA	3	0.5
(1,2960)	1:A:78:ARG:HB2	1:A:77:SER:HA	3	0.5
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HB2	1	0.5
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HB3	1	0.5
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:28:VAL:HB	1	0.5
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:35:GLN:HB2	1	0.5
(1,2894)	1:A:80:CYS:HB2	1:A:9:LEU:HB3	1	0.5
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HB2	7	0.5

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HB3	7	0.5
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:28:VAL:HB	7	0.5
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:35:GLN:HB2	7	0.5
(1,2894)	1:A:80:CYS:HB2	1:A:9:LEU:HB3	7	0.5
(1,2679)	1:A:22:PRO:HD3	1:A:62:GLU:HB3	6	0.5
(1,2679)	1:A:22:PRO:HD3	1:A:22:PRO:HB3	6	0.5
(1,2634)	1:A:111:ALA:HB2	1:A:78:ARG:HG3	10	0.5
(1,2634)	1:A:111:ALA:HB1	1:A:78:ARG:HG3	10	0.5
(1,2634)	1:A:111:ALA:HB3	1:A:78:ARG:HG3	10	0.5
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:111:ALA:HB2	10	0.5
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:111:ALA:HB1	10	0.5
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:111:ALA:HB3	10	0.5
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:111:ALA:HB2	10	0.5
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:111:ALA:HB1	10	0.5
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:111:ALA:HB3	10	0.5
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:111:ALA:HB2	10	0.5
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:111:ALA:HB1	10	0.5
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:111:ALA:HB3	10	0.5
(1,1947)	1:A:69:ASP:H	1:A:68:TYR:HB3	1	0.5
(1,1947)	1:A:69:ASP:H	1:A:68:TYR:HB3	5	0.5
(1,1825)	1:A:85:PHE:H	1:A:85:PHE:HB3	6	0.5
(1,1663)	1:A:149:VAL:HG12	1:A:148:GLY:HA2	1	0.5
(1,1663)	1:A:149:VAL:HG11	1:A:148:GLY:HA2	1	0.5
(1,1663)	1:A:149:VAL:HG13	1:A:148:GLY:HA2	1	0.5
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD22	1:A:4:PRO:HD3	7	0.5
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD21	1:A:4:PRO:HD3	7	0.5
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD23	1:A:4:PRO:HD3	7	0.5
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD12	1:A:4:PRO:HD3	7	0.5
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD11	1:A:4:PRO:HD3	7	0.5
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD13	1:A:4:PRO:HD3	7	0.5
(1,1324)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:35:GLN:H	4	0.5
(1,1295)	1:A:87:GLN:HE21	1:A:87:GLN:HB2	1	0.5
(1,722)	1:A:7:LEU:HB3	1:A:34:GLU:HG2	5	0.49
(1,704)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:61:LYS:HE2	3	0.49
(1,704)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:61:LYS:HE2	3	0.49
(1,704)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:61:LYS:HE2	3	0.49
(1,548)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:64:LYS:HB2	6	0.49
(1,548)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:64:LYS:HB3	6	0.49
(1,3264)	1:A:96:ASP:H	1:A:134:LYS:HB3	3	0.49
(1,3264)	1:A:96:ASP:H	1:A:95:PRO:HG2	3	0.49
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB3	1:A:23:THR:HG21	5	0.49
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB3	1:A:23:THR:HG22	5	0.49

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB3	1:A:23:THR:HG23	5	0.49
(1,2976)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:98:MET:HG2	5	0.49
(1,2976)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:98:MET:HG2	5	0.49
(1,2976)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:98:MET:HG2	5	0.49
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB2	1:A:23:THR:HG21	5	0.49
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB2	1:A:23:THR:HG22	5	0.49
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB2	1:A:23:THR:HG23	5	0.49
(1,2962)	1:A:65:PRO:HB3	1:A:67:LEU:HG	8	0.49
(1,2962)	1:A:78:ARG:HB3	1:A:41:LYS:HG3	8	0.49
(1,2777)	1:A:17:LYS:HE3	1:A:18:GLY:H	3	0.49
(1,2777)	1:A:142:LYS:HE3	1:A:144:ARG:H	3	0.49
(1,2696)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:64:LYS:HG2	1	0.49
(1,2696)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:65:PRO:HB3	1	0.49
(1,2679)	1:A:22:PRO:HD3	1:A:62:GLU:HB3	5	0.49
(1,2679)	1:A:22:PRO:HD3	1:A:22:PRO:HB3	5	0.49
(1,218)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:151:SER:HB2	7	0.49
(1,218)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:151:SER:HB2	7	0.49
(1,218)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:151:SER:HB2	7	0.49
(1,2124)	1:A:68:TYR:H	1:A:67:LEU:HB2	6	0.49
(1,1825)	1:A:85:PHE:H	1:A:85:PHE:HB3	1	0.49
(1,1825)	1:A:85:PHE:H	1:A:85:PHE:HB3	5	0.49
(1,1825)	1:A:85:PHE:H	1:A:85:PHE:HB3	9	0.49
(1,1803)	1:A:87:GLN:H	1:A:87:GLN:HB3	1	0.49
(1,1803)	1:A:87:GLN:H	1:A:87:GLN:HB3	10	0.49
(1,1663)	1:A:149:VAL:HG12	1:A:148:GLY:HA2	3	0.49
(1,1663)	1:A:149:VAL:HG11	1:A:148:GLY:HA2	3	0.49
(1,1663)	1:A:149:VAL:HG13	1:A:148:GLY:HA2	3	0.49
(1,1488)	1:A:41:LYS:H	1:A:41:LYS:HG2	3	0.49
(1,1488)	1:A:41:LYS:H	1:A:41:LYS:HG2	7	0.49
(1,1401)	1:A:88:HIS:HB3	1:A:89:VAL:HG12	2	0.49
(1,1401)	1:A:88:HIS:HB3	1:A:89:VAL:HG11	2	0.49
(1,1401)	1:A:88:HIS:HB3	1:A:89:VAL:HG13	2	0.49
(1,363)	1:A:108:ASP:HA	1:A:77:SER:HB3	10	0.48
(1,2962)	1:A:65:PRO:HB3	1:A:67:LEU:HG	9	0.48
(1,2962)	1:A:78:ARG:HB3	1:A:41:LYS:HG3	9	0.48
(1,2859)	1:A:16:ASN:HB2	1:A:17:LYS:HG3	10	0.48
(1,2859)	1:A:71:THR:HG21	1:A:16:ASN:HB2	10	0.48
(1,2859)	1:A:71:THR:HG22	1:A:16:ASN:HB2	10	0.48
(1,2859)	1:A:71:THR:HG23	1:A:16:ASN:HB2	10	0.48
(1,2606)	1:A:129:GLN:HA	1:A:129:GLN:HB2	1	0.48
(1,2606)	1:A:129:GLN:HA	1:A:129:GLN:HG3	1	0.48
(1,2606)	1:A:129:GLN:HA	1:A:129:GLN:HB2	5	0.48

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2606)	1:A:129:GLN:HA	1:A:129:GLN:HG3	5	0.48
(1,2606)	1:A:129:GLN:HA	1:A:129:GLN:HB2	6	0.48
(1,2606)	1:A:129:GLN:HA	1:A:129:GLN:HG3	6	0.48
(1,2606)	1:A:129:GLN:HA	1:A:129:GLN:HB2	8	0.48
(1,2606)	1:A:129:GLN:HA	1:A:129:GLN:HG3	8	0.48
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:92:GLU:HG2	10	0.48
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:92:GLU:HG3	10	0.48
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:92:GLU:HG2	10	0.48
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:92:GLU:HG3	10	0.48
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:92:GLU:HG2	10	0.48
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:92:GLU:HG3	10	0.48
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:126:GLU:HG2	10	0.48
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:126:GLU:HG2	10	0.48
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:126:GLU:HG2	10	0.48
(1,2124)	1:A:68:TYR:H	1:A:67:LEU:HB2	8	0.48
(1,2124)	1:A:68:TYR:H	1:A:67:LEU:HB2	9	0.48
(1,2106)	1:A:42:ALA:H	1:A:41:LYS:HB3	2	0.48
(1,2097)	1:A:127:HIS:H	1:A:125:ASN:HD22	1	0.48
(1,1954)	1:A:144:ARG:H	1:A:142:LYS:HG3	2	0.48
(1,195)	1:A:126:GLU:HA	1:A:126:GLU:HG3	2	0.48
(1,1295)	1:A:87:GLN:HE21	1:A:87:GLN:HB2	10	0.48
(1,1270)	1:A:98:MET:HG2	1:A:133:PHE:HD1	4	0.48
(1,1270)	1:A:98:MET:HG2	1:A:133:PHE:HD2	4	0.48
(1,994)	1:A:61:LYS:HE3	1:A:50:THR:HB	4	0.47
(1,908)	1:A:130:LYS:HB3	1:A:129:GLN:H	8	0.47
(1,2679)	1:A:22:PRO:HD3	1:A:62:GLU:HB3	1	0.47
(1,2679)	1:A:22:PRO:HD3	1:A:22:PRO:HB3	1	0.47
(1,2634)	1:A:111:ALA:HB2	1:A:78:ARG:HG3	2	0.47
(1,2634)	1:A:111:ALA:HB1	1:A:78:ARG:HG3	2	0.47
(1,2634)	1:A:111:ALA:HB3	1:A:78:ARG:HG3	2	0.47
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:111:ALA:HB2	2	0.47
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:111:ALA:HB1	2	0.47
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:111:ALA:HB3	2	0.47
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:111:ALA:HB2	2	0.47
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:111:ALA:HB1	2	0.47
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:111:ALA:HB3	2	0.47
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:111:ALA:HB2	2	0.47
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:111:ALA:HB1	2	0.47
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:111:ALA:HB3	2	0.47
(1,2606)	1:A:129:GLN:HA	1:A:129:GLN:HB2	3	0.47
(1,2606)	1:A:129:GLN:HA	1:A:129:GLN:HG3	3	0.47
(1,2606)	1:A:129:GLN:HA	1:A:129:GLN:HB2	4	0.47

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2606)	1:A:129:GLN:HA	1:A:129:GLN:HG3	4	0.47
(1,2606)	1:A:129:GLN:HA	1:A:129:GLN:HB2	7	0.47
(1,2606)	1:A:129:GLN:HA	1:A:129:GLN:HG3	7	0.47
(1,2269)	1:A:141:PHE:H	1:A:142:LYS:HB3	5	0.47
(1,2124)	1:A:68:TYR:H	1:A:67:LEU:HB2	10	0.47
(1,1954)	1:A:144:ARG:H	1:A:142:LYS:HG3	10	0.47
(1,137)	1:A:59:HIS:HD2	1:A:27:PRO:HB2	9	0.47
(1,1324)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:35:GLN:H	1	0.47
(1,123)	1:A:127:HIS:HD2	1:A:127:HIS:HB3	8	0.47
(1,631)	1:A:123:THR:H	1:A:122:PHE:HB3	2	0.46
(1,548)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:64:LYS:HB2	2	0.46
(1,548)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:64:LYS:HB3	2	0.46
(1,548)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:64:LYS:HB2	8	0.46
(1,548)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:64:LYS:HB3	8	0.46
(1,3323)	1:A:116:ASP:H	1:A:98:MET:HG2	2	0.46
(1,3323)	1:A:116:ASP:H	1:A:117:PRO:HG2	2	0.46
(1,3323)	1:A:116:ASP:H	1:A:117:PRO:HG3	2	0.46
(1,3323)	1:A:116:ASP:H	1:A:98:MET:HG2	6	0.46
(1,3323)	1:A:116:ASP:H	1:A:117:PRO:HG2	6	0.46
(1,3323)	1:A:116:ASP:H	1:A:117:PRO:HG3	6	0.46
(1,3264)	1:A:96:ASP:H	1:A:134:LYS:HB3	8	0.46
(1,3264)	1:A:96:ASP:H	1:A:95:PRO:HG2	8	0.46
(1,2960)	1:A:78:ARG:HB2	1:A:40:CYS:HA	1	0.46
(1,2960)	1:A:78:ARG:HB2	1:A:77:SER:HA	1	0.46
(1,2950)	1:A:71:THR:HB	1:A:16:ASN:HB2	3	0.46
(1,2950)	1:A:71:THR:HB	1:A:54:ASP:HB2	3	0.46
(1,2950)	1:A:71:THR:HB	1:A:54:ASP:HB3	3	0.46
(1,2929)	1:A:22:PRO:HB3	1:A:24:ILE:H	1	0.46
(1,2929)	1:A:62:GLU:HB3	1:A:47:THR:H	1	0.46
(1,2929)	1:A:135:GLY:H	1:A:97:VAL:HB	1	0.46
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HB2	8	0.46
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HB3	8	0.46
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:28:VAL:HB	8	0.46
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:35:GLN:HB2	8	0.46
(1,2894)	1:A:80:CYS:HB2	1:A:9:LEU:HB3	8	0.46
(1,2859)	1:A:16:ASN:HB2	1:A:17:LYS:HG3	1	0.46
(1,2859)	1:A:71:THR:HG21	1:A:16:ASN:HB2	1	0.46
(1,2859)	1:A:71:THR:HG22	1:A:16:ASN:HB2	1	0.46
(1,2859)	1:A:71:THR:HG23	1:A:16:ASN:HB2	1	0.46
(1,2747)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:59:HIS:HB3	2	0.46
(1,2747)	1:A:82:ARG:HD3	1:A:85:PHE:HB3	2	0.46
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:38:ALA:HB2	5	0.46

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:38:ALA:HB1	5	0.46
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:38:ALA:HB3	5	0.46
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:41:LYS:HG2	5	0.46
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:38:ALA:HB2	10	0.46
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:38:ALA:HB1	10	0.46
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:38:ALA:HB3	10	0.46
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:41:LYS:HG2	10	0.46
(1,2634)	1:A:111:ALA:HB2	1:A:78:ARG:HG3	8	0.46
(1,2634)	1:A:111:ALA:HB1	1:A:78:ARG:HG3	8	0.46
(1,2634)	1:A:111:ALA:HB3	1:A:78:ARG:HG3	8	0.46
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:111:ALA:HB2	8	0.46
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:111:ALA:HB1	8	0.46
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:111:ALA:HB3	8	0.46
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:111:ALA:HB2	8	0.46
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:111:ALA:HB1	8	0.46
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:111:ALA:HB3	8	0.46
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:111:ALA:HB2	8	0.46
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:111:ALA:HB1	8	0.46
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:111:ALA:HB3	8	0.46
(1,2124)	1:A:68:TYR:H	1:A:67:LEU:HB2	3	0.46
(1,2124)	1:A:68:TYR:H	1:A:67:LEU:HB2	5	0.46
(1,2124)	1:A:68:TYR:H	1:A:67:LEU:HB2	7	0.46
(1,2106)	1:A:42:ALA:H	1:A:41:LYS:HB3	1	0.46
(1,195)	1:A:126:GLU:HA	1:A:126:GLU:HG3	3	0.46
(1,1925)	1:A:43:VAL:H	1:A:41:LYS:HB3	8	0.46
(1,1488)	1:A:41:LYS:H	1:A:41:LYS:HG2	2	0.46
(1,1324)	1:A:34:GLU:HB3	1:A:35:GLN:H	6	0.46
(1,123)	1:A:127:HIS:HD2	1:A:127:HIS:HB3	5	0.46
(1,123)	1:A:127:HIS:HD2	1:A:127:HIS:HB3	6	0.46
(1,1186)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:50:THR:HG21	6	0.46
(1,1186)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:50:THR:HG22	6	0.46
(1,1186)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:50:THR:HG23	6	0.46
(1,1096)	1:A:154:LYS:HB2	1:A:154:LYS:HE2	10	0.46
(1,581)	1:A:148:GLY:HA2	1:A:125:ASN:HA	4	0.45
(1,581)	1:A:148:GLY:HA2	1:A:125:ASN:HA	7	0.45
(1,581)	1:A:148:GLY:HA2	1:A:125:ASN:HA	8	0.45
(1,548)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:64:LYS:HB2	3	0.45
(1,548)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:64:LYS:HB3	3	0.45
(1,548)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:64:LYS:HB2	7	0.45
(1,548)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:64:LYS:HB3	7	0.45
(1,534)	1:A:4:PRO:HD3	1:A:32:SER:HB3	6	0.45
(1,3323)	1:A:116:ASP:H	1:A:98:MET:HG2	3	0.45

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3323)	1:A:116:ASP:H	1:A:117:PRO:HG2	3	0.45
(1,3323)	1:A:116:ASP:H	1:A:117:PRO:HG3	3	0.45
(1,3323)	1:A:116:ASP:H	1:A:98:MET:HG2	8	0.45
(1,3323)	1:A:116:ASP:H	1:A:117:PRO:HG2	8	0.45
(1,3323)	1:A:116:ASP:H	1:A:117:PRO:HG3	8	0.45
(1,3264)	1:A:96:ASP:H	1:A:134:LYS:HB3	4	0.45
(1,3264)	1:A:96:ASP:H	1:A:95:PRO:HG2	4	0.45
(1,3264)	1:A:96:ASP:H	1:A:134:LYS:HB3	7	0.45
(1,3264)	1:A:96:ASP:H	1:A:95:PRO:HG2	7	0.45
(1,3264)	1:A:96:ASP:H	1:A:134:LYS:HB3	9	0.45
(1,3264)	1:A:96:ASP:H	1:A:95:PRO:HG2	9	0.45
(1,295)	1:A:28:VAL:HG22	1:A:39:GLN:HG3	2	0.45
(1,295)	1:A:28:VAL:HG21	1:A:39:GLN:HG3	2	0.45
(1,295)	1:A:28:VAL:HG23	1:A:39:GLN:HG3	2	0.45
(1,295)	1:A:28:VAL:HG12	1:A:39:GLN:HG3	2	0.45
(1,295)	1:A:28:VAL:HG11	1:A:39:GLN:HG3	2	0.45
(1,295)	1:A:28:VAL:HG13	1:A:39:GLN:HG3	2	0.45
(1,2930)	1:A:22:PRO:HD2	1:A:22:PRO:HB3	10	0.45
(1,2930)	1:A:22:PRO:HD2	1:A:62:GLU:HB3	10	0.45
(1,2908)	1:A:142:LYS:HB2	1:A:139:SER:HB3	9	0.45
(1,2908)	1:A:154:LYS:HB3	1:A:160:GLY:HA3	9	0.45
(1,2908)	1:A:110:GLN:HG2	1:A:79:SER:HB2	9	0.45
(1,2723)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:63:GLY:HA2	2	0.45
(1,2723)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:63:GLY:HA3	2	0.45
(1,2723)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:63:GLY:HA2	2	0.45
(1,2723)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:63:GLY:HA3	2	0.45
(1,2723)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:63:GLY:HA2	2	0.45
(1,2723)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:63:GLY:HA3	2	0.45
(1,2723)	1:A:63:GLY:HA2	1:A:64:LYS:HD2	2	0.45
(1,2723)	1:A:63:GLY:HA3	1:A:64:LYS:HD2	2	0.45
(1,2723)	1:A:152:GLY:HA3	1:A:86:GLU:HB2	2	0.45
(1,2723)	1:A:152:GLY:HA3	1:A:153:PRO:HB2	2	0.45
(1,2723)	1:A:152:GLY:HA3	1:A:153:PRO:HG2	2	0.45
(1,2723)	1:A:152:GLY:HA3	1:A:153:PRO:HG3	2	0.45
(1,2723)	1:A:152:GLY:HA3	1:A:154:LYS:HB3	2	0.45
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:38:ALA:HB2	9	0.45
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:38:ALA:HB1	9	0.45
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:38:ALA:HB3	9	0.45
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:41:LYS:HG2	9	0.45
(1,2634)	1:A:111:ALA:HB2	1:A:78:ARG:HG3	3	0.45
(1,2634)	1:A:111:ALA:HB1	1:A:78:ARG:HG3	3	0.45
(1,2634)	1:A:111:ALA:HB3	1:A:78:ARG:HG3	3	0.45

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:111:ALA:HB2	3	0.45
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:111:ALA:HB1	3	0.45
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:111:ALA:HB3	3	0.45
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:111:ALA:HB2	3	0.45
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:111:ALA:HB1	3	0.45
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:111:ALA:HB3	3	0.45
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:111:ALA:HB2	3	0.45
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:111:ALA:HB1	3	0.45
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:111:ALA:HB3	3	0.45
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:92:GLU:HG2	1	0.45
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:92:GLU:HG3	1	0.45
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:92:GLU:HG2	1	0.45
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:92:GLU:HG3	1	0.45
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:92:GLU:HG2	1	0.45
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:92:GLU:HG3	1	0.45
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:126:GLU:HG2	1	0.45
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:126:GLU:HG2	1	0.45
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:126:GLU:HG2	1	0.45
(1,2106)	1:A:42:ALA:H	1:A:41:LYS:HB3	3	0.45
(1,195)	1:A:126:GLU:HA	1:A:126:GLU:HG3	7	0.45
(1,1401)	1:A:88:HIS:HB3	1:A:89:VAL:HG12	8	0.45
(1,1401)	1:A:88:HIS:HB3	1:A:89:VAL:HG11	8	0.45
(1,1401)	1:A:88:HIS:HB3	1:A:89:VAL:HG13	8	0.45
(1,137)	1:A:59:HIS:HD2	1:A:27:PRO:HB2	3	0.45
(1,137)	1:A:59:HIS:HD2	1:A:27:PRO:HB2	6	0.45
(1,1275)	1:A:161:GLY:HA2	1:A:155:GLN:HB2	2	0.45
(1,1270)	1:A:98:MET:HG2	1:A:133:PHE:HD1	7	0.45
(1,1270)	1:A:98:MET:HG2	1:A:133:PHE:HD2	7	0.45
(1,1185)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:61:LYS:HE3	3	0.45
(1,1096)	1:A:154:LYS:HB2	1:A:154:LYS:HE2	3	0.45
(1,1096)	1:A:154:LYS:HB2	1:A:154:LYS:HE2	9	0.45
(1,908)	1:A:130:LYS:HB3	1:A:129:GLN:H	3	0.44
(1,748)	1:A:96:ASP:H	1:A:96:ASP:HB3	1	0.44
(1,722)	1:A:7:LEU:HB3	1:A:34:GLU:HG2	4	0.44
(1,581)	1:A:148:GLY:HA2	1:A:125:ASN:HA	2	0.44
(1,3441)	1:A:40:CYS:H	1:A:49:PHE:HB2	4	0.44
(1,3441)	1:A:40:CYS:H	1:A:60:VAL:HB	4	0.44
(1,3441)	1:A:40:CYS:H	1:A:49:PHE:HB2	9	0.44
(1,3441)	1:A:40:CYS:H	1:A:60:VAL:HB	9	0.44
(1,3347)	1:A:101:MET:H	1:A:130:LYS:HE2	7	0.44
(1,3347)	1:A:101:MET:H	1:A:131:CYS:HB3	7	0.44
(1,2950)	1:A:71:THR:HB	1:A:16:ASN:HB2	8	0.44

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2950)	1:A:71:THR:HB	1:A:54:ASP:HB2	8	0.44
(1,2950)	1:A:71:THR:HB	1:A:54:ASP:HB3	8	0.44
(1,295)	1:A:28:VAL:HG22	1:A:39:GLN:HG3	1	0.44
(1,295)	1:A:28:VAL:HG21	1:A:39:GLN:HG3	1	0.44
(1,295)	1:A:28:VAL:HG23	1:A:39:GLN:HG3	1	0.44
(1,295)	1:A:28:VAL:HG12	1:A:39:GLN:HG3	1	0.44
(1,295)	1:A:28:VAL:HG11	1:A:39:GLN:HG3	1	0.44
(1,295)	1:A:28:VAL:HG13	1:A:39:GLN:HG3	1	0.44
(1,295)	1:A:28:VAL:HG22	1:A:39:GLN:HG3	6	0.44
(1,295)	1:A:28:VAL:HG21	1:A:39:GLN:HG3	6	0.44
(1,295)	1:A:28:VAL:HG23	1:A:39:GLN:HG3	6	0.44
(1,295)	1:A:28:VAL:HG12	1:A:39:GLN:HG3	6	0.44
(1,295)	1:A:28:VAL:HG11	1:A:39:GLN:HG3	6	0.44
(1,295)	1:A:28:VAL:HG13	1:A:39:GLN:HG3	6	0.44
(1,2948)	1:A:27:PRO:HD3	1:A:27:PRO:HB3	1	0.44
(1,2948)	1:A:27:PRO:HB3	1:A:29:PRO:HD3	1	0.44
(1,2948)	1:A:27:PRO:HD3	1:A:27:PRO:HB3	3	0.44
(1,2948)	1:A:27:PRO:HB3	1:A:29:PRO:HD3	3	0.44
(1,2948)	1:A:27:PRO:HD3	1:A:27:PRO:HB3	5	0.44
(1,2948)	1:A:27:PRO:HB3	1:A:29:PRO:HD3	5	0.44
(1,2930)	1:A:22:PRO:HD2	1:A:22:PRO:HB3	2	0.44
(1,2930)	1:A:22:PRO:HD2	1:A:62:GLU:HB3	2	0.44
(1,2929)	1:A:22:PRO:HB3	1:A:24:ILE:H	6	0.44
(1,2929)	1:A:62:GLU:HB3	1:A:47:THR:H	6	0.44
(1,2929)	1:A:135:GLY:H	1:A:97:VAL:HB	6	0.44
(1,2929)	1:A:22:PRO:HB3	1:A:24:ILE:H	7	0.44
(1,2929)	1:A:62:GLU:HB3	1:A:47:THR:H	7	0.44
(1,2929)	1:A:135:GLY:H	1:A:97:VAL:HB	7	0.44
(1,2929)	1:A:22:PRO:HB3	1:A:24:ILE:H	9	0.44
(1,2929)	1:A:62:GLU:HB3	1:A:47:THR:H	9	0.44
(1,2929)	1:A:135:GLY:H	1:A:97:VAL:HB	9	0.44
(1,2859)	1:A:16:ASN:HB2	1:A:17:LYS:HG3	7	0.44
(1,2859)	1:A:71:THR:HG21	1:A:16:ASN:HB2	7	0.44
(1,2859)	1:A:71:THR:HG22	1:A:16:ASN:HB2	7	0.44
(1,2859)	1:A:71:THR:HG23	1:A:16:ASN:HB2	7	0.44
(1,2784)	1:A:101:MET:H	1:A:130:LYS:HE2	7	0.44
(1,2784)	1:A:130:LYS:HE3	1:A:125:ASN:H	7	0.44
(1,2784)	1:A:101:MET:H	1:A:131:CYS:HB3	7	0.44
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:38:ALA:HB2	1	0.44
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:38:ALA:HB1	1	0.44
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:38:ALA:HB3	1	0.44
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:41:LYS:HG2	1	0.44

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:38:ALA:HB2	3	0.44
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:38:ALA:HB1	3	0.44
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:38:ALA:HB3	3	0.44
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:41:LYS:HG2	3	0.44
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:38:ALA:HB2	7	0.44
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:38:ALA:HB1	7	0.44
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:38:ALA:HB3	7	0.44
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:41:LYS:HG2	7	0.44
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:38:ALA:HB2	8	0.44
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:38:ALA:HB1	8	0.44
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:38:ALA:HB3	8	0.44
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:41:LYS:HG2	8	0.44
(1,2634)	1:A:111:ALA:HB2	1:A:78:ARG:HG3	7	0.44
(1,2634)	1:A:111:ALA:HB1	1:A:78:ARG:HG3	7	0.44
(1,2634)	1:A:111:ALA:HB3	1:A:78:ARG:HG3	7	0.44
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:111:ALA:HB2	7	0.44
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:111:ALA:HB1	7	0.44
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:111:ALA:HB3	7	0.44
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:111:ALA:HB2	7	0.44
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:111:ALA:HB1	7	0.44
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:111:ALA:HB3	7	0.44
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:111:ALA:HB2	7	0.44
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:111:ALA:HB1	7	0.44
(1,2634)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:111:ALA:HB3	7	0.44
(1,2124)	1:A:68:TYR:H	1:A:67:LEU:HB2	1	0.44
(1,195)	1:A:126:GLU:HA	1:A:126:GLU:HG3	1	0.44
(1,1947)	1:A:69:ASP:H	1:A:68:TYR:HB3	9	0.44
(1,1925)	1:A:43:VAL:H	1:A:41:LYS:HB3	2	0.44
(1,1925)	1:A:43:VAL:H	1:A:41:LYS:HB3	4	0.44
(1,1584)	1:A:74:LYS:HG2	1:A:14:SER:HB2	2	0.44
(1,1488)	1:A:41:LYS:H	1:A:41:LYS:HG2	4	0.44
(1,1401)	1:A:88:HIS:HB3	1:A:89:VAL:HG12	10	0.44
(1,1401)	1:A:88:HIS:HB3	1:A:89:VAL:HG11	10	0.44
(1,1401)	1:A:88:HIS:HB3	1:A:89:VAL:HG13	10	0.44
(1,137)	1:A:59:HIS:HD2	1:A:27:PRO:HB2	7	0.44
(1,1292)	1:A:32:SER:HB2	1:A:35:GLN:HB3	6	0.44
(1,1270)	1:A:98:MET:HG2	1:A:133:PHE:HD1	2	0.44
(1,1270)	1:A:98:MET:HG2	1:A:133:PHE:HD2	2	0.44
(1,1270)	1:A:98:MET:HG2	1:A:133:PHE:HD1	9	0.44
(1,1270)	1:A:98:MET:HG2	1:A:133:PHE:HD2	9	0.44
(1,123)	1:A:127:HIS:HD2	1:A:127:HIS:HB3	4	0.44
(1,123)	1:A:127:HIS:HD2	1:A:127:HIS:HB3	7	0.44

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1096)	1:A:154:LYS:HB2	1:A:154:LYS:HE2	2	0.44
(1,1096)	1:A:154:LYS:HB2	1:A:154:LYS:HE2	6	0.44
(1,1096)	1:A:154:LYS:HB2	1:A:154:LYS:HE2	8	0.44
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB3	1:A:23:THR:HG21	3	0.43
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB3	1:A:23:THR:HG22	3	0.43
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB3	1:A:23:THR:HG23	3	0.43
(1,2976)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:98:MET:HG2	3	0.43
(1,2976)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:98:MET:HG2	3	0.43
(1,2976)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:98:MET:HG2	3	0.43
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB2	1:A:23:THR:HG21	3	0.43
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB2	1:A:23:THR:HG22	3	0.43
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB2	1:A:23:THR:HG23	3	0.43
(1,2952)	1:A:60:VAL:HB	1:A:46:CYS:HA	7	0.43
(1,2952)	1:A:101:MET:HG3	1:A:103:THR:HA	7	0.43
(1,2948)	1:A:27:PRO:HD3	1:A:27:PRO:HB3	2	0.43
(1,2948)	1:A:27:PRO:HB3	1:A:29:PRO:HD3	2	0.43
(1,2948)	1:A:27:PRO:HD3	1:A:27:PRO:HB3	6	0.43
(1,2948)	1:A:27:PRO:HB3	1:A:29:PRO:HD3	6	0.43
(1,2948)	1:A:27:PRO:HD3	1:A:27:PRO:HB3	9	0.43
(1,2948)	1:A:27:PRO:HB3	1:A:29:PRO:HD3	9	0.43
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HB2	5	0.43
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HB3	5	0.43
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:28:VAL:HB	5	0.43
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:35:GLN:HB2	5	0.43
(1,2894)	1:A:80:CYS:HB2	1:A:9:LEU:HB3	5	0.43
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HB2	6	0.43
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HB3	6	0.43
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:28:VAL:HB	6	0.43
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:35:GLN:HB2	6	0.43
(1,2894)	1:A:80:CYS:HB2	1:A:9:LEU:HB3	6	0.43
(1,2723)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:63:GLY:HA2	5	0.43
(1,2723)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:63:GLY:HA3	5	0.43
(1,2723)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:63:GLY:HA2	5	0.43
(1,2723)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:63:GLY:HA3	5	0.43
(1,2723)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:63:GLY:HA2	5	0.43
(1,2723)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:63:GLY:HA3	5	0.43
(1,2723)	1:A:63:GLY:HA2	1:A:64:LYS:HD2	5	0.43
(1,2723)	1:A:63:GLY:HA3	1:A:64:LYS:HD2	5	0.43
(1,2723)	1:A:152:GLY:HA3	1:A:86:GLU:HB2	5	0.43
(1,2723)	1:A:152:GLY:HA3	1:A:153:PRO:HB2	5	0.43
(1,2723)	1:A:152:GLY:HA3	1:A:153:PRO:HG2	5	0.43
(1,2723)	1:A:152:GLY:HA3	1:A:153:PRO:HG3	5	0.43

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2723)	1:A:152:GLY:HA3	1:A:154:LYS:HB3	5	0.43
(1,2723)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:63:GLY:HA2	8	0.43
(1,2723)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:63:GLY:HA3	8	0.43
(1,2723)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:63:GLY:HA2	8	0.43
(1,2723)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:63:GLY:HA3	8	0.43
(1,2723)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:63:GLY:HA2	8	0.43
(1,2723)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:63:GLY:HA3	8	0.43
(1,2723)	1:A:63:GLY:HA2	1:A:64:LYS:HD2	8	0.43
(1,2723)	1:A:63:GLY:HA3	1:A:64:LYS:HD2	8	0.43
(1,2723)	1:A:152:GLY:HA3	1:A:86:GLU:HB2	8	0.43
(1,2723)	1:A:152:GLY:HA3	1:A:153:PRO:HB2	8	0.43
(1,2723)	1:A:152:GLY:HA3	1:A:153:PRO:HG2	8	0.43
(1,2723)	1:A:152:GLY:HA3	1:A:153:PRO:HG3	8	0.43
(1,2723)	1:A:152:GLY:HA3	1:A:154:LYS:HB3	8	0.43
(1,2696)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:64:LYS:HG2	7	0.43
(1,2696)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:65:PRO:HB3	7	0.43
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:38:ALA:HB2	6	0.43
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:38:ALA:HB1	6	0.43
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:38:ALA:HB3	6	0.43
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:41:LYS:HG2	6	0.43
(1,2106)	1:A:42:ALA:H	1:A:41:LYS:HB3	7	0.43
(1,195)	1:A:126:GLU:HA	1:A:126:GLU:HG3	4	0.43
(1,1925)	1:A:43:VAL:H	1:A:41:LYS:HB3	3	0.43
(1,1925)	1:A:43:VAL:H	1:A:41:LYS:HB3	10	0.43
(1,1488)	1:A:41:LYS:H	1:A:41:LYS:HG2	8	0.43
(1,1401)	1:A:88:HIS:HB3	1:A:89:VAL:HG12	7	0.43
(1,1401)	1:A:88:HIS:HB3	1:A:89:VAL:HG11	7	0.43
(1,1401)	1:A:88:HIS:HB3	1:A:89:VAL:HG13	7	0.43
(1,1270)	1:A:98:MET:HG2	1:A:133:PHE:HD1	6	0.43
(1,1270)	1:A:98:MET:HG2	1:A:133:PHE:HD2	6	0.43
(1,123)	1:A:127:HIS:HD2	1:A:127:HIS:HB3	1	0.43
(1,123)	1:A:127:HIS:HD2	1:A:127:HIS:HB3	3	0.43
(1,123)	1:A:127:HIS:HD2	1:A:127:HIS:HB3	10	0.43
(1,1185)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:61:LYS:HE3	4	0.43
(1,1096)	1:A:154:LYS:HB2	1:A:154:LYS:HE2	1	0.43
(1,1096)	1:A:154:LYS:HB2	1:A:154:LYS:HE2	4	0.43
(1,1096)	1:A:154:LYS:HB2	1:A:154:LYS:HE2	7	0.43
(1,748)	1:A:96:ASP:H	1:A:96:ASP:HB3	7	0.42
(1,722)	1:A:7:LEU:HB3	1:A:34:GLU:HG2	6	0.42
(1,548)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:64:LYS:HB2	10	0.42
(1,548)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:64:LYS:HB3	10	0.42
(1,363)	1:A:108:ASP:HA	1:A:77:SER:HB3	9	0.42

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3441)	1:A:40:CYS:H	1:A:49:PHE:HB2	5	0.42
(1,3441)	1:A:40:CYS:H	1:A:60:VAL:HB	5	0.42
(1,3264)	1:A:96:ASP:H	1:A:134:LYS:HB3	2	0.42
(1,3264)	1:A:96:ASP:H	1:A:95:PRO:HG2	2	0.42
(1,3264)	1:A:96:ASP:H	1:A:134:LYS:HB3	5	0.42
(1,3264)	1:A:96:ASP:H	1:A:95:PRO:HG2	5	0.42
(1,3264)	1:A:96:ASP:H	1:A:134:LYS:HB3	6	0.42
(1,3264)	1:A:96:ASP:H	1:A:95:PRO:HG2	6	0.42
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB3	1:A:23:THR:HG21	6	0.42
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB3	1:A:23:THR:HG22	6	0.42
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB3	1:A:23:THR:HG23	6	0.42
(1,2976)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:98:MET:HG2	6	0.42
(1,2976)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:98:MET:HG2	6	0.42
(1,2976)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:98:MET:HG2	6	0.42
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB2	1:A:23:THR:HG21	6	0.42
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB2	1:A:23:THR:HG22	6	0.42
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB2	1:A:23:THR:HG23	6	0.42
(1,2948)	1:A:27:PRO:HD3	1:A:27:PRO:HB3	7	0.42
(1,2948)	1:A:27:PRO:HB3	1:A:29:PRO:HD3	7	0.42
(1,2948)	1:A:27:PRO:HD3	1:A:27:PRO:HB3	8	0.42
(1,2948)	1:A:27:PRO:HB3	1:A:29:PRO:HD3	8	0.42
(1,2948)	1:A:27:PRO:HD3	1:A:27:PRO:HB3	10	0.42
(1,2948)	1:A:27:PRO:HB3	1:A:29:PRO:HD3	10	0.42
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HB2	3	0.42
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HB3	3	0.42
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:28:VAL:HB	3	0.42
(1,2894)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:35:GLN:HB2	3	0.42
(1,2894)	1:A:80:CYS:HB2	1:A:9:LEU:HB3	3	0.42
(1,2777)	1:A:17:LYS:HE3	1:A:18:GLY:H	9	0.42
(1,2777)	1:A:142:LYS:HE3	1:A:144:ARG:H	9	0.42
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:38:ALA:HB2	2	0.42
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:38:ALA:HB1	2	0.42
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:38:ALA:HB3	2	0.42
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:41:LYS:HG2	2	0.42
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:38:ALA:HB2	4	0.42
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:38:ALA:HB1	4	0.42
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:38:ALA:HB3	4	0.42
(1,2661)	1:A:37:ALA:HA	1:A:41:LYS:HG2	4	0.42
(1,195)	1:A:126:GLU:HA	1:A:126:GLU:HG3	8	0.42
(1,1925)	1:A:43:VAL:H	1:A:41:LYS:HB3	1	0.42
(1,1645)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:50:THR:HG21	3	0.42
(1,1645)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:50:THR:HG22	3	0.42

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1645)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:50:THR:HG23	3	0.42
(1,1584)	1:A:74:LYS:HG2	1:A:14:SER:HB2	4	0.42
(1,1401)	1:A:88:HIS:HB3	1:A:89:VAL:HG12	3	0.42
(1,1401)	1:A:88:HIS:HB3	1:A:89:VAL:HG11	3	0.42
(1,1401)	1:A:88:HIS:HB3	1:A:89:VAL:HG13	3	0.42
(1,137)	1:A:59:HIS:HD2	1:A:27:PRO:HB2	10	0.42
(1,1292)	1:A:32:SER:HB2	1:A:35:GLN:HB3	3	0.42
(1,908)	1:A:130:LYS:HB3	1:A:129:GLN:H	6	0.41
(1,3441)	1:A:40:CYS:H	1:A:49:PHE:HB2	10	0.41
(1,3441)	1:A:40:CYS:H	1:A:60:VAL:HB	10	0.41
(1,3323)	1:A:116:ASP:H	1:A:98:MET:HG2	5	0.41
(1,3323)	1:A:116:ASP:H	1:A:117:PRO:HG2	5	0.41
(1,3323)	1:A:116:ASP:H	1:A:117:PRO:HG3	5	0.41
(1,295)	1:A:28:VAL:HG22	1:A:39:GLN:HG3	3	0.41
(1,295)	1:A:28:VAL:HG21	1:A:39:GLN:HG3	3	0.41
(1,295)	1:A:28:VAL:HG23	1:A:39:GLN:HG3	3	0.41
(1,295)	1:A:28:VAL:HG12	1:A:39:GLN:HG3	3	0.41
(1,295)	1:A:28:VAL:HG11	1:A:39:GLN:HG3	3	0.41
(1,295)	1:A:28:VAL:HG13	1:A:39:GLN:HG3	3	0.41
(1,2948)	1:A:27:PRO:HD3	1:A:27:PRO:HB3	4	0.41
(1,2948)	1:A:27:PRO:HB3	1:A:29:PRO:HD3	4	0.41
(1,2929)	1:A:22:PRO:HB3	1:A:24:ILE:H	8	0.41
(1,2929)	1:A:62:GLU:HB3	1:A:47:THR:H	8	0.41
(1,2929)	1:A:135:GLY:H	1:A:97:VAL:HB	8	0.41
(1,2785)	1:A:130:LYS:HE2	1:A:125:ASN:HD21	10	0.41
(1,2785)	1:A:130:LYS:HE3	1:A:125:ASN:HD21	10	0.41
(1,2785)	1:A:131:CYS:HB3	1:A:112:ALA:H	10	0.41
(1,2723)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:63:GLY:HA2	3	0.41
(1,2723)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:63:GLY:HA3	3	0.41
(1,2723)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:63:GLY:HA2	3	0.41
(1,2723)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:63:GLY:HA3	3	0.41
(1,2723)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:63:GLY:HA2	3	0.41
(1,2723)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:63:GLY:HA3	3	0.41
(1,2723)	1:A:63:GLY:HA2	1:A:64:LYS:HD2	3	0.41
(1,2723)	1:A:63:GLY:HA3	1:A:64:LYS:HD2	3	0.41
(1,2723)	1:A:152:GLY:HA3	1:A:86:GLU:HB2	3	0.41
(1,2723)	1:A:152:GLY:HA3	1:A:153:PRO:HB2	3	0.41
(1,2723)	1:A:152:GLY:HA3	1:A:153:PRO:HG2	3	0.41
(1,2723)	1:A:152:GLY:HA3	1:A:153:PRO:HG3	3	0.41
(1,2723)	1:A:152:GLY:HA3	1:A:154:LYS:HB3	3	0.41
(1,2106)	1:A:42:ALA:H	1:A:41:LYS:HB3	5	0.41
(1,1270)	1:A:98:MET:HG2	1:A:133:PHE:HD1	5	0.41

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1270)	1:A:98:MET:HG2	1:A:133:PHE:HD2	5	0.41
(1,123)	1:A:127:HIS:HD2	1:A:127:HIS:HB3	2	0.41
(1,748)	1:A:96:ASP:H	1:A:96:ASP:HB3	5	0.4
(1,631)	1:A:123:THR:H	1:A:122:PHE:HB3	10	0.4
(1,416)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:62:GLU:HB3	2	0.4
(1,416)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:62:GLU:HB3	2	0.4
(1,416)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:62:GLU:HB3	2	0.4
(1,396)	1:A:107:ALA:HB2	1:A:77:SER:HB2	1	0.4
(1,396)	1:A:107:ALA:HB1	1:A:77:SER:HB2	1	0.4
(1,396)	1:A:107:ALA:HB3	1:A:77:SER:HB2	1	0.4
(1,3323)	1:A:116:ASP:H	1:A:98:MET:HG2	4	0.4
(1,3323)	1:A:116:ASP:H	1:A:117:PRO:HG2	4	0.4
(1,3323)	1:A:116:ASP:H	1:A:117:PRO:HG3	4	0.4
(1,2982)	1:A:64:LYS:HA	1:A:64:LYS:HD3	9	0.4
(1,2982)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:107:ALA:HA	9	0.4
(1,2982)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:108:ASP:HA	9	0.4
(1,295)	1:A:28:VAL:HG22	1:A:39:GLN:HG3	8	0.4
(1,295)	1:A:28:VAL:HG21	1:A:39:GLN:HG3	8	0.4
(1,295)	1:A:28:VAL:HG23	1:A:39:GLN:HG3	8	0.4
(1,295)	1:A:28:VAL:HG12	1:A:39:GLN:HG3	8	0.4
(1,295)	1:A:28:VAL:HG11	1:A:39:GLN:HG3	8	0.4
(1,295)	1:A:28:VAL:HG13	1:A:39:GLN:HG3	8	0.4
(1,2930)	1:A:22:PRO:HD2	1:A:22:PRO:HB3	1	0.4
(1,2930)	1:A:22:PRO:HD2	1:A:62:GLU:HB3	1	0.4
(1,2930)	1:A:22:PRO:HD2	1:A:22:PRO:HB3	4	0.4
(1,2930)	1:A:22:PRO:HD2	1:A:62:GLU:HB3	4	0.4
(1,2930)	1:A:22:PRO:HD2	1:A:22:PRO:HB3	7	0.4
(1,2930)	1:A:22:PRO:HD2	1:A:62:GLU:HB3	7	0.4
(1,2929)	1:A:22:PRO:HB3	1:A:24:ILE:H	10	0.4
(1,2929)	1:A:62:GLU:HB3	1:A:47:THR:H	10	0.4
(1,2929)	1:A:135:GLY:H	1:A:97:VAL:HB	10	0.4
(1,2859)	1:A:16:ASN:HB2	1:A:17:LYS:HG3	3	0.4
(1,2859)	1:A:71:THR:HG21	1:A:16:ASN:HB2	3	0.4
(1,2859)	1:A:71:THR:HG22	1:A:16:ASN:HB2	3	0.4
(1,2859)	1:A:71:THR:HG23	1:A:16:ASN:HB2	3	0.4
(1,2777)	1:A:17:LYS:HE3	1:A:18:GLY:H	4	0.4
(1,2777)	1:A:142:LYS:HE3	1:A:144:ARG:H	4	0.4
(1,2723)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:63:GLY:HA2	4	0.4
(1,2723)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:63:GLY:HA3	4	0.4
(1,2723)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:63:GLY:HA2	4	0.4
(1,2723)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:63:GLY:HA3	4	0.4
(1,2723)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:63:GLY:HA2	4	0.4

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2723)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:63:GLY:HA3	4	0.4
(1,2723)	1:A:63:GLY:HA2	1:A:64:LYS:HD2	4	0.4
(1,2723)	1:A:63:GLY:HA3	1:A:64:LYS:HD2	4	0.4
(1,2723)	1:A:152:GLY:HA3	1:A:86:GLU:HB2	4	0.4
(1,2723)	1:A:152:GLY:HA3	1:A:153:PRO:HB2	4	0.4
(1,2723)	1:A:152:GLY:HA3	1:A:153:PRO:HG2	4	0.4
(1,2723)	1:A:152:GLY:HA3	1:A:153:PRO:HG3	4	0.4
(1,2723)	1:A:152:GLY:HA3	1:A:154:LYS:HB3	4	0.4
(1,2723)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:63:GLY:HA2	9	0.4
(1,2723)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:63:GLY:HA3	9	0.4
(1,2723)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:63:GLY:HA2	9	0.4
(1,2723)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:63:GLY:HA3	9	0.4
(1,2723)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:63:GLY:HA2	9	0.4
(1,2723)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:63:GLY:HA3	9	0.4
(1,2723)	1:A:63:GLY:HA2	1:A:64:LYS:HD2	9	0.4
(1,2723)	1:A:63:GLY:HA3	1:A:64:LYS:HD2	9	0.4
(1,2723)	1:A:152:GLY:HA3	1:A:86:GLU:HB2	9	0.4
(1,2723)	1:A:152:GLY:HA3	1:A:153:PRO:HB2	9	0.4
(1,2723)	1:A:152:GLY:HA3	1:A:153:PRO:HG2	9	0.4
(1,2723)	1:A:152:GLY:HA3	1:A:153:PRO:HG3	9	0.4
(1,2723)	1:A:152:GLY:HA3	1:A:154:LYS:HB3	9	0.4
(1,2696)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:64:LYS:HG2	6	0.4
(1,2696)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:65:PRO:HB3	6	0.4
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG12	1:A:134:LYS:HB2	10	0.4
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG11	1:A:134:LYS:HB2	10	0.4
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG13	1:A:134:LYS:HB2	10	0.4
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG12	1:A:134:LYS:HG3	10	0.4
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG11	1:A:134:LYS:HG3	10	0.4
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG13	1:A:134:LYS:HG3	10	0.4
(1,1925)	1:A:43:VAL:H	1:A:41:LYS:HB3	7	0.4
(1,1645)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:50:THR:HG21	2	0.4
(1,1645)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:50:THR:HG22	2	0.4
(1,1645)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:50:THR:HG23	2	0.4
(1,1270)	1:A:98:MET:HG2	1:A:133:PHE:HD1	3	0.4
(1,1270)	1:A:98:MET:HG2	1:A:133:PHE:HD2	3	0.4
(1,1270)	1:A:98:MET:HG2	1:A:133:PHE:HD1	10	0.4
(1,1270)	1:A:98:MET:HG2	1:A:133:PHE:HD2	10	0.4
(1,1182)	1:A:59:HIS:H	1:A:59:HIS:HB3	1	0.4
(1,1182)	1:A:59:HIS:H	1:A:59:HIS:HB3	2	0.4
(1,1182)	1:A:59:HIS:H	1:A:59:HIS:HB3	3	0.4
(1,1182)	1:A:59:HIS:H	1:A:59:HIS:HB3	6	0.4
(1,1182)	1:A:59:HIS:H	1:A:59:HIS:HB3	8	0.4

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,914)	1:A:125:ASN:H	1:A:130:LYS:HB2	8	0.39
(1,908)	1:A:130:LYS:HB3	1:A:129:GLN:H	5	0.39
(1,60)	1:A:85:PHE:HD1	1:A:82:ARG:HB2	9	0.39
(1,60)	1:A:85:PHE:HD2	1:A:82:ARG:HB2	9	0.39
(1,3488)	1:A:155:GLN:HE21	1:A:115:ALA:HA	3	0.39
(1,3488)	1:A:155:GLN:HE21	1:A:117:PRO:HA	3	0.39
(1,3323)	1:A:116:ASP:H	1:A:98:MET:HG2	7	0.39
(1,3323)	1:A:116:ASP:H	1:A:117:PRO:HG2	7	0.39
(1,3323)	1:A:116:ASP:H	1:A:117:PRO:HG3	7	0.39
(1,2963)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:65:PRO:HB3	3	0.39
(1,2963)	1:A:41:LYS:HE2	1:A:78:ARG:HB3	3	0.39
(1,2963)	1:A:41:LYS:HE3	1:A:78:ARG:HB3	3	0.39
(1,295)	1:A:28:VAL:HG22	1:A:39:GLN:HG3	5	0.39
(1,295)	1:A:28:VAL:HG21	1:A:39:GLN:HG3	5	0.39
(1,295)	1:A:28:VAL:HG23	1:A:39:GLN:HG3	5	0.39
(1,295)	1:A:28:VAL:HG12	1:A:39:GLN:HG3	5	0.39
(1,295)	1:A:28:VAL:HG11	1:A:39:GLN:HG3	5	0.39
(1,295)	1:A:28:VAL:HG13	1:A:39:GLN:HG3	5	0.39
(1,2930)	1:A:22:PRO:HD2	1:A:22:PRO:HB3	8	0.39
(1,2930)	1:A:22:PRO:HD2	1:A:62:GLU:HB3	8	0.39
(1,2930)	1:A:22:PRO:HD2	1:A:22:PRO:HB3	9	0.39
(1,2930)	1:A:22:PRO:HD2	1:A:62:GLU:HB3	9	0.39
(1,2929)	1:A:22:PRO:HB3	1:A:24:ILE:H	3	0.39
(1,2929)	1:A:62:GLU:HB3	1:A:47:THR:H	3	0.39
(1,2929)	1:A:135:GLY:H	1:A:97:VAL:HB	3	0.39
(1,2929)	1:A:22:PRO:HB3	1:A:24:ILE:H	4	0.39
(1,2929)	1:A:62:GLU:HB3	1:A:47:THR:H	4	0.39
(1,2929)	1:A:135:GLY:H	1:A:97:VAL:HB	4	0.39
(1,2929)	1:A:22:PRO:HB3	1:A:24:ILE:H	5	0.39
(1,2929)	1:A:62:GLU:HB3	1:A:47:THR:H	5	0.39
(1,2929)	1:A:135:GLY:H	1:A:97:VAL:HB	5	0.39
(1,195)	1:A:126:GLU:HA	1:A:126:GLU:HG3	9	0.39
(1,1925)	1:A:43:VAL:H	1:A:41:LYS:HB3	5	0.39
(1,1401)	1:A:88:HIS:HB3	1:A:89:VAL:HG12	1	0.39
(1,1401)	1:A:88:HIS:HB3	1:A:89:VAL:HG11	1	0.39
(1,1401)	1:A:88:HIS:HB3	1:A:89:VAL:HG13	1	0.39
(1,1270)	1:A:98:MET:HG2	1:A:133:PHE:HD1	1	0.39
(1,1270)	1:A:98:MET:HG2	1:A:133:PHE:HD2	1	0.39
(1,1182)	1:A:59:HIS:H	1:A:59:HIS:HB3	4	0.39
(1,1182)	1:A:59:HIS:H	1:A:59:HIS:HB3	7	0.39
(1,1182)	1:A:59:HIS:H	1:A:59:HIS:HB3	9	0.39
(1,1182)	1:A:59:HIS:H	1:A:59:HIS:HB3	10	0.39

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,89)	1:A:51:TYR:HD1	1:A:51:TYR:HA	4	0.38
(1,824)	1:A:125:ASN:HD22	1:A:125:ASN:HB3	4	0.38
(1,748)	1:A:96:ASP:H	1:A:96:ASP:HB3	6	0.38
(1,728)	1:A:17:LYS:HE2	1:A:17:LYS:HD2	6	0.38
(1,728)	1:A:17:LYS:HE2	1:A:17:LYS:HD2	7	0.38
(1,728)	1:A:17:LYS:HE2	1:A:17:LYS:HD2	10	0.38
(1,722)	1:A:7:LEU:HB3	1:A:34:GLU:HG2	2	0.38
(1,722)	1:A:7:LEU:HB3	1:A:34:GLU:HG2	8	0.38
(1,416)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:62:GLU:HB3	1	0.38
(1,416)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:62:GLU:HB3	1	0.38
(1,416)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:62:GLU:HB3	1	0.38
(1,416)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:62:GLU:HB3	4	0.38
(1,416)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:62:GLU:HB3	4	0.38
(1,416)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:62:GLU:HB3	4	0.38
(1,3264)	1:A:96:ASP:H	1:A:134:LYS:HB3	1	0.38
(1,3264)	1:A:96:ASP:H	1:A:95:PRO:HG2	1	0.38
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB3	1:A:23:THR:HG21	4	0.38
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB3	1:A:23:THR:HG22	4	0.38
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB3	1:A:23:THR:HG23	4	0.38
(1,2976)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:98:MET:HG2	4	0.38
(1,2976)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:98:MET:HG2	4	0.38
(1,2976)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:98:MET:HG2	4	0.38
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB2	1:A:23:THR:HG21	4	0.38
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB2	1:A:23:THR:HG22	4	0.38
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB2	1:A:23:THR:HG23	4	0.38
(1,2883)	1:A:62:GLU:HG2	1:A:22:PRO:HD2	2	0.38
(1,2883)	1:A:45:GLY:HA2	1:A:62:GLU:HG2	2	0.38
(1,2883)	1:A:149:VAL:HB	1:A:151:SER:HB3	2	0.38
(1,2859)	1:A:16:ASN:HB2	1:A:17:LYS:HG3	5	0.38
(1,2859)	1:A:71:THR:HG21	1:A:16:ASN:HB2	5	0.38
(1,2859)	1:A:71:THR:HG22	1:A:16:ASN:HB2	5	0.38
(1,2859)	1:A:71:THR:HG23	1:A:16:ASN:HB2	5	0.38
(1,2859)	1:A:16:ASN:HB2	1:A:17:LYS:HG3	6	0.38
(1,2859)	1:A:71:THR:HG21	1:A:16:ASN:HB2	6	0.38
(1,2859)	1:A:71:THR:HG22	1:A:16:ASN:HB2	6	0.38
(1,2859)	1:A:71:THR:HG23	1:A:16:ASN:HB2	6	0.38
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:92:GLU:HG2	3	0.38
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:92:GLU:HG3	3	0.38
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:92:GLU:HG2	3	0.38
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:92:GLU:HG3	3	0.38
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:92:GLU:HG2	3	0.38
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:92:GLU:HG3	3	0.38

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:126:GLU:HG2	3	0.38
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:126:GLU:HG2	3	0.38
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:126:GLU:HG2	3	0.38
(1,195)	1:A:126:GLU:HA	1:A:126:GLU:HG3	5	0.38
(1,195)	1:A:126:GLU:HA	1:A:126:GLU:HG3	6	0.38
(1,1918)	1:A:105:GLN:H	1:A:105:GLN:HE22	5	0.38
(1,1401)	1:A:88:HIS:HB3	1:A:89:VAL:HG12	9	0.38
(1,1401)	1:A:88:HIS:HB3	1:A:89:VAL:HG11	9	0.38
(1,1401)	1:A:88:HIS:HB3	1:A:89:VAL:HG13	9	0.38
(1,1305)	1:A:88:HIS:H	1:A:87:GLN:HB2	1	0.38
(1,1211)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:59:HIS:HA	1	0.38
(1,1182)	1:A:59:HIS:H	1:A:59:HIS:HB3	5	0.38
(1,914)	1:A:125:ASN:H	1:A:130:LYS:HB2	2	0.37
(1,914)	1:A:125:ASN:H	1:A:130:LYS:HB2	5	0.37
(1,908)	1:A:130:LYS:HB3	1:A:129:GLN:H	7	0.37
(1,824)	1:A:125:ASN:HD22	1:A:125:ASN:HB3	9	0.37
(1,748)	1:A:96:ASP:H	1:A:96:ASP:HB3	2	0.37
(1,704)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:61:LYS:HE2	4	0.37
(1,704)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:61:LYS:HE2	4	0.37
(1,704)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:61:LYS:HE2	4	0.37
(1,581)	1:A:148:GLY:HA2	1:A:125:ASN:HA	1	0.37
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:6:LYS:HD2	6	0.37
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:56:LYS:HD2	6	0.37
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:56:LYS:HD3	6	0.37
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:57:MET:HB2	6	0.37
(1,3323)	1:A:116:ASP:H	1:A:98:MET:HG2	1	0.37
(1,3323)	1:A:116:ASP:H	1:A:117:PRO:HG2	1	0.37
(1,3323)	1:A:116:ASP:H	1:A:117:PRO:HG3	1	0.37
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB3	1:A:23:THR:HG21	7	0.37
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB3	1:A:23:THR:HG22	7	0.37
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB3	1:A:23:THR:HG23	7	0.37
(1,2976)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:98:MET:HG2	7	0.37
(1,2976)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:98:MET:HG2	7	0.37
(1,2976)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:98:MET:HG2	7	0.37
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB2	1:A:23:THR:HG21	7	0.37
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB2	1:A:23:THR:HG22	7	0.37
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB2	1:A:23:THR:HG23	7	0.37
(1,2963)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:65:PRO:HB3	7	0.37
(1,2963)	1:A:41:LYS:HE2	1:A:78:ARG:HB3	7	0.37
(1,2963)	1:A:41:LYS:HE3	1:A:78:ARG:HB3	7	0.37
(1,295)	1:A:28:VAL:HG22	1:A:39:GLN:HG3	7	0.37
(1,295)	1:A:28:VAL:HG21	1:A:39:GLN:HG3	7	0.37

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,295)	1:A:28:VAL:HG23	1:A:39:GLN:HG3	7	0.37
(1,295)	1:A:28:VAL:HG12	1:A:39:GLN:HG3	7	0.37
(1,295)	1:A:28:VAL:HG11	1:A:39:GLN:HG3	7	0.37
(1,295)	1:A:28:VAL:HG13	1:A:39:GLN:HG3	7	0.37
(1,295)	1:A:28:VAL:HG22	1:A:39:GLN:HG3	9	0.37
(1,295)	1:A:28:VAL:HG21	1:A:39:GLN:HG3	9	0.37
(1,295)	1:A:28:VAL:HG23	1:A:39:GLN:HG3	9	0.37
(1,295)	1:A:28:VAL:HG12	1:A:39:GLN:HG3	9	0.37
(1,295)	1:A:28:VAL:HG11	1:A:39:GLN:HG3	9	0.37
(1,295)	1:A:28:VAL:HG13	1:A:39:GLN:HG3	9	0.37
(1,295)	1:A:28:VAL:HG22	1:A:39:GLN:HG3	10	0.37
(1,295)	1:A:28:VAL:HG21	1:A:39:GLN:HG3	10	0.37
(1,295)	1:A:28:VAL:HG23	1:A:39:GLN:HG3	10	0.37
(1,295)	1:A:28:VAL:HG12	1:A:39:GLN:HG3	10	0.37
(1,295)	1:A:28:VAL:HG11	1:A:39:GLN:HG3	10	0.37
(1,295)	1:A:28:VAL:HG13	1:A:39:GLN:HG3	10	0.37
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:92:GLU:HG2	8	0.37
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:92:GLU:HG3	8	0.37
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:92:GLU:HG2	8	0.37
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:92:GLU:HG3	8	0.37
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:92:GLU:HG2	8	0.37
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:92:GLU:HG3	8	0.37
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:126:GLU:HG2	8	0.37
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:126:GLU:HG2	8	0.37
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:126:GLU:HG2	8	0.37
(1,2530)	1:A:13:HIS:HD2	1:A:67:LEU:HG	7	0.37
(1,2530)	1:A:88:HIS:HD2	1:A:87:GLN:HB2	7	0.37
(1,2530)	1:A:88:HIS:HD2	1:A:147:LEU:HB3	7	0.37
(1,2530)	1:A:88:HIS:HD2	1:A:147:LEU:HG	7	0.37
(1,195)	1:A:126:GLU:HA	1:A:126:GLU:HG3	10	0.37
(1,1401)	1:A:88:HIS:HB3	1:A:89:VAL:HG12	6	0.37
(1,1401)	1:A:88:HIS:HB3	1:A:89:VAL:HG11	6	0.37
(1,1401)	1:A:88:HIS:HB3	1:A:89:VAL:HG13	6	0.37
(1,1292)	1:A:32:SER:HB2	1:A:35:GLN:HB3	8	0.37
(1,1211)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:59:HIS:HA	6	0.37
(1,1211)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:59:HIS:HA	9	0.37
(1,1061)	1:A:35:GLN:HE22	1:A:35:GLN:HG3	7	0.37
(1,914)	1:A:125:ASN:H	1:A:130:LYS:HB2	3	0.36
(1,824)	1:A:125:ASN:HD22	1:A:125:ASN:HB3	1	0.36
(1,824)	1:A:125:ASN:HD22	1:A:125:ASN:HB3	2	0.36
(1,824)	1:A:125:ASN:HD22	1:A:125:ASN:HB3	5	0.36
(1,824)	1:A:125:ASN:HD22	1:A:125:ASN:HB3	7	0.36

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,824)	1:A:125:ASN:HD22	1:A:125:ASN:HB3	10	0.36
(1,748)	1:A:96:ASP:H	1:A:96:ASP:HB3	8	0.36
(1,698)	1:A:67:LEU:HB2	1:A:68:TYR:HA	4	0.36
(1,693)	1:A:67:LEU:H	1:A:67:LEU:HB3	4	0.36
(1,693)	1:A:67:LEU:H	1:A:67:LEU:HB3	8	0.36
(1,631)	1:A:123:THR:H	1:A:122:PHE:HB3	7	0.36
(1,555)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:70:LEU:HB3	9	0.36
(1,416)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:62:GLU:HB3	5	0.36
(1,416)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:62:GLU:HB3	5	0.36
(1,416)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:62:GLU:HB3	5	0.36
(1,396)	1:A:107:ALA:HB2	1:A:77:SER:HB2	9	0.36
(1,396)	1:A:107:ALA:HB1	1:A:77:SER:HB2	9	0.36
(1,396)	1:A:107:ALA:HB3	1:A:77:SER:HB2	9	0.36
(1,396)	1:A:107:ALA:HB2	1:A:77:SER:HB2	10	0.36
(1,396)	1:A:107:ALA:HB1	1:A:77:SER:HB2	10	0.36
(1,396)	1:A:107:ALA:HB3	1:A:77:SER:HB2	10	0.36
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB3	1:A:23:THR:HG21	8	0.36
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB3	1:A:23:THR:HG22	8	0.36
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB3	1:A:23:THR:HG23	8	0.36
(1,2976)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:98:MET:HG2	8	0.36
(1,2976)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:98:MET:HG2	8	0.36
(1,2976)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:98:MET:HG2	8	0.36
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB2	1:A:23:THR:HG21	8	0.36
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB2	1:A:23:THR:HG22	8	0.36
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB2	1:A:23:THR:HG23	8	0.36
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB3	1:A:23:THR:HG21	9	0.36
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB3	1:A:23:THR:HG22	9	0.36
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB3	1:A:23:THR:HG23	9	0.36
(1,2976)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:98:MET:HG2	9	0.36
(1,2976)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:98:MET:HG2	9	0.36
(1,2976)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:98:MET:HG2	9	0.36
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB2	1:A:23:THR:HG21	9	0.36
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB2	1:A:23:THR:HG22	9	0.36
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB2	1:A:23:THR:HG23	9	0.36
(1,2963)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:65:PRO:HB3	2	0.36
(1,2963)	1:A:41:LYS:HE2	1:A:78:ARG:HB3	2	0.36
(1,2963)	1:A:41:LYS:HE3	1:A:78:ARG:HB3	2	0.36
(1,295)	1:A:28:VAL:HG22	1:A:39:GLN:HG3	4	0.36
(1,295)	1:A:28:VAL:HG21	1:A:39:GLN:HG3	4	0.36
(1,295)	1:A:28:VAL:HG23	1:A:39:GLN:HG3	4	0.36
(1,295)	1:A:28:VAL:HG12	1:A:39:GLN:HG3	4	0.36
(1,295)	1:A:28:VAL:HG11	1:A:39:GLN:HG3	4	0.36

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,295)	1:A:28:VAL:HG13	1:A:39:GLN:HG3	4	0.36
(1,2930)	1:A:22:PRO:HD2	1:A:22:PRO:HB3	6	0.36
(1,2930)	1:A:22:PRO:HD2	1:A:62:GLU:HB3	6	0.36
(1,2929)	1:A:22:PRO:HB3	1:A:24:ILE:H	2	0.36
(1,2929)	1:A:62:GLU:HB3	1:A:47:THR:H	2	0.36
(1,2929)	1:A:135:GLY:H	1:A:97:VAL:HB	2	0.36
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:22:PRO:HB3	4	0.36
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:22:PRO:HB3	4	0.36
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:22:PRO:HB3	4	0.36
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:62:GLU:HG3	4	0.36
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:62:GLU:HG3	4	0.36
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:62:GLU:HG3	4	0.36
(1,2317)	1:A:125:ASN:HD22	1:A:128:ASP:HB2	6	0.36
(1,2211)	1:A:17:LYS:H	1:A:73:GLY:HA2	3	0.36
(1,1401)	1:A:88:HIS:HB3	1:A:89:VAL:HG12	4	0.36
(1,1401)	1:A:88:HIS:HB3	1:A:89:VAL:HG11	4	0.36
(1,1401)	1:A:88:HIS:HB3	1:A:89:VAL:HG13	4	0.36
(1,1270)	1:A:98:MET:HG2	1:A:133:PHE:HD1	8	0.36
(1,1270)	1:A:98:MET:HG2	1:A:133:PHE:HD2	8	0.36
(1,1211)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:59:HIS:HA	3	0.36
(1,1211)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:59:HIS:HA	8	0.36
(1,1061)	1:A:35:GLN:HE22	1:A:35:GLN:HG3	4	0.36
(1,1061)	1:A:35:GLN:HE22	1:A:35:GLN:HG3	9	0.36
(1,940)	1:A:16:ASN:HB2	1:A:71:THR:HA	3	0.35
(1,824)	1:A:125:ASN:HD22	1:A:125:ASN:HB3	3	0.35
(1,824)	1:A:125:ASN:HD22	1:A:125:ASN:HB3	6	0.35
(1,698)	1:A:67:LEU:HB2	1:A:68:TYR:HA	6	0.35
(1,693)	1:A:67:LEU:H	1:A:67:LEU:HB3	3	0.35
(1,693)	1:A:67:LEU:H	1:A:67:LEU:HB3	5	0.35
(1,693)	1:A:67:LEU:H	1:A:67:LEU:HB3	9	0.35
(1,693)	1:A:67:LEU:H	1:A:67:LEU:HB3	10	0.35
(1,60)	1:A:85:PHE:HD1	1:A:82:ARG:HB2	5	0.35
(1,60)	1:A:85:PHE:HD2	1:A:82:ARG:HB2	5	0.35
(1,581)	1:A:148:GLY:HA2	1:A:125:ASN:HA	3	0.35
(1,581)	1:A:148:GLY:HA2	1:A:125:ASN:HA	10	0.35
(1,416)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:62:GLU:HB3	9	0.35
(1,416)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:62:GLU:HB3	9	0.35
(1,416)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:62:GLU:HB3	9	0.35
(1,3538)	1:A:152:GLY:H	1:A:151:SER:HB2	2	0.35
(1,3538)	1:A:152:GLY:H	1:A:153:PRO:HD2	2	0.35
(1,3441)	1:A:40:CYS:H	1:A:49:PHE:HB2	6	0.35
(1,3441)	1:A:40:CYS:H	1:A:60:VAL:HB	6	0.35

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3441)	1:A:40:CYS:H	1:A:49:PHE:HB2	8	0.35
(1,3441)	1:A:40:CYS:H	1:A:60:VAL:HB	8	0.35
(1,3119)	1:A:6:LYS:HG2	1:A:53:ASP:H	1	0.35
(1,3119)	1:A:6:LYS:HG3	1:A:53:ASP:H	1	0.35
(1,2982)	1:A:64:LYS:HA	1:A:64:LYS:HD3	2	0.35
(1,2982)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:107:ALA:HA	2	0.35
(1,2982)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:108:ASP:HA	2	0.35
(1,2982)	1:A:64:LYS:HA	1:A:64:LYS:HD3	8	0.35
(1,2982)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:107:ALA:HA	8	0.35
(1,2982)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:108:ASP:HA	8	0.35
(1,2930)	1:A:22:PRO:HD2	1:A:22:PRO:HB3	3	0.35
(1,2930)	1:A:22:PRO:HD2	1:A:62:GLU:HB3	3	0.35
(1,2930)	1:A:22:PRO:HD2	1:A:22:PRO:HB3	5	0.35
(1,2930)	1:A:22:PRO:HD2	1:A:62:GLU:HB3	5	0.35
(1,2908)	1:A:142:LYS:HB2	1:A:139:SER:HB3	4	0.35
(1,2908)	1:A:154:LYS:HB3	1:A:160:GLY:HA3	4	0.35
(1,2908)	1:A:110:GLN:HG2	1:A:79:SER:HB2	4	0.35
(1,2822)	1:A:52:ASN:HB3	1:A:57:MET:HB2	3	0.35
(1,2822)	1:A:68:TYR:HB3	1:A:17:LYS:HD3	3	0.35
(1,2822)	1:A:108:ASP:HB3	1:A:67:LEU:HG	3	0.35
(1,2822)	1:A:107:ALA:HB2	1:A:108:ASP:HB3	3	0.35
(1,2822)	1:A:107:ALA:HB1	1:A:108:ASP:HB3	3	0.35
(1,2822)	1:A:107:ALA:HB3	1:A:108:ASP:HB3	3	0.35
(1,2753)	1:A:136:ARG:HA	1:A:136:ARG:HD2	7	0.35
(1,2753)	1:A:136:ARG:HA	1:A:136:ARG:HD3	7	0.35
(1,2704)	1:A:116:ASP:HB2	1:A:112:ALA:HA	2	0.35
(1,2704)	1:A:117:PRO:HD3	1:A:116:ASP:HB2	2	0.35
(1,2704)	1:A:116:ASP:HB2	1:A:112:ALA:HA	3	0.35
(1,2704)	1:A:117:PRO:HD3	1:A:116:ASP:HB2	3	0.35
(1,2556)	1:A:71:THR:HG21	1:A:16:ASN:HB2	6	0.35
(1,2556)	1:A:71:THR:HG22	1:A:16:ASN:HB2	6	0.35
(1,2556)	1:A:71:THR:HG23	1:A:16:ASN:HB2	6	0.35
(1,2556)	1:A:71:THR:HG21	1:A:54:ASP:HB2	6	0.35
(1,2556)	1:A:71:THR:HG21	1:A:54:ASP:HB3	6	0.35
(1,2556)	1:A:71:THR:HG22	1:A:54:ASP:HB2	6	0.35
(1,2556)	1:A:71:THR:HG22	1:A:54:ASP:HB3	6	0.35
(1,2556)	1:A:71:THR:HG23	1:A:54:ASP:HB2	6	0.35
(1,2556)	1:A:71:THR:HG23	1:A:54:ASP:HB3	6	0.35
(1,2252)	1:A:113:CYS:H	1:A:122:PHE:HB2	7	0.35
(1,1626)	1:A:130:LYS:HE2	1:A:132:THR:HG21	5	0.35
(1,1626)	1:A:130:LYS:HE2	1:A:132:THR:HG22	5	0.35
(1,1626)	1:A:130:LYS:HE2	1:A:132:THR:HG23	5	0.35

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD22	1:A:4:PRO:HD3	1	0.35
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD21	1:A:4:PRO:HD3	1	0.35
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD23	1:A:4:PRO:HD3	1	0.35
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD12	1:A:4:PRO:HD3	1	0.35
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD11	1:A:4:PRO:HD3	1	0.35
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD13	1:A:4:PRO:HD3	1	0.35
(1,1401)	1:A:88:HIS:HB3	1:A:89:VAL:HG12	5	0.35
(1,1401)	1:A:88:HIS:HB3	1:A:89:VAL:HG11	5	0.35
(1,1401)	1:A:88:HIS:HB3	1:A:89:VAL:HG13	5	0.35
(1,1308)	1:A:87:GLN:HG2	1:A:87:GLN:HB2	1	0.35
(1,1308)	1:A:87:GLN:HG2	1:A:87:GLN:HB2	3	0.35
(1,1308)	1:A:87:GLN:HG2	1:A:87:GLN:HB2	6	0.35
(1,1308)	1:A:87:GLN:HG2	1:A:87:GLN:HB2	7	0.35
(1,1308)	1:A:87:GLN:HG2	1:A:87:GLN:HB2	8	0.35
(1,1308)	1:A:87:GLN:HG2	1:A:87:GLN:HB2	10	0.35
(1,1305)	1:A:88:HIS:H	1:A:87:GLN:HB2	10	0.35
(1,1253)	1:A:67:LEU:HD22	1:A:65:PRO:HB2	1	0.35
(1,1253)	1:A:67:LEU:HD21	1:A:65:PRO:HB2	1	0.35
(1,1253)	1:A:67:LEU:HD23	1:A:65:PRO:HB2	1	0.35
(1,1133)	1:A:39:GLN:HE21	1:A:39:GLN:HG2	2	0.35
(1,1133)	1:A:39:GLN:HE21	1:A:39:GLN:HG2	9	0.35
(1,1061)	1:A:35:GLN:HE22	1:A:35:GLN:HG3	2	0.35
(1,940)	1:A:16:ASN:HB2	1:A:71:THR:HA	8	0.34
(1,748)	1:A:96:ASP:H	1:A:96:ASP:HB3	3	0.34
(1,748)	1:A:96:ASP:H	1:A:96:ASP:HB3	4	0.34
(1,693)	1:A:67:LEU:H	1:A:67:LEU:HB3	7	0.34
(1,60)	1:A:85:PHE:HD1	1:A:82:ARG:HB2	8	0.34
(1,60)	1:A:85:PHE:HD2	1:A:82:ARG:HB2	8	0.34
(1,555)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:70:LEU:HB3	1	0.34
(1,416)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:62:GLU:HB3	7	0.34
(1,416)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:62:GLU:HB3	7	0.34
(1,416)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:62:GLU:HB3	7	0.34
(1,3441)	1:A:40:CYS:H	1:A:49:PHE:HB2	3	0.34
(1,3441)	1:A:40:CYS:H	1:A:60:VAL:HB	3	0.34
(1,3004)	1:A:56:LYS:H	1:A:6:LYS:HD2	8	0.34
(1,3004)	1:A:56:LYS:H	1:A:56:LYS:HD2	8	0.34
(1,3004)	1:A:56:LYS:H	1:A:56:LYS:HD3	8	0.34
(1,2982)	1:A:64:LYS:HA	1:A:64:LYS:HD3	7	0.34
(1,2982)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:107:ALA:HA	7	0.34
(1,2982)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:108:ASP:HA	7	0.34
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:89:VAL:H	8	0.34
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:91:TYR:HD1	8	0.34

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:91:TYR:HD2	8	0.34
(1,2788)	1:A:142:LYS:HE2	1:A:142:LYS:H	8	0.34
(1,2713)	1:A:148:GLY:HA2	1:A:147:LEU:HB2	10	0.34
(1,2713)	1:A:160:GLY:HA3	1:A:114:ALA:HB2	10	0.34
(1,2713)	1:A:160:GLY:HA3	1:A:114:ALA:HB1	10	0.34
(1,2713)	1:A:160:GLY:HA3	1:A:114:ALA:HB3	10	0.34
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:92:GLU:HG2	2	0.34
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:92:GLU:HG3	2	0.34
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:92:GLU:HG2	2	0.34
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:92:GLU:HG3	2	0.34
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:92:GLU:HG2	2	0.34
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:92:GLU:HG3	2	0.34
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG22	1:A:126:GLU:HG2	2	0.34
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG21	1:A:126:GLU:HG2	2	0.34
(1,2604)	1:A:149:VAL:HG23	1:A:126:GLU:HG2	2	0.34
(1,2166)	1:A:10:SER:H	1:A:10:SER:HB3	5	0.34
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD22	1:A:4:PRO:HD3	3	0.34
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD21	1:A:4:PRO:HD3	3	0.34
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD23	1:A:4:PRO:HD3	3	0.34
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD12	1:A:4:PRO:HD3	3	0.34
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD11	1:A:4:PRO:HD3	3	0.34
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD13	1:A:4:PRO:HD3	3	0.34
(1,1584)	1:A:74:LYS:HG2	1:A:14:SER:HB2	5	0.34
(1,1308)	1:A:87:GLN:HG2	1:A:87:GLN:HB2	2	0.34
(1,1308)	1:A:87:GLN:HG2	1:A:87:GLN:HB2	4	0.34
(1,1308)	1:A:87:GLN:HG2	1:A:87:GLN:HB2	5	0.34
(1,1211)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:59:HIS:HA	2	0.34
(1,1211)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:59:HIS:HA	5	0.34
(1,932)	1:A:16:ASN:HD22	1:A:16:ASN:HB3	3	0.33
(1,749)	1:A:98:MET:H	1:A:96:ASP:HB3	9	0.33
(1,693)	1:A:67:LEU:H	1:A:67:LEU:HB3	1	0.33
(1,693)	1:A:67:LEU:H	1:A:67:LEU:HB3	2	0.33
(1,693)	1:A:67:LEU:H	1:A:67:LEU:HB3	6	0.33
(1,680)	1:A:20:ARG:H	1:A:20:ARG:HD3	5	0.33
(1,631)	1:A:123:THR:H	1:A:122:PHE:HB3	9	0.33
(1,396)	1:A:107:ALA:HB2	1:A:77:SER:HB2	6	0.33
(1,396)	1:A:107:ALA:HB1	1:A:77:SER:HB2	6	0.33
(1,396)	1:A:107:ALA:HB3	1:A:77:SER:HB2	6	0.33
(1,3538)	1:A:152:GLY:H	1:A:151:SER:HB2	10	0.33
(1,3538)	1:A:152:GLY:H	1:A:153:PRO:HD2	10	0.33
(1,3522)	1:A:105:GLN:HE21	1:A:105:GLN:HB3	4	0.33
(1,3522)	1:A:105:GLN:HE21	1:A:105:GLN:HG3	4	0.33

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3004)	1:A:56:LYS:H	1:A:6:LYS:HD2	4	0.33
(1,3004)	1:A:56:LYS:H	1:A:56:LYS:HD2	4	0.33
(1,3004)	1:A:56:LYS:H	1:A:56:LYS:HD3	4	0.33
(1,2974)	1:A:25:GLY:HA2	1:A:26:GLU:HB2	8	0.33
(1,2974)	1:A:25:GLY:HA3	1:A:26:GLU:HB2	8	0.33
(1,2974)	1:A:98:MET:HG2	1:A:113:CYS:HA	8	0.33
(1,2974)	1:A:98:MET:HG2	1:A:119:CYS:HB3	8	0.33
(1,2883)	1:A:62:GLU:HG2	1:A:22:PRO:HD2	10	0.33
(1,2883)	1:A:45:GLY:HA2	1:A:62:GLU:HG2	10	0.33
(1,2883)	1:A:149:VAL:HB	1:A:151:SER:HB3	10	0.33
(1,2704)	1:A:116:ASP:HB2	1:A:112:ALA:HA	5	0.33
(1,2704)	1:A:117:PRO:HD3	1:A:116:ASP:HB2	5	0.33
(1,2700)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:16:ASN:H	4	0.33
(1,2700)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:72:GLY:H	4	0.33
(1,2696)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:64:LYS:HG2	2	0.33
(1,2696)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:65:PRO:HB3	2	0.33
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:22:PRO:HB3	3	0.33
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:22:PRO:HB3	3	0.33
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:22:PRO:HB3	3	0.33
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:62:GLU:HG3	3	0.33
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:62:GLU:HG3	3	0.33
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:62:GLU:HG3	3	0.33
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:22:PRO:HB3	8	0.33
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:22:PRO:HB3	8	0.33
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:22:PRO:HB3	8	0.33
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:62:GLU:HG3	8	0.33
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:62:GLU:HG3	8	0.33
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:62:GLU:HG3	8	0.33
(1,2568)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:60:VAL:HB	8	0.33
(1,2568)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:60:VAL:HB	8	0.33
(1,2568)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:60:VAL:HB	8	0.33
(1,2568)	1:A:149:VAL:HG12	1:A:125:ASN:HB2	8	0.33
(1,2568)	1:A:149:VAL:HG11	1:A:125:ASN:HB2	8	0.33
(1,2568)	1:A:149:VAL:HG13	1:A:125:ASN:HB2	8	0.33
(1,2317)	1:A:125:ASN:HD22	1:A:128:ASP:HB2	5	0.33
(1,2252)	1:A:113:CYS:H	1:A:122:PHE:HB2	3	0.33
(1,2166)	1:A:10:SER:H	1:A:10:SER:HB3	3	0.33
(1,1925)	1:A:43:VAL:H	1:A:41:LYS:HB3	9	0.33
(1,1918)	1:A:105:GLN:H	1:A:105:GLN:HE22	10	0.33
(1,1645)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:50:THR:HG21	4	0.33
(1,1645)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:50:THR:HG22	4	0.33
(1,1645)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:50:THR:HG23	4	0.33

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD22	1:A:4:PRO:HD3	5	0.33
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD21	1:A:4:PRO:HD3	5	0.33
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD23	1:A:4:PRO:HD3	5	0.33
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD12	1:A:4:PRO:HD3	5	0.33
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD11	1:A:4:PRO:HD3	5	0.33
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD13	1:A:4:PRO:HD3	5	0.33
(1,1406)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:147:LEU:HD22	3	0.33
(1,1406)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:147:LEU:HD21	3	0.33
(1,1406)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:147:LEU:HD23	3	0.33
(1,1406)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:147:LEU:HD22	10	0.33
(1,1406)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:147:LEU:HD21	10	0.33
(1,1406)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:147:LEU:HD23	10	0.33
(1,1317)	1:A:127:HIS:HA	1:A:127:HIS:HB3	10	0.33
(1,1308)	1:A:87:GLN:HG2	1:A:87:GLN:HB2	9	0.33
(1,1292)	1:A:32:SER:HB2	1:A:35:GLN:HB3	7	0.33
(1,1211)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:59:HIS:HA	10	0.33
(1,940)	1:A:16:ASN:HB2	1:A:71:THR:HA	10	0.32
(1,914)	1:A:125:ASN:H	1:A:130:LYS:HB2	7	0.32
(1,913)	1:A:131:CYS:H	1:A:130:LYS:HB2	8	0.32
(1,749)	1:A:98:MET:H	1:A:96:ASP:HB3	10	0.32
(1,698)	1:A:67:LEU:HB2	1:A:68:TYR:HA	2	0.32
(1,698)	1:A:67:LEU:HB2	1:A:68:TYR:HA	9	0.32
(1,631)	1:A:123:THR:H	1:A:122:PHE:HB3	1	0.32
(1,631)	1:A:123:THR:H	1:A:122:PHE:HB3	4	0.32
(1,60)	1:A:85:PHE:HD1	1:A:82:ARG:HB2	1	0.32
(1,60)	1:A:85:PHE:HD2	1:A:82:ARG:HB2	1	0.32
(1,556)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:70:LEU:HD12	7	0.32
(1,556)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:70:LEU:HD11	7	0.32
(1,556)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:70:LEU:HD13	7	0.32
(1,555)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:70:LEU:HB3	8	0.32
(1,380)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:65:PRO:HG3	2	0.32
(1,380)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:65:PRO:HG3	2	0.32
(1,380)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:65:PRO:HG3	2	0.32
(1,3522)	1:A:105:GLN:HE21	1:A:105:GLN:HB3	5	0.32
(1,3522)	1:A:105:GLN:HE21	1:A:105:GLN:HG3	5	0.32
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:6:LYS:HD2	5	0.32
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:56:LYS:HD2	5	0.32
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:56:LYS:HD3	5	0.32
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:57:MET:HB2	5	0.32
(1,3441)	1:A:40:CYS:H	1:A:49:PHE:HB2	2	0.32
(1,3441)	1:A:40:CYS:H	1:A:60:VAL:HB	2	0.32
(1,3004)	1:A:56:LYS:H	1:A:6:LYS:HD2	5	0.32

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3004)	1:A:56:LYS:H	1:A:56:LYS:HD2	5	0.32
(1,3004)	1:A:56:LYS:H	1:A:56:LYS:HD3	5	0.32
(1,2962)	1:A:65:PRO:HB3	1:A:67:LEU:HG	5	0.32
(1,2962)	1:A:78:ARG:HB3	1:A:41:LYS:HG3	5	0.32
(1,2704)	1:A:116:ASP:HB2	1:A:112:ALA:HA	8	0.32
(1,2704)	1:A:117:PRO:HD3	1:A:116:ASP:HB2	8	0.32
(1,2700)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:16:ASN:H	3	0.32
(1,2700)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:72:GLY:H	3	0.32
(1,2317)	1:A:125:ASN:HD22	1:A:128:ASP:HB2	2	0.32
(1,1918)	1:A:105:GLN:H	1:A:105:GLN:HE22	4	0.32
(1,1317)	1:A:127:HIS:HA	1:A:127:HIS:HB3	1	0.32
(1,1317)	1:A:127:HIS:HA	1:A:127:HIS:HB3	2	0.32
(1,1317)	1:A:127:HIS:HA	1:A:127:HIS:HB3	3	0.32
(1,1317)	1:A:127:HIS:HA	1:A:127:HIS:HB3	4	0.32
(1,1317)	1:A:127:HIS:HA	1:A:127:HIS:HB3	6	0.32
(1,1317)	1:A:127:HIS:HA	1:A:127:HIS:HB3	7	0.32
(1,1317)	1:A:127:HIS:HA	1:A:127:HIS:HB3	8	0.32
(1,1305)	1:A:88:HIS:H	1:A:87:GLN:HB2	8	0.32
(1,1211)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:59:HIS:HA	7	0.32
(1,940)	1:A:16:ASN:HB2	1:A:71:THR:HA	6	0.31
(1,934)	1:A:72:GLY:H	1:A:16:ASN:HB2	1	0.31
(1,698)	1:A:67:LEU:HB2	1:A:68:TYR:HA	1	0.31
(1,631)	1:A:123:THR:H	1:A:122:PHE:HB3	3	0.31
(1,631)	1:A:123:THR:H	1:A:122:PHE:HB3	5	0.31
(1,631)	1:A:123:THR:H	1:A:122:PHE:HB3	6	0.31
(1,60)	1:A:85:PHE:HD1	1:A:82:ARG:HB2	2	0.31
(1,60)	1:A:85:PHE:HD2	1:A:82:ARG:HB2	2	0.31
(1,556)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:70:LEU:HD12	10	0.31
(1,556)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:70:LEU:HD11	10	0.31
(1,556)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:70:LEU:HD13	10	0.31
(1,380)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:65:PRO:HG3	3	0.31
(1,380)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:65:PRO:HG3	3	0.31
(1,380)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:65:PRO:HG3	3	0.31
(1,3441)	1:A:40:CYS:H	1:A:49:PHE:HB2	7	0.31
(1,3441)	1:A:40:CYS:H	1:A:60:VAL:HB	7	0.31
(1,3074)	1:A:78:ARG:HA	1:A:78:ARG:HG2	5	0.31
(1,3074)	1:A:78:ARG:HG2	1:A:79:SER:HB2	5	0.31
(1,3004)	1:A:56:LYS:H	1:A:6:LYS:HD2	1	0.31
(1,3004)	1:A:56:LYS:H	1:A:56:LYS:HD2	1	0.31
(1,3004)	1:A:56:LYS:H	1:A:56:LYS:HD3	1	0.31
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB3	1:A:23:THR:HG21	1	0.31
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB3	1:A:23:THR:HG22	1	0.31

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB3	1:A:23:THR:HG23	1	0.31
(1,2976)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:98:MET:HG2	1	0.31
(1,2976)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:98:MET:HG2	1	0.31
(1,2976)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:98:MET:HG2	1	0.31
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB2	1:A:23:THR:HG21	1	0.31
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB2	1:A:23:THR:HG22	1	0.31
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB2	1:A:23:THR:HG23	1	0.31
(1,2974)	1:A:25:GLY:HA2	1:A:26:GLU:HB2	9	0.31
(1,2974)	1:A:25:GLY:HA3	1:A:26:GLU:HB2	9	0.31
(1,2974)	1:A:98:MET:HG2	1:A:113:CYS:HA	9	0.31
(1,2974)	1:A:98:MET:HG2	1:A:119:CYS:HB3	9	0.31
(1,2836)	1:A:141:PHE:HB3	1:A:134:LYS:HG2	10	0.31
(1,2836)	1:A:141:PHE:HB3	1:A:140:ALA:HB2	10	0.31
(1,2836)	1:A:141:PHE:HB3	1:A:140:ALA:HB1	10	0.31
(1,2836)	1:A:141:PHE:HB3	1:A:140:ALA:HB3	10	0.31
(1,2704)	1:A:116:ASP:HB2	1:A:112:ALA:HA	10	0.31
(1,2704)	1:A:117:PRO:HD3	1:A:116:ASP:HB2	10	0.31
(1,2568)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:60:VAL:HB	3	0.31
(1,2568)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:60:VAL:HB	3	0.31
(1,2568)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:60:VAL:HB	3	0.31
(1,2568)	1:A:149:VAL:HG12	1:A:125:ASN:HB2	3	0.31
(1,2568)	1:A:149:VAL:HG11	1:A:125:ASN:HB2	3	0.31
(1,2568)	1:A:149:VAL:HG13	1:A:125:ASN:HB2	3	0.31
(1,2556)	1:A:71:THR:HG21	1:A:16:ASN:HB2	5	0.31
(1,2556)	1:A:71:THR:HG22	1:A:16:ASN:HB2	5	0.31
(1,2556)	1:A:71:THR:HG23	1:A:16:ASN:HB2	5	0.31
(1,2556)	1:A:71:THR:HG21	1:A:54:ASP:HB2	5	0.31
(1,2556)	1:A:71:THR:HG21	1:A:54:ASP:HB3	5	0.31
(1,2556)	1:A:71:THR:HG22	1:A:54:ASP:HB2	5	0.31
(1,2556)	1:A:71:THR:HG22	1:A:54:ASP:HB3	5	0.31
(1,2556)	1:A:71:THR:HG23	1:A:54:ASP:HB2	5	0.31
(1,2556)	1:A:71:THR:HG23	1:A:54:ASP:HB3	5	0.31
(1,2166)	1:A:10:SER:H	1:A:10:SER:HB3	4	0.31
(1,2166)	1:A:10:SER:H	1:A:10:SER:HB3	10	0.31
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD22	1:A:4:PRO:HD3	6	0.31
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD21	1:A:4:PRO:HD3	6	0.31
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD23	1:A:4:PRO:HD3	6	0.31
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD12	1:A:4:PRO:HD3	6	0.31
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD11	1:A:4:PRO:HD3	6	0.31
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD13	1:A:4:PRO:HD3	6	0.31
(1,14)	1:A:126:GLU:HG3	1:A:124:TYR:HD1	8	0.31
(1,14)	1:A:126:GLU:HG3	1:A:124:TYR:HD2	8	0.31

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1378)	1:A:117:PRO:HB2	1:A:117:PRO:HA	10	0.31
(1,1317)	1:A:127:HIS:HA	1:A:127:HIS:HB3	5	0.31
(1,1305)	1:A:88:HIS:H	1:A:87:GLN:HB2	9	0.31
(1,913)	1:A:131:CYS:H	1:A:130:LYS:HB2	3	0.3
(1,698)	1:A:67:LEU:HB2	1:A:68:TYR:HA	3	0.3
(1,60)	1:A:85:PHE:HD1	1:A:82:ARG:HB2	6	0.3
(1,60)	1:A:85:PHE:HD2	1:A:82:ARG:HB2	6	0.3
(1,556)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:70:LEU:HD12	6	0.3
(1,556)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:70:LEU:HD11	6	0.3
(1,556)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:70:LEU:HD13	6	0.3
(1,556)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:70:LEU:HD12	8	0.3
(1,556)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:70:LEU:HD11	8	0.3
(1,556)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:70:LEU:HD13	8	0.3
(1,3522)	1:A:105:GLN:HE21	1:A:105:GLN:HB3	10	0.3
(1,3522)	1:A:105:GLN:HE21	1:A:105:GLN:HG3	10	0.3
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:6:LYS:HD2	4	0.3
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:56:LYS:HD2	4	0.3
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:56:LYS:HD3	4	0.3
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:57:MET:HB2	4	0.3
(1,3119)	1:A:6:LYS:HG2	1:A:53:ASP:H	7	0.3
(1,3119)	1:A:6:LYS:HG3	1:A:53:ASP:H	7	0.3
(1,2963)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:65:PRO:HB3	10	0.3
(1,2963)	1:A:41:LYS:HE2	1:A:78:ARG:HB3	10	0.3
(1,2963)	1:A:41:LYS:HE3	1:A:78:ARG:HB3	10	0.3
(1,2784)	1:A:101:MET:H	1:A:130:LYS:HE2	3	0.3
(1,2784)	1:A:130:LYS:HE3	1:A:125:ASN:H	3	0.3
(1,2784)	1:A:101:MET:H	1:A:131:CYS:HB3	3	0.3
(1,2784)	1:A:101:MET:H	1:A:130:LYS:HE2	9	0.3
(1,2784)	1:A:130:LYS:HE3	1:A:125:ASN:H	9	0.3
(1,2784)	1:A:101:MET:H	1:A:131:CYS:HB3	9	0.3
(1,2748)	1:A:82:ARG:HD3	1:A:82:ARG:HA	4	0.3
(1,2748)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:THR:HB	4	0.3
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:22:PRO:HB3	6	0.3
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:22:PRO:HB3	6	0.3
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:22:PRO:HB3	6	0.3
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:62:GLU:HG3	6	0.3
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:62:GLU:HG3	6	0.3
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:62:GLU:HG3	6	0.3
(1,2166)	1:A:10:SER:H	1:A:10:SER:HB3	2	0.3
(1,2166)	1:A:10:SER:H	1:A:10:SER:HB3	6	0.3
(1,1767)	1:A:82:ARG:H	1:A:82:ARG:HB3	1	0.3
(1,1378)	1:A:117:PRO:HB2	1:A:117:PRO:HA	1	0.3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1378)	1:A:117:PRO:HB2	1:A:117:PRO:HA	3	0.3
(1,1378)	1:A:117:PRO:HB2	1:A:117:PRO:HA	6	0.3
(1,1378)	1:A:117:PRO:HB2	1:A:117:PRO:HA	7	0.3
(1,1325)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:36:CYS:H	10	0.3
(1,940)	1:A:16:ASN:HB2	1:A:71:THR:HA	1	0.29
(1,940)	1:A:16:ASN:HB2	1:A:71:THR:HA	7	0.29
(1,934)	1:A:72:GLY:H	1:A:16:ASN:HB2	5	0.29
(1,913)	1:A:131:CYS:H	1:A:130:LYS:HB2	2	0.29
(1,913)	1:A:131:CYS:H	1:A:130:LYS:HB2	5	0.29
(1,825)	1:A:125:ASN:HD22	1:A:125:ASN:HB2	3	0.29
(1,698)	1:A:67:LEU:HB2	1:A:68:TYR:HA	10	0.29
(1,631)	1:A:123:THR:H	1:A:122:PHE:HB3	8	0.29
(1,555)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:70:LEU:HB3	5	0.29
(1,549)	1:A:74:LYS:H	1:A:73:GLY:HA3	9	0.29
(1,517)	1:A:117:PRO:HD2	1:A:117:PRO:HA	5	0.29
(1,416)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:62:GLU:HB3	10	0.29
(1,416)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:62:GLU:HB3	10	0.29
(1,416)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:62:GLU:HB3	10	0.29
(1,2982)	1:A:64:LYS:HA	1:A:64:LYS:HD3	6	0.29
(1,2982)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:107:ALA:HA	6	0.29
(1,2982)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:108:ASP:HA	6	0.29
(1,2892)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HE2	6	0.29
(1,2892)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HE3	6	0.29
(1,2892)	1:A:80:CYS:HB2	1:A:11:CYS:HB2	6	0.29
(1,2822)	1:A:52:ASN:HB3	1:A:57:MET:HB2	1	0.29
(1,2822)	1:A:68:TYR:HB3	1:A:17:LYS:HD3	1	0.29
(1,2822)	1:A:108:ASP:HB3	1:A:67:LEU:HG	1	0.29
(1,2822)	1:A:107:ALA:HB2	1:A:108:ASP:HB3	1	0.29
(1,2822)	1:A:107:ALA:HB1	1:A:108:ASP:HB3	1	0.29
(1,2822)	1:A:107:ALA:HB3	1:A:108:ASP:HB3	1	0.29
(1,2747)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:59:HIS:HB3	10	0.29
(1,2747)	1:A:82:ARG:HD3	1:A:85:PHE:HB3	10	0.29
(1,2700)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:16:ASN:H	2	0.29
(1,2700)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:72:GLY:H	2	0.29
(1,2696)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:64:LYS:HG2	3	0.29
(1,2696)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:65:PRO:HB3	3	0.29
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:22:PRO:HB3	7	0.29
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:22:PRO:HB3	7	0.29
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:22:PRO:HB3	7	0.29
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:62:GLU:HG3	7	0.29
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:62:GLU:HG3	7	0.29
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:62:GLU:HG3	7	0.29

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2618)	1:A:6:LYS:HA	1:A:6:LYS:HD2	6	0.29
(1,2618)	1:A:6:LYS:HA	1:A:6:LYS:HD3	6	0.29
(1,2568)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:60:VAL:HB	5	0.29
(1,2568)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:60:VAL:HB	5	0.29
(1,2568)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:60:VAL:HB	5	0.29
(1,2568)	1:A:149:VAL:HG12	1:A:125:ASN:HB2	5	0.29
(1,2568)	1:A:149:VAL:HG11	1:A:125:ASN:HB2	5	0.29
(1,2568)	1:A:149:VAL:HG13	1:A:125:ASN:HB2	5	0.29
(1,2568)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:60:VAL:HB	6	0.29
(1,2568)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:60:VAL:HB	6	0.29
(1,2568)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:60:VAL:HB	6	0.29
(1,2568)	1:A:149:VAL:HG12	1:A:125:ASN:HB2	6	0.29
(1,2568)	1:A:149:VAL:HG11	1:A:125:ASN:HB2	6	0.29
(1,2568)	1:A:149:VAL:HG13	1:A:125:ASN:HB2	6	0.29
(1,2269)	1:A:141:PHE:H	1:A:142:LYS:HB3	7	0.29
(1,2106)	1:A:42:ALA:H	1:A:41:LYS:HB3	9	0.29
(1,1767)	1:A:82:ARG:H	1:A:82:ARG:HB3	3	0.29
(1,1767)	1:A:82:ARG:H	1:A:82:ARG:HB3	7	0.29
(1,1645)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:50:THR:HG21	7	0.29
(1,1645)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:50:THR:HG22	7	0.29
(1,1645)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:50:THR:HG23	7	0.29
(1,1645)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:50:THR:HG21	8	0.29
(1,1645)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:50:THR:HG22	8	0.29
(1,1645)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:50:THR:HG23	8	0.29
(1,1645)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:50:THR:HG21	10	0.29
(1,1645)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:50:THR:HG22	10	0.29
(1,1645)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:50:THR:HG23	10	0.29
(1,1421)	1:A:108:ASP:HA	1:A:65:PRO:HG2	4	0.29
(1,1406)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:147:LEU:HD22	7	0.29
(1,1406)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:147:LEU:HD21	7	0.29
(1,1406)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:147:LEU:HD23	7	0.29
(1,1394)	1:A:95:PRO:HG3	1:A:95:PRO:HB2	2	0.29
(1,1394)	1:A:95:PRO:HG3	1:A:95:PRO:HB2	3	0.29
(1,1394)	1:A:95:PRO:HG3	1:A:95:PRO:HB2	5	0.29
(1,1394)	1:A:95:PRO:HG3	1:A:95:PRO:HB2	6	0.29
(1,1394)	1:A:95:PRO:HG3	1:A:95:PRO:HB2	7	0.29
(1,1394)	1:A:95:PRO:HG3	1:A:95:PRO:HB2	8	0.29
(1,1394)	1:A:95:PRO:HG3	1:A:95:PRO:HB2	9	0.29
(1,1378)	1:A:117:PRO:HB2	1:A:117:PRO:HA	4	0.29
(1,1378)	1:A:117:PRO:HB2	1:A:117:PRO:HA	5	0.29
(1,1378)	1:A:117:PRO:HB2	1:A:117:PRO:HA	8	0.29
(1,1378)	1:A:117:PRO:HB2	1:A:117:PRO:HA	9	0.29

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1305)	1:A:88:HIS:H	1:A:87:GLN:HB2	4	0.29
(1,1292)	1:A:32:SER:HB2	1:A:35:GLN:HB3	5	0.29
(1,1211)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:59:HIS:HA	4	0.29
(1,935)	1:A:73:GLY:H	1:A:16:ASN:HB2	1	0.28
(1,913)	1:A:131:CYS:H	1:A:130:LYS:HB2	6	0.28
(1,913)	1:A:131:CYS:H	1:A:130:LYS:HB2	9	0.28
(1,913)	1:A:131:CYS:H	1:A:130:LYS:HB2	10	0.28
(1,899)	1:A:16:ASN:H	1:A:15:ASP:HB3	7	0.28
(1,758)	1:A:64:LYS:H	1:A:64:LYS:HE2	7	0.28
(1,758)	1:A:64:LYS:H	1:A:64:LYS:HE3	7	0.28
(1,722)	1:A:7:LEU:HB3	1:A:34:GLU:HG2	3	0.28
(1,722)	1:A:7:LEU:HB3	1:A:34:GLU:HG2	9	0.28
(1,702)	1:A:61:LYS:HE2	1:A:19:SER:H	8	0.28
(1,702)	1:A:61:LYS:HE2	1:A:19:SER:H	10	0.28
(1,698)	1:A:67:LEU:HB2	1:A:68:TYR:HA	5	0.28
(1,698)	1:A:67:LEU:HB2	1:A:68:TYR:HA	8	0.28
(1,556)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:70:LEU:HD12	1	0.28
(1,556)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:70:LEU:HD11	1	0.28
(1,556)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:70:LEU:HD13	1	0.28
(1,555)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:70:LEU:HB3	7	0.28
(1,517)	1:A:117:PRO:HD2	1:A:117:PRO:HA	2	0.28
(1,517)	1:A:117:PRO:HD2	1:A:117:PRO:HA	3	0.28
(1,517)	1:A:117:PRO:HD2	1:A:117:PRO:HA	9	0.28
(1,380)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:65:PRO:HG3	7	0.28
(1,380)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:65:PRO:HG3	7	0.28
(1,380)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:65:PRO:HG3	7	0.28
(1,380)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:65:PRO:HG3	10	0.28
(1,380)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:65:PRO:HG3	10	0.28
(1,380)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:65:PRO:HG3	10	0.28
(1,3119)	1:A:6:LYS:HG2	1:A:53:ASP:H	10	0.28
(1,3119)	1:A:6:LYS:HG3	1:A:53:ASP:H	10	0.28
(1,2982)	1:A:64:LYS:HA	1:A:64:LYS:HD3	1	0.28
(1,2982)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:107:ALA:HA	1	0.28
(1,2982)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:108:ASP:HA	1	0.28
(1,2753)	1:A:136:ARG:HA	1:A:136:ARG:HD2	1	0.28
(1,2753)	1:A:136:ARG:HA	1:A:136:ARG:HD3	1	0.28
(1,2713)	1:A:148:GLY:HA2	1:A:147:LEU:HB2	5	0.28
(1,2713)	1:A:160:GLY:HA3	1:A:114:ALA:HB2	5	0.28
(1,2713)	1:A:160:GLY:HA3	1:A:114:ALA:HB1	5	0.28
(1,2713)	1:A:160:GLY:HA3	1:A:114:ALA:HB3	5	0.28
(1,2704)	1:A:116:ASP:HB2	1:A:112:ALA:HA	6	0.28
(1,2704)	1:A:117:PRO:HD3	1:A:116:ASP:HB2	6	0.28

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2700)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:16:ASN:H	8	0.28
(1,2700)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:72:GLY:H	8	0.28
(1,2700)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:16:ASN:H	9	0.28
(1,2700)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:72:GLY:H	9	0.28
(1,2700)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:16:ASN:H	10	0.28
(1,2700)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:72:GLY:H	10	0.28
(1,2378)	1:A:87:GLN:HE21	1:A:87:GLN:HB3	9	0.28
(1,2166)	1:A:10:SER:H	1:A:10:SER:HB3	8	0.28
(1,167)	1:A:150:THR:HG21	1:A:85:PHE:HB2	1	0.28
(1,167)	1:A:150:THR:HG22	1:A:85:PHE:HB2	1	0.28
(1,167)	1:A:150:THR:HG23	1:A:85:PHE:HB2	1	0.28
(1,167)	1:A:150:THR:HG21	1:A:85:PHE:HB2	5	0.28
(1,167)	1:A:150:THR:HG22	1:A:85:PHE:HB2	5	0.28
(1,167)	1:A:150:THR:HG23	1:A:85:PHE:HB2	5	0.28
(1,167)	1:A:150:THR:HG21	1:A:85:PHE:HB2	8	0.28
(1,167)	1:A:150:THR:HG22	1:A:85:PHE:HB2	8	0.28
(1,167)	1:A:150:THR:HG23	1:A:85:PHE:HB2	8	0.28
(1,167)	1:A:150:THR:HG21	1:A:85:PHE:HB2	9	0.28
(1,167)	1:A:150:THR:HG22	1:A:85:PHE:HB2	9	0.28
(1,167)	1:A:150:THR:HG23	1:A:85:PHE:HB2	9	0.28
(1,165)	1:A:150:THR:HG21	1:A:123:THR:HA	2	0.28
(1,165)	1:A:150:THR:HG22	1:A:123:THR:HA	2	0.28
(1,165)	1:A:150:THR:HG23	1:A:123:THR:HA	2	0.28
(1,1645)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:50:THR:HG21	5	0.28
(1,1645)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:50:THR:HG22	5	0.28
(1,1645)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:50:THR:HG23	5	0.28
(1,1406)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:147:LEU:HD22	8	0.28
(1,1406)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:147:LEU:HD21	8	0.28
(1,1406)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:147:LEU:HD23	8	0.28
(1,1394)	1:A:95:PRO:HG3	1:A:95:PRO:HB2	1	0.28
(1,1394)	1:A:95:PRO:HG3	1:A:95:PRO:HB2	4	0.28
(1,1394)	1:A:95:PRO:HG3	1:A:95:PRO:HB2	10	0.28
(1,1378)	1:A:117:PRO:HB2	1:A:117:PRO:HA	2	0.28
(1,1305)	1:A:88:HIS:H	1:A:87:GLN:HB2	3	0.28
(1,127)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:88:HIS:HD2	1	0.28
(1,1239)	1:A:78:ARG:H	1:A:78:ARG:HB2	3	0.28
(1,974)	1:A:86:GLU:H	1:A:85:PHE:HB2	8	0.27
(1,825)	1:A:125:ASN:HD22	1:A:125:ASN:HB2	6	0.27
(1,722)	1:A:7:LEU:HB3	1:A:34:GLU:HG2	7	0.27
(1,702)	1:A:61:LYS:HE2	1:A:19:SER:H	1	0.27
(1,698)	1:A:67:LEU:HB2	1:A:68:TYR:HA	7	0.27
(1,688)	1:A:133:PHE:HB2	1:A:98:MET:HG3	5	0.27

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,517)	1:A:117:PRO:HD2	1:A:117:PRO:HA	1	0.27
(1,517)	1:A:117:PRO:HD2	1:A:117:PRO:HA	4	0.27
(1,517)	1:A:117:PRO:HD2	1:A:117:PRO:HA	6	0.27
(1,517)	1:A:117:PRO:HD2	1:A:117:PRO:HA	8	0.27
(1,517)	1:A:117:PRO:HD2	1:A:117:PRO:HA	10	0.27
(1,396)	1:A:107:ALA:HB2	1:A:77:SER:HB2	7	0.27
(1,396)	1:A:107:ALA:HB1	1:A:77:SER:HB2	7	0.27
(1,396)	1:A:107:ALA:HB3	1:A:77:SER:HB2	7	0.27
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:6:LYS:HD2	8	0.27
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:56:LYS:HD2	8	0.27
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:56:LYS:HD3	8	0.27
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:57:MET:HB2	8	0.27
(1,3488)	1:A:155:GLN:HE21	1:A:115:ALA:HA	5	0.27
(1,3488)	1:A:155:GLN:HE21	1:A:117:PRO:HA	5	0.27
(1,332)	1:A:125:ASN:HD21	1:A:149:VAL:HG22	6	0.27
(1,332)	1:A:125:ASN:HD21	1:A:149:VAL:HG21	6	0.27
(1,332)	1:A:125:ASN:HD21	1:A:149:VAL:HG23	6	0.27
(1,332)	1:A:125:ASN:HD21	1:A:149:VAL:HG22	7	0.27
(1,332)	1:A:125:ASN:HD21	1:A:149:VAL:HG21	7	0.27
(1,332)	1:A:125:ASN:HD21	1:A:149:VAL:HG23	7	0.27
(1,3119)	1:A:6:LYS:HG2	1:A:53:ASP:H	2	0.27
(1,3119)	1:A:6:LYS:HG3	1:A:53:ASP:H	2	0.27
(1,3074)	1:A:78:ARG:HA	1:A:78:ARG:HG2	6	0.27
(1,3074)	1:A:78:ARG:HG2	1:A:79:SER:HB2	6	0.27
(1,2982)	1:A:64:LYS:HA	1:A:64:LYS:HD3	3	0.27
(1,2982)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:107:ALA:HA	3	0.27
(1,2982)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:108:ASP:HA	3	0.27
(1,2963)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:65:PRO:HB3	1	0.27
(1,2963)	1:A:41:LYS:HE2	1:A:78:ARG:HB3	1	0.27
(1,2963)	1:A:41:LYS:HE3	1:A:78:ARG:HB3	1	0.27
(1,2784)	1:A:101:MET:H	1:A:130:LYS:HE2	2	0.27
(1,2784)	1:A:130:LYS:HE3	1:A:125:ASN:H	2	0.27
(1,2784)	1:A:101:MET:H	1:A:131:CYS:HB3	2	0.27
(1,2784)	1:A:101:MET:H	1:A:130:LYS:HE2	4	0.27
(1,2784)	1:A:130:LYS:HE3	1:A:125:ASN:H	4	0.27
(1,2784)	1:A:101:MET:H	1:A:131:CYS:HB3	4	0.27
(1,2753)	1:A:136:ARG:HA	1:A:136:ARG:HD2	6	0.27
(1,2753)	1:A:136:ARG:HA	1:A:136:ARG:HD3	6	0.27
(1,2704)	1:A:116:ASP:HB2	1:A:112:ALA:HA	9	0.27
(1,2704)	1:A:117:PRO:HD3	1:A:116:ASP:HB2	9	0.27
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:22:PRO:HB3	1	0.27
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:22:PRO:HB3	1	0.27

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:22:PRO:HB3	1	0.27
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:62:GLU:HG3	1	0.27
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:62:GLU:HG3	1	0.27
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:62:GLU:HG3	1	0.27
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:22:PRO:HB3	9	0.27
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:22:PRO:HB3	9	0.27
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:22:PRO:HB3	9	0.27
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:62:GLU:HG3	9	0.27
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:62:GLU:HG3	9	0.27
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:62:GLU:HG3	9	0.27
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:33:LEU:HA	4	0.27
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:33:LEU:HA	4	0.27
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:33:LEU:HA	4	0.27
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:36:CYS:HB2	4	0.27
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:36:CYS:HB2	4	0.27
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:36:CYS:HB2	4	0.27
(1,2636)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:122:PHE:HB2	4	0.27
(1,2636)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:122:PHE:HB2	4	0.27
(1,2636)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:122:PHE:HB2	4	0.27
(1,223)	1:A:104:SER:H	1:A:13:HIS:HA	3	0.27
(1,14)	1:A:126:GLU:HG3	1:A:124:TYR:HD1	3	0.27
(1,14)	1:A:126:GLU:HG3	1:A:124:TYR:HD2	3	0.27
(1,14)	1:A:126:GLU:HG3	1:A:124:TYR:HD1	10	0.27
(1,14)	1:A:126:GLU:HG3	1:A:124:TYR:HD2	10	0.27
(1,1325)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:36:CYS:H	4	0.27
(1,127)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:88:HIS:HD2	4	0.27
(1,127)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:88:HIS:HD2	7	0.27
(1,1239)	1:A:78:ARG:H	1:A:78:ARG:HB2	2	0.27
(1,1239)	1:A:78:ARG:H	1:A:78:ARG:HB2	4	0.27
(1,1239)	1:A:78:ARG:H	1:A:78:ARG:HB2	8	0.27
(1,974)	1:A:86:GLU:H	1:A:85:PHE:HB2	3	0.26
(1,974)	1:A:86:GLU:H	1:A:85:PHE:HB2	6	0.26
(1,974)	1:A:86:GLU:H	1:A:85:PHE:HB2	7	0.26
(1,974)	1:A:86:GLU:H	1:A:85:PHE:HB2	10	0.26
(1,940)	1:A:16:ASN:HB2	1:A:71:THR:HA	5	0.26
(1,934)	1:A:72:GLY:H	1:A:16:ASN:HB2	6	0.26
(1,934)	1:A:72:GLY:H	1:A:16:ASN:HB2	7	0.26
(1,825)	1:A:125:ASN:HD22	1:A:125:ASN:HB2	5	0.26
(1,825)	1:A:125:ASN:HD22	1:A:125:ASN:HB2	10	0.26
(1,821)	1:A:52:ASN:HB3	1:A:51:TYR:HA	10	0.26
(1,717)	1:A:78:ARG:HD2	1:A:156:PHE:HD1	8	0.26
(1,717)	1:A:78:ARG:HD2	1:A:156:PHE:HD2	8	0.26

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,702)	1:A:61:LYS:HE2	1:A:19:SER:H	2	0.26
(1,702)	1:A:61:LYS:HE2	1:A:19:SER:H	6	0.26
(1,702)	1:A:61:LYS:HE2	1:A:19:SER:H	7	0.26
(1,556)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:70:LEU:HD12	5	0.26
(1,556)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:70:LEU:HD11	5	0.26
(1,556)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:70:LEU:HD13	5	0.26
(1,555)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:70:LEU:HB3	6	0.26
(1,517)	1:A:117:PRO:HD2	1:A:117:PRO:HA	7	0.26
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:6:LYS:HD2	1	0.26
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:56:LYS:HD2	1	0.26
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:56:LYS:HD3	1	0.26
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:57:MET:HB2	1	0.26
(1,3347)	1:A:101:MET:H	1:A:130:LYS:HE2	3	0.26
(1,3347)	1:A:101:MET:H	1:A:131:CYS:HB3	3	0.26
(1,332)	1:A:125:ASN:HD21	1:A:149:VAL:HG22	2	0.26
(1,332)	1:A:125:ASN:HD21	1:A:149:VAL:HG21	2	0.26
(1,332)	1:A:125:ASN:HD21	1:A:149:VAL:HG23	2	0.26
(1,332)	1:A:125:ASN:HD21	1:A:149:VAL:HG22	4	0.26
(1,332)	1:A:125:ASN:HD21	1:A:149:VAL:HG21	4	0.26
(1,332)	1:A:125:ASN:HD21	1:A:149:VAL:HG23	4	0.26
(1,332)	1:A:125:ASN:HD21	1:A:149:VAL:HG22	5	0.26
(1,332)	1:A:125:ASN:HD21	1:A:149:VAL:HG21	5	0.26
(1,332)	1:A:125:ASN:HD21	1:A:149:VAL:HG23	5	0.26
(1,332)	1:A:125:ASN:HD21	1:A:149:VAL:HG22	10	0.26
(1,332)	1:A:125:ASN:HD21	1:A:149:VAL:HG21	10	0.26
(1,332)	1:A:125:ASN:HD21	1:A:149:VAL:HG23	10	0.26
(1,3264)	1:A:96:ASP:H	1:A:134:LYS:HB3	10	0.26
(1,3264)	1:A:96:ASP:H	1:A:95:PRO:HG2	10	0.26
(1,2982)	1:A:64:LYS:HA	1:A:64:LYS:HD3	5	0.26
(1,2982)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:107:ALA:HA	5	0.26
(1,2982)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:108:ASP:HA	5	0.26
(1,2974)	1:A:25:GLY:HA2	1:A:26:GLU:HB2	1	0.26
(1,2974)	1:A:25:GLY:HA3	1:A:26:GLU:HB2	1	0.26
(1,2974)	1:A:98:MET:HG2	1:A:113:CYS:HA	1	0.26
(1,2974)	1:A:98:MET:HG2	1:A:119:CYS:HB3	1	0.26
(1,2822)	1:A:52:ASN:HB3	1:A:57:MET:HB2	2	0.26
(1,2822)	1:A:68:TYR:HB3	1:A:17:LYS:HD3	2	0.26
(1,2822)	1:A:108:ASP:HB3	1:A:67:LEU:HG	2	0.26
(1,2822)	1:A:107:ALA:HB2	1:A:108:ASP:HB3	2	0.26
(1,2822)	1:A:107:ALA:HB1	1:A:108:ASP:HB3	2	0.26
(1,2822)	1:A:107:ALA:HB3	1:A:108:ASP:HB3	2	0.26
(1,2748)	1:A:82:ARG:HD3	1:A:82:ARG:HA	1	0.26

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2748)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:THR:HB	1	0.26
(1,2713)	1:A:148:GLY:HA2	1:A:147:LEU:HB2	8	0.26
(1,2713)	1:A:160:GLY:HA3	1:A:114:ALA:HB2	8	0.26
(1,2713)	1:A:160:GLY:HA3	1:A:114:ALA:HB1	8	0.26
(1,2713)	1:A:160:GLY:HA3	1:A:114:ALA:HB3	8	0.26
(1,2704)	1:A:116:ASP:HB2	1:A:112:ALA:HA	4	0.26
(1,2704)	1:A:117:PRO:HD3	1:A:116:ASP:HB2	4	0.26
(1,2704)	1:A:116:ASP:HB2	1:A:112:ALA:HA	7	0.26
(1,2704)	1:A:117:PRO:HD3	1:A:116:ASP:HB2	7	0.26
(1,2700)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:16:ASN:H	7	0.26
(1,2700)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:72:GLY:H	7	0.26
(1,2582)	1:A:97:VAL:HG12	1:A:135:GLY:HA2	4	0.26
(1,2582)	1:A:97:VAL:HG11	1:A:135:GLY:HA2	4	0.26
(1,2582)	1:A:97:VAL:HG13	1:A:135:GLY:HA2	4	0.26
(1,2582)	1:A:149:VAL:HG12	1:A:148:GLY:HA2	4	0.26
(1,2582)	1:A:149:VAL:HG11	1:A:148:GLY:HA2	4	0.26
(1,2582)	1:A:149:VAL:HG13	1:A:148:GLY:HA2	4	0.26
(1,238)	1:A:103:THR:HG21	1:A:101:MET:HG3	7	0.26
(1,238)	1:A:103:THR:HG22	1:A:101:MET:HG3	7	0.26
(1,238)	1:A:103:THR:HG23	1:A:101:MET:HG3	7	0.26
(1,2378)	1:A:87:GLN:HE21	1:A:87:GLN:HB3	8	0.26
(1,2317)	1:A:125:ASN:HD22	1:A:128:ASP:HB2	4	0.26
(1,2317)	1:A:125:ASN:HD22	1:A:128:ASP:HB2	7	0.26
(1,2180)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB3	6	0.26
(1,1767)	1:A:82:ARG:H	1:A:82:ARG:HB3	4	0.26
(1,1496)	1:A:70:LEU:HG	1:A:17:LYS:HA	4	0.26
(1,1406)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:147:LEU:HD22	2	0.26
(1,1406)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:147:LEU:HD21	2	0.26
(1,1406)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:147:LEU:HD23	2	0.26
(1,1326)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:34:GLU:HA	5	0.26
(1,1292)	1:A:32:SER:HB2	1:A:35:GLN:HB3	4	0.26
(1,1292)	1:A:32:SER:HB2	1:A:35:GLN:HB3	10	0.26
(1,1239)	1:A:78:ARG:H	1:A:78:ARG:HB2	5	0.26
(1,1239)	1:A:78:ARG:H	1:A:78:ARG:HB2	7	0.26
(1,1239)	1:A:78:ARG:H	1:A:78:ARG:HB2	9	0.26
(1,1181)	1:A:64:LYS:HE2	1:A:64:LYS:HB2	6	0.26
(1,1181)	1:A:64:LYS:HE2	1:A:64:LYS:HB3	6	0.26
(1,1181)	1:A:64:LYS:HE3	1:A:64:LYS:HB2	6	0.26
(1,1181)	1:A:64:LYS:HE3	1:A:64:LYS:HB3	6	0.26
(1,914)	1:A:125:ASN:H	1:A:130:LYS:HB2	6	0.25
(1,899)	1:A:16:ASN:H	1:A:15:ASP:HB3	2	0.25
(1,825)	1:A:125:ASN:HD22	1:A:125:ASN:HB2	1	0.25

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,825)	1:A:125:ASN:HD22	1:A:125:ASN:HB2	2	0.25
(1,825)	1:A:125:ASN:HD22	1:A:125:ASN:HB2	7	0.25
(1,825)	1:A:125:ASN:HD22	1:A:125:ASN:HB2	9	0.25
(1,821)	1:A:52:ASN:HB3	1:A:51:TYR:HA	3	0.25
(1,821)	1:A:52:ASN:HB3	1:A:51:TYR:HA	6	0.25
(1,821)	1:A:52:ASN:HB3	1:A:51:TYR:HA	8	0.25
(1,717)	1:A:78:ARG:HD2	1:A:156:PHE:HD1	5	0.25
(1,717)	1:A:78:ARG:HD2	1:A:156:PHE:HD2	5	0.25
(1,702)	1:A:61:LYS:HE2	1:A:19:SER:H	9	0.25
(1,658)	1:A:50:THR:H	1:A:49:PHE:HB3	2	0.25
(1,658)	1:A:50:THR:H	1:A:49:PHE:HB3	3	0.25
(1,658)	1:A:50:THR:H	1:A:49:PHE:HB3	6	0.25
(1,658)	1:A:50:THR:H	1:A:49:PHE:HB3	7	0.25
(1,555)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:70:LEU:HB3	10	0.25
(1,459)	1:A:7:LEU:HA	1:A:7:LEU:HB2	1	0.25
(1,459)	1:A:7:LEU:HA	1:A:7:LEU:HB2	2	0.25
(1,459)	1:A:7:LEU:HA	1:A:7:LEU:HB2	3	0.25
(1,459)	1:A:7:LEU:HA	1:A:7:LEU:HB2	4	0.25
(1,459)	1:A:7:LEU:HA	1:A:7:LEU:HB2	5	0.25
(1,459)	1:A:7:LEU:HA	1:A:7:LEU:HB2	6	0.25
(1,459)	1:A:7:LEU:HA	1:A:7:LEU:HB2	7	0.25
(1,459)	1:A:7:LEU:HA	1:A:7:LEU:HB2	8	0.25
(1,459)	1:A:7:LEU:HA	1:A:7:LEU:HB2	9	0.25
(1,459)	1:A:7:LEU:HA	1:A:7:LEU:HB2	10	0.25
(1,416)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:62:GLU:HB3	6	0.25
(1,416)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:62:GLU:HB3	6	0.25
(1,416)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:62:GLU:HB3	6	0.25
(1,3457)	1:A:125:ASN:HD22	1:A:126:GLU:H	8	0.25
(1,3457)	1:A:127:HIS:H	1:A:125:ASN:HD22	8	0.25
(1,332)	1:A:125:ASN:HD21	1:A:149:VAL:HG22	1	0.25
(1,332)	1:A:125:ASN:HD21	1:A:149:VAL:HG21	1	0.25
(1,332)	1:A:125:ASN:HD21	1:A:149:VAL:HG23	1	0.25
(1,3119)	1:A:6:LYS:HG2	1:A:53:ASP:H	8	0.25
(1,3119)	1:A:6:LYS:HG3	1:A:53:ASP:H	8	0.25
(1,3074)	1:A:78:ARG:HA	1:A:78:ARG:HG2	2	0.25
(1,3074)	1:A:78:ARG:HG2	1:A:79:SER:HB2	2	0.25
(1,3074)	1:A:78:ARG:HA	1:A:78:ARG:HG2	3	0.25
(1,3074)	1:A:78:ARG:HG2	1:A:79:SER:HB2	3	0.25
(1,3074)	1:A:78:ARG:HA	1:A:78:ARG:HG2	8	0.25
(1,3074)	1:A:78:ARG:HG2	1:A:79:SER:HB2	8	0.25
(1,3074)	1:A:78:ARG:HA	1:A:78:ARG:HG2	9	0.25
(1,3074)	1:A:78:ARG:HG2	1:A:79:SER:HB2	9	0.25

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2908)	1:A:142:LYS:HB2	1:A:139:SER:HB3	6	0.25
(1,2908)	1:A:154:LYS:HB3	1:A:160:GLY:HA3	6	0.25
(1,2908)	1:A:110:GLN:HG2	1:A:79:SER:HB2	6	0.25
(1,2777)	1:A:17:LYS:HE3	1:A:18:GLY:H	8	0.25
(1,2777)	1:A:142:LYS:HE3	1:A:144:ARG:H	8	0.25
(1,2702)	1:A:117:PRO:HD3	1:A:116:ASP:HB3	7	0.25
(1,2702)	1:A:116:ASP:HB3	1:A:118:SER:HB2	7	0.25
(1,2700)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:16:ASN:H	1	0.25
(1,2700)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:72:GLY:H	1	0.25
(1,2700)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:16:ASN:H	6	0.25
(1,2700)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:72:GLY:H	6	0.25
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:22:PRO:HB3	5	0.25
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:22:PRO:HB3	5	0.25
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:22:PRO:HB3	5	0.25
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:62:GLU:HG3	5	0.25
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:62:GLU:HG3	5	0.25
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:62:GLU:HG3	5	0.25
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:22:PRO:HB3	10	0.25
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:22:PRO:HB3	10	0.25
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:22:PRO:HB3	10	0.25
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:62:GLU:HG3	10	0.25
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:62:GLU:HG3	10	0.25
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:62:GLU:HG3	10	0.25
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:33:LEU:HA	5	0.25
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:33:LEU:HA	5	0.25
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:33:LEU:HA	5	0.25
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:36:CYS:HB2	5	0.25
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:36:CYS:HB2	5	0.25
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:36:CYS:HB2	5	0.25
(1,2636)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:122:PHE:HB2	5	0.25
(1,2636)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:122:PHE:HB2	5	0.25
(1,2636)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:122:PHE:HB2	5	0.25
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:33:LEU:HA	7	0.25
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:33:LEU:HA	7	0.25
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:33:LEU:HA	7	0.25
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:36:CYS:HB2	7	0.25
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:36:CYS:HB2	7	0.25
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:36:CYS:HB2	7	0.25
(1,2636)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:122:PHE:HB2	7	0.25
(1,2636)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:122:PHE:HB2	7	0.25
(1,2636)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:122:PHE:HB2	7	0.25
(1,2568)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:60:VAL:HB	7	0.25

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2568)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:60:VAL:HB	7	0.25
(1,2568)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:60:VAL:HB	7	0.25
(1,2568)	1:A:149:VAL:HG12	1:A:125:ASN:HB2	7	0.25
(1,2568)	1:A:149:VAL:HG11	1:A:125:ASN:HB2	7	0.25
(1,2568)	1:A:149:VAL:HG13	1:A:125:ASN:HB2	7	0.25
(1,2544)	1:A:154:LYS:HA	1:A:120:GLU:HA	3	0.25
(1,2544)	1:A:154:LYS:HA	1:A:121:ILE:HA	3	0.25
(1,2180)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB3	7	0.25
(1,1767)	1:A:82:ARG:H	1:A:82:ARG:HB3	5	0.25
(1,1645)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:50:THR:HG21	6	0.25
(1,1645)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:50:THR:HG22	6	0.25
(1,1645)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:50:THR:HG23	6	0.25
(1,1573)	1:A:65:PRO:HD2	1:A:64:LYS:HG3	2	0.25
(1,1496)	1:A:70:LEU:HG	1:A:17:LYS:HA	3	0.25
(1,1326)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:34:GLU:HA	3	0.25
(1,1326)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:34:GLU:HA	4	0.25
(1,1326)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:34:GLU:HA	6	0.25
(1,1326)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:34:GLU:HA	8	0.25
(1,1326)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:34:GLU:HA	9	0.25
(1,1326)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:34:GLU:HA	10	0.25
(1,127)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:88:HIS:HD2	9	0.25
(1,1239)	1:A:78:ARG:H	1:A:78:ARG:HB2	1	0.25
(1,1181)	1:A:64:LYS:HE2	1:A:64:LYS:HB2	1	0.25
(1,1181)	1:A:64:LYS:HE2	1:A:64:LYS:HB3	1	0.25
(1,1181)	1:A:64:LYS:HE3	1:A:64:LYS:HB2	1	0.25
(1,1181)	1:A:64:LYS:HE3	1:A:64:LYS:HB3	1	0.25
(1,937)	1:A:17:LYS:H	1:A:16:ASN:HB2	5	0.24
(1,937)	1:A:17:LYS:H	1:A:16:ASN:HB2	7	0.24
(1,937)	1:A:17:LYS:H	1:A:16:ASN:HB2	8	0.24
(1,934)	1:A:72:GLY:H	1:A:16:ASN:HB2	10	0.24
(1,913)	1:A:131:CYS:H	1:A:130:LYS:HB2	1	0.24
(1,913)	1:A:131:CYS:H	1:A:130:LYS:HB2	4	0.24
(1,899)	1:A:16:ASN:H	1:A:15:ASP:HB3	6	0.24
(1,825)	1:A:125:ASN:HD22	1:A:125:ASN:HB2	4	0.24
(1,821)	1:A:52:ASN:HB3	1:A:51:TYR:HA	7	0.24
(1,722)	1:A:7:LEU:HB3	1:A:34:GLU:HG2	10	0.24
(1,717)	1:A:78:ARG:HD2	1:A:156:PHE:HD1	7	0.24
(1,717)	1:A:78:ARG:HD2	1:A:156:PHE:HD2	7	0.24
(1,60)	1:A:85:PHE:HD1	1:A:82:ARG:HB2	7	0.24
(1,60)	1:A:85:PHE:HD2	1:A:82:ARG:HB2	7	0.24
(1,549)	1:A:74:LYS:H	1:A:73:GLY:HA3	4	0.24
(1,495)	1:A:94:ALA:HB2	1:A:134:LYS:HA	5	0.24

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,495)	1:A:94:ALA:HB1	1:A:134:LYS:HA	5	0.24
(1,495)	1:A:94:ALA:HB3	1:A:134:LYS:HA	5	0.24
(1,396)	1:A:107:ALA:HB2	1:A:77:SER:HB2	8	0.24
(1,396)	1:A:107:ALA:HB1	1:A:77:SER:HB2	8	0.24
(1,396)	1:A:107:ALA:HB3	1:A:77:SER:HB2	8	0.24
(1,380)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:65:PRO:HG3	8	0.24
(1,380)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:65:PRO:HG3	8	0.24
(1,380)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:65:PRO:HG3	8	0.24
(1,3457)	1:A:125:ASN:HD22	1:A:126:GLU:H	10	0.24
(1,3457)	1:A:127:HIS:H	1:A:125:ASN:HD22	10	0.24
(1,3347)	1:A:101:MET:H	1:A:130:LYS:HE2	9	0.24
(1,3347)	1:A:101:MET:H	1:A:131:CYS:HB3	9	0.24
(1,332)	1:A:125:ASN:HD21	1:A:149:VAL:HG22	9	0.24
(1,332)	1:A:125:ASN:HD21	1:A:149:VAL:HG21	9	0.24
(1,332)	1:A:125:ASN:HD21	1:A:149:VAL:HG23	9	0.24
(1,3283)	1:A:119:CYS:H	1:A:117:PRO:HD3	9	0.24
(1,3283)	1:A:119:CYS:H	1:A:118:SER:HB2	9	0.24
(1,3283)	1:A:119:CYS:H	1:A:118:SER:HB3	9	0.24
(1,3115)	1:A:6:LYS:HE3	1:A:6:LYS:HG3	1	0.24
(1,3115)	1:A:56:LYS:HE2	1:A:56:LYS:HG2	1	0.24
(1,3115)	1:A:56:LYS:HE3	1:A:56:LYS:HG2	1	0.24
(1,2974)	1:A:25:GLY:HA2	1:A:26:GLU:HB2	2	0.24
(1,2974)	1:A:25:GLY:HA3	1:A:26:GLU:HB2	2	0.24
(1,2974)	1:A:98:MET:HG2	1:A:113:CYS:HA	2	0.24
(1,2974)	1:A:98:MET:HG2	1:A:119:CYS:HB3	2	0.24
(1,2974)	1:A:25:GLY:HA2	1:A:26:GLU:HB2	10	0.24
(1,2974)	1:A:25:GLY:HA3	1:A:26:GLU:HB2	10	0.24
(1,2974)	1:A:98:MET:HG2	1:A:113:CYS:HA	10	0.24
(1,2974)	1:A:98:MET:HG2	1:A:119:CYS:HB3	10	0.24
(1,2971)	1:A:159:GLU:HB2	1:A:155:GLN:HA	10	0.24
(1,2971)	1:A:159:GLU:HB2	1:A:156:PHE:HA	10	0.24
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:12:VAL:HG12	7	0.24
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:12:VAL:HG11	7	0.24
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:12:VAL:HG13	7	0.24
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:76:ALA:HB2	7	0.24
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:76:ALA:HB1	7	0.24
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:76:ALA:HB3	7	0.24
(1,2822)	1:A:52:ASN:HB3	1:A:57:MET:HB2	9	0.24
(1,2822)	1:A:68:TYR:HB3	1:A:17:LYS:HD3	9	0.24
(1,2822)	1:A:108:ASP:HB3	1:A:67:LEU:HG	9	0.24
(1,2822)	1:A:107:ALA:HB2	1:A:108:ASP:HB3	9	0.24
(1,2822)	1:A:107:ALA:HB1	1:A:108:ASP:HB3	9	0.24

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2822)	1:A:107:ALA:HB3	1:A:108:ASP:HB3	9	0.24
(1,2822)	1:A:52:ASN:HB3	1:A:57:MET:HB2	10	0.24
(1,2822)	1:A:68:TYR:HB3	1:A:17:LYS:HD3	10	0.24
(1,2822)	1:A:108:ASP:HB3	1:A:67:LEU:HG	10	0.24
(1,2822)	1:A:107:ALA:HB2	1:A:108:ASP:HB3	10	0.24
(1,2822)	1:A:107:ALA:HB1	1:A:108:ASP:HB3	10	0.24
(1,2822)	1:A:107:ALA:HB3	1:A:108:ASP:HB3	10	0.24
(1,2783)	1:A:131:CYS:H	1:A:130:LYS:HE2	6	0.24
(1,2783)	1:A:131:CYS:H	1:A:131:CYS:HB3	6	0.24
(1,2704)	1:A:116:ASP:HB2	1:A:112:ALA:HA	1	0.24
(1,2704)	1:A:117:PRO:HD3	1:A:116:ASP:HB2	1	0.24
(1,2702)	1:A:117:PRO:HD3	1:A:116:ASP:HB3	6	0.24
(1,2702)	1:A:116:ASP:HB3	1:A:118:SER:HB2	6	0.24
(1,2702)	1:A:117:PRO:HD3	1:A:116:ASP:HB3	9	0.24
(1,2702)	1:A:116:ASP:HB3	1:A:118:SER:HB2	9	0.24
(1,2652)	1:A:78:ARG:HA	1:A:37:ALA:HB2	3	0.24
(1,2652)	1:A:78:ARG:HA	1:A:37:ALA:HB1	3	0.24
(1,2652)	1:A:78:ARG:HA	1:A:37:ALA:HB3	3	0.24
(1,2652)	1:A:94:ALA:HB2	1:A:137:GLY:HA2	3	0.24
(1,2652)	1:A:94:ALA:HB1	1:A:137:GLY:HA2	3	0.24
(1,2652)	1:A:94:ALA:HB3	1:A:137:GLY:HA2	3	0.24
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:33:LEU:HA	2	0.24
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:33:LEU:HA	2	0.24
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:33:LEU:HA	2	0.24
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:36:CYS:HB2	2	0.24
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:36:CYS:HB2	2	0.24
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:36:CYS:HB2	2	0.24
(1,2636)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:122:PHE:HB2	2	0.24
(1,2636)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:122:PHE:HB2	2	0.24
(1,2636)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:122:PHE:HB2	2	0.24
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:33:LEU:HA	3	0.24
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:33:LEU:HA	3	0.24
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:33:LEU:HA	3	0.24
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:36:CYS:HB2	3	0.24
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:36:CYS:HB2	3	0.24
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:36:CYS:HB2	3	0.24
(1,2636)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:122:PHE:HB2	3	0.24
(1,2636)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:122:PHE:HB2	3	0.24
(1,2636)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:122:PHE:HB2	3	0.24
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:33:LEU:HA	9	0.24
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:33:LEU:HA	9	0.24
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:33:LEU:HA	9	0.24

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:36:CYS:HB2	9	0.24
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:36:CYS:HB2	9	0.24
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:36:CYS:HB2	9	0.24
(1,2636)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:122:PHE:HB2	9	0.24
(1,2636)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:122:PHE:HB2	9	0.24
(1,2636)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:122:PHE:HB2	9	0.24
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:33:LEU:HA	10	0.24
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:33:LEU:HA	10	0.24
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:33:LEU:HA	10	0.24
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:36:CYS:HB2	10	0.24
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:36:CYS:HB2	10	0.24
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:36:CYS:HB2	10	0.24
(1,2636)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:122:PHE:HB2	10	0.24
(1,2636)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:122:PHE:HB2	10	0.24
(1,2636)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:122:PHE:HB2	10	0.24
(1,2556)	1:A:71:THR:HG21	1:A:16:ASN:HB2	3	0.24
(1,2556)	1:A:71:THR:HG22	1:A:16:ASN:HB2	3	0.24
(1,2556)	1:A:71:THR:HG23	1:A:16:ASN:HB2	3	0.24
(1,2556)	1:A:71:THR:HG21	1:A:54:ASP:HB2	3	0.24
(1,2556)	1:A:71:THR:HG21	1:A:54:ASP:HB3	3	0.24
(1,2556)	1:A:71:THR:HG22	1:A:54:ASP:HB2	3	0.24
(1,2556)	1:A:71:THR:HG22	1:A:54:ASP:HB3	3	0.24
(1,2556)	1:A:71:THR:HG23	1:A:54:ASP:HB2	3	0.24
(1,2556)	1:A:71:THR:HG23	1:A:54:ASP:HB3	3	0.24
(1,2532)	1:A:59:HIS:HD2	1:A:27:PRO:HG2	9	0.24
(1,2532)	1:A:59:HIS:HD2	1:A:57:MET:HB3	9	0.24
(1,1767)	1:A:82:ARG:H	1:A:82:ARG:HB3	2	0.24
(1,173)	1:A:35:GLN:HE21	1:A:31:VAL:HG12	2	0.24
(1,173)	1:A:35:GLN:HE21	1:A:31:VAL:HG11	2	0.24
(1,173)	1:A:35:GLN:HE21	1:A:31:VAL:HG13	2	0.24
(1,167)	1:A:150:THR:HG21	1:A:85:PHE:HB2	10	0.24
(1,167)	1:A:150:THR:HG22	1:A:85:PHE:HB2	10	0.24
(1,167)	1:A:150:THR:HG23	1:A:85:PHE:HB2	10	0.24
(1,165)	1:A:150:THR:HG21	1:A:123:THR:HA	10	0.24
(1,165)	1:A:150:THR:HG22	1:A:123:THR:HA	10	0.24
(1,165)	1:A:150:THR:HG23	1:A:123:THR:HA	10	0.24
(1,1496)	1:A:70:LEU:HG	1:A:17:LYS:HA	8	0.24
(1,14)	1:A:126:GLU:HG3	1:A:124:TYR:HD1	1	0.24
(1,14)	1:A:126:GLU:HG3	1:A:124:TYR:HD2	1	0.24
(1,137)	1:A:59:HIS:HD2	1:A:27:PRO:HB2	4	0.24
(1,1326)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:34:GLU:HA	1	0.24
(1,1326)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:34:GLU:HA	2	0.24

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1326)	1:A:34:GLU:HB2	1:A:34:GLU:HA	7	0.24
(1,1325)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:36:CYS:H	5	0.24
(1,1239)	1:A:78:ARG:H	1:A:78:ARG:HB2	6	0.24
(1,1239)	1:A:78:ARG:H	1:A:78:ARG:HB2	10	0.24
(1,974)	1:A:86:GLU:H	1:A:85:PHE:HB2	1	0.23
(1,937)	1:A:17:LYS:H	1:A:16:ASN:HB2	6	0.23
(1,937)	1:A:17:LYS:H	1:A:16:ASN:HB2	10	0.23
(1,935)	1:A:73:GLY:H	1:A:16:ASN:HB2	8	0.23
(1,934)	1:A:72:GLY:H	1:A:16:ASN:HB2	8	0.23
(1,913)	1:A:131:CYS:H	1:A:130:LYS:HB2	7	0.23
(1,821)	1:A:52:ASN:HB3	1:A:51:TYR:HA	1	0.23
(1,717)	1:A:78:ARG:HD2	1:A:156:PHE:HD1	3	0.23
(1,717)	1:A:78:ARG:HD2	1:A:156:PHE:HD2	3	0.23
(1,702)	1:A:61:LYS:HE2	1:A:19:SER:H	5	0.23
(1,680)	1:A:20:ARG:H	1:A:20:ARG:HD3	3	0.23
(1,549)	1:A:74:LYS:H	1:A:73:GLY:HA3	3	0.23
(1,495)	1:A:94:ALA:HB2	1:A:134:LYS:HA	1	0.23
(1,495)	1:A:94:ALA:HB1	1:A:134:LYS:HA	1	0.23
(1,495)	1:A:94:ALA:HB3	1:A:134:LYS:HA	1	0.23
(1,416)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:62:GLU:HB3	3	0.23
(1,416)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:62:GLU:HB3	3	0.23
(1,416)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:62:GLU:HB3	3	0.23
(1,416)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:62:GLU:HB3	8	0.23
(1,416)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:62:GLU:HB3	8	0.23
(1,416)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:62:GLU:HB3	8	0.23
(1,332)	1:A:125:ASN:HD21	1:A:149:VAL:HG22	3	0.23
(1,332)	1:A:125:ASN:HD21	1:A:149:VAL:HG21	3	0.23
(1,332)	1:A:125:ASN:HD21	1:A:149:VAL:HG23	3	0.23
(1,3119)	1:A:6:LYS:HG2	1:A:53:ASP:H	3	0.23
(1,3119)	1:A:6:LYS:HG3	1:A:53:ASP:H	3	0.23
(1,3119)	1:A:6:LYS:HG2	1:A:53:ASP:H	5	0.23
(1,3119)	1:A:6:LYS:HG3	1:A:53:ASP:H	5	0.23
(1,3115)	1:A:6:LYS:HE3	1:A:6:LYS:HG3	2	0.23
(1,3115)	1:A:56:LYS:HE2	1:A:56:LYS:HG2	2	0.23
(1,3115)	1:A:56:LYS:HE3	1:A:56:LYS:HG2	2	0.23
(1,3115)	1:A:6:LYS:HE3	1:A:6:LYS:HG3	4	0.23
(1,3115)	1:A:56:LYS:HE2	1:A:56:LYS:HG2	4	0.23
(1,3115)	1:A:56:LYS:HE3	1:A:56:LYS:HG2	4	0.23
(1,3115)	1:A:6:LYS:HE3	1:A:6:LYS:HG3	5	0.23
(1,3115)	1:A:56:LYS:HE2	1:A:56:LYS:HG2	5	0.23
(1,3115)	1:A:56:LYS:HE3	1:A:56:LYS:HG2	5	0.23
(1,3115)	1:A:6:LYS:HE3	1:A:6:LYS:HG3	8	0.23

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3115)	1:A:56:LYS:HE2	1:A:56:LYS:HG2	8	0.23
(1,3115)	1:A:56:LYS:HE3	1:A:56:LYS:HG2	8	0.23
(1,3088)	1:A:9:LEU:H	1:A:9:LEU:HD12	4	0.23
(1,3088)	1:A:9:LEU:H	1:A:9:LEU:HD11	4	0.23
(1,3088)	1:A:9:LEU:H	1:A:9:LEU:HD13	4	0.23
(1,3088)	1:A:9:LEU:HD12	1:A:33:LEU:H	4	0.23
(1,3088)	1:A:9:LEU:HD11	1:A:33:LEU:H	4	0.23
(1,3088)	1:A:9:LEU:HD13	1:A:33:LEU:H	4	0.23
(1,3074)	1:A:78:ARG:HA	1:A:78:ARG:HG2	1	0.23
(1,3074)	1:A:78:ARG:HG2	1:A:79:SER:HB2	1	0.23
(1,3048)	1:A:134:LYS:HG3	1:A:96:ASP:HA	10	0.23
(1,3048)	1:A:134:LYS:HG3	1:A:134:LYS:HA	10	0.23
(1,2783)	1:A:131:CYS:H	1:A:130:LYS:HE2	2	0.23
(1,2783)	1:A:131:CYS:H	1:A:131:CYS:HB3	2	0.23
(1,2783)	1:A:131:CYS:H	1:A:130:LYS:HE2	3	0.23
(1,2783)	1:A:131:CYS:H	1:A:131:CYS:HB3	3	0.23
(1,2783)	1:A:131:CYS:H	1:A:130:LYS:HE2	4	0.23
(1,2783)	1:A:131:CYS:H	1:A:131:CYS:HB3	4	0.23
(1,2783)	1:A:131:CYS:H	1:A:130:LYS:HE2	5	0.23
(1,2783)	1:A:131:CYS:H	1:A:131:CYS:HB3	5	0.23
(1,2783)	1:A:131:CYS:H	1:A:130:LYS:HE2	8	0.23
(1,2783)	1:A:131:CYS:H	1:A:131:CYS:HB3	8	0.23
(1,2783)	1:A:131:CYS:H	1:A:130:LYS:HE2	9	0.23
(1,2783)	1:A:131:CYS:H	1:A:131:CYS:HB3	9	0.23
(1,2702)	1:A:117:PRO:HD3	1:A:116:ASP:HB3	1	0.23
(1,2702)	1:A:116:ASP:HB3	1:A:118:SER:HB2	1	0.23
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:33:LEU:HA	6	0.23
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:33:LEU:HA	6	0.23
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:33:LEU:HA	6	0.23
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:36:CYS:HB2	6	0.23
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:36:CYS:HB2	6	0.23
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:36:CYS:HB2	6	0.23
(1,2636)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:122:PHE:HB2	6	0.23
(1,2636)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:122:PHE:HB2	6	0.23
(1,2636)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:122:PHE:HB2	6	0.23
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:33:LEU:HA	8	0.23
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:33:LEU:HA	8	0.23
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:33:LEU:HA	8	0.23
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:36:CYS:HB2	8	0.23
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:36:CYS:HB2	8	0.23
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:36:CYS:HB2	8	0.23
(1,2636)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:122:PHE:HB2	8	0.23

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2636)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:122:PHE:HB2	8	0.23
(1,2636)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:122:PHE:HB2	8	0.23
(1,2568)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:60:VAL:HB	2	0.23
(1,2568)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:60:VAL:HB	2	0.23
(1,2568)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:60:VAL:HB	2	0.23
(1,2568)	1:A:149:VAL:HG12	1:A:125:ASN:HB2	2	0.23
(1,2568)	1:A:149:VAL:HG11	1:A:125:ASN:HB2	2	0.23
(1,2568)	1:A:149:VAL:HG13	1:A:125:ASN:HB2	2	0.23
(1,2544)	1:A:154:LYS:HA	1:A:120:GLU:HA	9	0.23
(1,2544)	1:A:154:LYS:HA	1:A:121:ILE:HA	9	0.23
(1,2532)	1:A:59:HIS:HD2	1:A:27:PRO:HG2	8	0.23
(1,2532)	1:A:59:HIS:HD2	1:A:57:MET:HB3	8	0.23
(1,2402)	1:A:19:SER:H	1:A:19:SER:HB3	9	0.23
(1,2317)	1:A:125:ASN:HD22	1:A:128:ASP:HB2	3	0.23
(1,223)	1:A:104:SER:H	1:A:13:HIS:HA	5	0.23
(1,2211)	1:A:17:LYS:H	1:A:73:GLY:HA2	4	0.23
(1,2180)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB3	5	0.23
(1,1767)	1:A:82:ARG:H	1:A:82:ARG:HB3	8	0.23
(1,1645)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:50:THR:HG21	9	0.23
(1,1645)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:50:THR:HG22	9	0.23
(1,1645)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:50:THR:HG23	9	0.23
(1,1573)	1:A:65:PRO:HD2	1:A:64:LYS:HG3	3	0.23
(1,1573)	1:A:65:PRO:HD2	1:A:64:LYS:HG3	7	0.23
(1,1496)	1:A:70:LEU:HG	1:A:17:LYS:HA	2	0.23
(1,1496)	1:A:70:LEU:HG	1:A:17:LYS:HA	5	0.23
(1,1496)	1:A:70:LEU:HG	1:A:17:LYS:HA	7	0.23
(1,1387)	1:A:55:SER:HA	1:A:55:SER:HB2	8	0.23
(1,1325)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:36:CYS:H	9	0.23
(1,127)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:88:HIS:HD2	2	0.23
(1,127)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:88:HIS:HD2	3	0.23
(1,127)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:88:HIS:HD2	5	0.23
(1,127)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:88:HIS:HD2	6	0.23
(1,1258)	1:A:86:GLU:HB2	1:A:151:SER:HB2	2	0.23
(1,1181)	1:A:64:LYS:HE2	1:A:64:LYS:HB2	10	0.23
(1,1181)	1:A:64:LYS:HE2	1:A:64:LYS:HB3	10	0.23
(1,1181)	1:A:64:LYS:HE3	1:A:64:LYS:HB2	10	0.23
(1,1181)	1:A:64:LYS:HE3	1:A:64:LYS:HB3	10	0.23
(1,1027)	1:A:75:THR:HB	1:A:18:GLY:HA3	8	0.23
(1,974)	1:A:86:GLU:H	1:A:85:PHE:HB2	2	0.22
(1,937)	1:A:17:LYS:H	1:A:16:ASN:HB2	1	0.22
(1,935)	1:A:73:GLY:H	1:A:16:ASN:HB2	6	0.22
(1,934)	1:A:72:GLY:H	1:A:16:ASN:HB2	3	0.22

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,821)	1:A:52:ASN:HB3	1:A:51:TYR:HA	2	0.22
(1,821)	1:A:52:ASN:HB3	1:A:51:TYR:HA	5	0.22
(1,821)	1:A:52:ASN:HB3	1:A:51:TYR:HA	9	0.22
(1,717)	1:A:78:ARG:HD2	1:A:156:PHE:HD1	1	0.22
(1,717)	1:A:78:ARG:HD2	1:A:156:PHE:HD2	1	0.22
(1,717)	1:A:78:ARG:HD2	1:A:156:PHE:HD1	4	0.22
(1,717)	1:A:78:ARG:HD2	1:A:156:PHE:HD2	4	0.22
(1,556)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:70:LEU:HD12	3	0.22
(1,556)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:70:LEU:HD11	3	0.22
(1,556)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:70:LEU:HD13	3	0.22
(1,549)	1:A:74:LYS:H	1:A:73:GLY:HA3	2	0.22
(1,549)	1:A:74:LYS:H	1:A:73:GLY:HA3	5	0.22
(1,495)	1:A:94:ALA:HB2	1:A:134:LYS:HA	6	0.22
(1,495)	1:A:94:ALA:HB1	1:A:134:LYS:HA	6	0.22
(1,495)	1:A:94:ALA:HB3	1:A:134:LYS:HA	6	0.22
(1,495)	1:A:94:ALA:HB2	1:A:134:LYS:HA	7	0.22
(1,495)	1:A:94:ALA:HB1	1:A:134:LYS:HA	7	0.22
(1,495)	1:A:94:ALA:HB3	1:A:134:LYS:HA	7	0.22
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:6:LYS:HD2	10	0.22
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:56:LYS:HD2	10	0.22
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:56:LYS:HD3	10	0.22
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:57:MET:HB2	10	0.22
(1,3457)	1:A:125:ASN:HD22	1:A:126:GLU:H	2	0.22
(1,3457)	1:A:127:HIS:H	1:A:125:ASN:HD22	2	0.22
(1,328)	1:A:100:ALA:HB2	1:A:101:MET:HA	8	0.22
(1,328)	1:A:100:ALA:HB1	1:A:101:MET:HA	8	0.22
(1,328)	1:A:100:ALA:HB3	1:A:101:MET:HA	8	0.22
(1,3044)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:87:GLN:HB2	9	0.22
(1,3044)	1:A:146:VAL:HB	1:A:88:HIS:HB2	9	0.22
(1,3044)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:147:LEU:HG	9	0.22
(1,3004)	1:A:56:LYS:H	1:A:6:LYS:HD2	10	0.22
(1,3004)	1:A:56:LYS:H	1:A:56:LYS:HD2	10	0.22
(1,3004)	1:A:56:LYS:H	1:A:56:LYS:HD3	10	0.22
(1,2907)	1:A:89:VAL:HB	1:A:151:SER:HB2	9	0.22
(1,2907)	1:A:110:GLN:HG2	1:A:77:SER:HB2	9	0.22
(1,2907)	1:A:84:CYS:HB3	1:A:154:LYS:HB3	9	0.22
(1,2907)	1:A:153:PRO:HD3	1:A:154:LYS:HB3	9	0.22
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:12:VAL:HG12	8	0.22
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:12:VAL:HG11	8	0.22
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:12:VAL:HG13	8	0.22
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:76:ALA:HB2	8	0.22
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:76:ALA:HB1	8	0.22

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:76:ALA:HB3	8	0.22
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:12:VAL:HG12	10	0.22
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:12:VAL:HG11	10	0.22
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:12:VAL:HG13	10	0.22
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:76:ALA:HB2	10	0.22
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:76:ALA:HB1	10	0.22
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:76:ALA:HB3	10	0.22
(1,2829)	1:A:58:CYS:HB2	1:A:51:TYR:HD1	4	0.22
(1,2829)	1:A:58:CYS:HB2	1:A:51:TYR:HE1	4	0.22
(1,2829)	1:A:58:CYS:HB2	1:A:51:TYR:HE2	4	0.22
(1,2822)	1:A:52:ASN:HB3	1:A:57:MET:HB2	6	0.22
(1,2822)	1:A:68:TYR:HB3	1:A:17:LYS:HD3	6	0.22
(1,2822)	1:A:108:ASP:HB3	1:A:67:LEU:HG	6	0.22
(1,2822)	1:A:107:ALA:HB2	1:A:108:ASP:HB3	6	0.22
(1,2822)	1:A:107:ALA:HB1	1:A:108:ASP:HB3	6	0.22
(1,2822)	1:A:107:ALA:HB3	1:A:108:ASP:HB3	6	0.22
(1,2784)	1:A:101:MET:H	1:A:130:LYS:HE2	6	0.22
(1,2784)	1:A:130:LYS:HE3	1:A:125:ASN:H	6	0.22
(1,2784)	1:A:101:MET:H	1:A:131:CYS:HB3	6	0.22
(1,2783)	1:A:131:CYS:H	1:A:130:LYS:HE2	7	0.22
(1,2783)	1:A:131:CYS:H	1:A:131:CYS:HB3	7	0.22
(1,2753)	1:A:136:ARG:HA	1:A:136:ARG:HD2	2	0.22
(1,2753)	1:A:136:ARG:HA	1:A:136:ARG:HD3	2	0.22
(1,2753)	1:A:136:ARG:HA	1:A:136:ARG:HD2	4	0.22
(1,2753)	1:A:136:ARG:HA	1:A:136:ARG:HD3	4	0.22
(1,2753)	1:A:136:ARG:HA	1:A:136:ARG:HD2	9	0.22
(1,2753)	1:A:136:ARG:HA	1:A:136:ARG:HD3	9	0.22
(1,2702)	1:A:117:PRO:HD3	1:A:116:ASP:HB3	3	0.22
(1,2702)	1:A:116:ASP:HB3	1:A:118:SER:HB2	3	0.22
(1,2700)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:16:ASN:H	5	0.22
(1,2700)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:72:GLY:H	5	0.22
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:22:PRO:HB3	2	0.22
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:22:PRO:HB3	2	0.22
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:22:PRO:HB3	2	0.22
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:62:GLU:HG3	2	0.22
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:62:GLU:HG3	2	0.22
(1,2662)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:62:GLU:HG3	2	0.22
(1,2544)	1:A:154:LYS:HA	1:A:120:GLU:HA	8	0.22
(1,2544)	1:A:154:LYS:HA	1:A:121:ILE:HA	8	0.22
(1,2402)	1:A:19:SER:H	1:A:19:SER:HB3	2	0.22
(1,2402)	1:A:19:SER:H	1:A:19:SER:HB3	7	0.22
(1,2315)	1:A:125:ASN:HD21	1:A:149:VAL:HG12	8	0.22

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2315)	1:A:125:ASN:HD21	1:A:149:VAL:HG11	8	0.22
(1,2315)	1:A:125:ASN:HD21	1:A:149:VAL:HG13	8	0.22
(1,218)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:151:SER:HB2	8	0.22
(1,218)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:151:SER:HB2	8	0.22
(1,218)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:151:SER:HB2	8	0.22
(1,1767)	1:A:82:ARG:H	1:A:82:ARG:HB3	6	0.22
(1,1767)	1:A:82:ARG:H	1:A:82:ARG:HB3	10	0.22
(1,165)	1:A:150:THR:HG21	1:A:123:THR:HA	9	0.22
(1,165)	1:A:150:THR:HG22	1:A:123:THR:HA	9	0.22
(1,165)	1:A:150:THR:HG23	1:A:123:THR:HA	9	0.22
(1,1496)	1:A:70:LEU:HG	1:A:17:LYS:HA	1	0.22
(1,1496)	1:A:70:LEU:HG	1:A:17:LYS:HA	6	0.22
(1,1496)	1:A:70:LEU:HG	1:A:17:LYS:HA	9	0.22
(1,1387)	1:A:55:SER:HA	1:A:55:SER:HB2	1	0.22
(1,1387)	1:A:55:SER:HA	1:A:55:SER:HB2	2	0.22
(1,1387)	1:A:55:SER:HA	1:A:55:SER:HB2	3	0.22
(1,1387)	1:A:55:SER:HA	1:A:55:SER:HB2	5	0.22
(1,1387)	1:A:55:SER:HA	1:A:55:SER:HB2	6	0.22
(1,1387)	1:A:55:SER:HA	1:A:55:SER:HB2	9	0.22
(1,1387)	1:A:55:SER:HA	1:A:55:SER:HB2	10	0.22
(1,1325)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:36:CYS:H	2	0.22
(1,1305)	1:A:88:HIS:H	1:A:87:GLN:HB2	5	0.22
(1,1292)	1:A:32:SER:HB2	1:A:35:GLN:HB3	1	0.22
(1,1292)	1:A:32:SER:HB2	1:A:35:GLN:HB3	9	0.22
(1,127)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:88:HIS:HD2	8	0.22
(1,1027)	1:A:75:THR:HB	1:A:18:GLY:HA3	1	0.22
(1,1027)	1:A:75:THR:HB	1:A:18:GLY:HA3	6	0.22
(1,974)	1:A:86:GLU:H	1:A:85:PHE:HB2	4	0.21
(1,935)	1:A:73:GLY:H	1:A:16:ASN:HB2	7	0.21
(1,826)	1:A:128:ASP:HB2	1:A:125:ASN:HB2	9	0.21
(1,717)	1:A:78:ARG:HD2	1:A:156:PHE:HD1	9	0.21
(1,717)	1:A:78:ARG:HD2	1:A:156:PHE:HD2	9	0.21
(1,713)	1:A:53:ASP:HB3	1:A:74:LYS:HG3	1	0.21
(1,658)	1:A:50:THR:H	1:A:49:PHE:HB3	10	0.21
(1,495)	1:A:94:ALA:HB2	1:A:134:LYS:HA	2	0.21
(1,495)	1:A:94:ALA:HB1	1:A:134:LYS:HA	2	0.21
(1,495)	1:A:94:ALA:HB3	1:A:134:LYS:HA	2	0.21
(1,495)	1:A:94:ALA:HB2	1:A:134:LYS:HA	4	0.21
(1,495)	1:A:94:ALA:HB1	1:A:134:LYS:HA	4	0.21
(1,495)	1:A:94:ALA:HB3	1:A:134:LYS:HA	4	0.21
(1,495)	1:A:94:ALA:HB2	1:A:134:LYS:HA	8	0.21
(1,495)	1:A:94:ALA:HB1	1:A:134:LYS:HA	8	0.21

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,495)	1:A:94:ALA:HB3	1:A:134:LYS:HA	8	0.21
(1,396)	1:A:107:ALA:HB2	1:A:77:SER:HB2	2	0.21
(1,396)	1:A:107:ALA:HB1	1:A:77:SER:HB2	2	0.21
(1,396)	1:A:107:ALA:HB3	1:A:77:SER:HB2	2	0.21
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:6:LYS:HD2	2	0.21
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:56:LYS:HD2	2	0.21
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:56:LYS:HD3	2	0.21
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:57:MET:HB2	2	0.21
(1,3347)	1:A:101:MET:H	1:A:130:LYS:HE2	2	0.21
(1,3347)	1:A:101:MET:H	1:A:131:CYS:HB3	2	0.21
(1,3347)	1:A:101:MET:H	1:A:130:LYS:HE2	4	0.21
(1,3347)	1:A:101:MET:H	1:A:131:CYS:HB3	4	0.21
(1,3265)	1:A:12:VAL:H	1:A:9:LEU:HB2	6	0.21
(1,3265)	1:A:12:VAL:H	1:A:105:GLN:HG2	6	0.21
(1,3208)	1:A:70:LEU:H	1:A:16:ASN:HB3	4	0.21
(1,3208)	1:A:70:LEU:H	1:A:68:TYR:HB3	4	0.21
(1,3074)	1:A:78:ARG:HA	1:A:78:ARG:HG2	4	0.21
(1,3074)	1:A:78:ARG:HG2	1:A:79:SER:HB2	4	0.21
(1,3074)	1:A:78:ARG:HA	1:A:78:ARG:HG2	7	0.21
(1,3074)	1:A:78:ARG:HG2	1:A:79:SER:HB2	7	0.21
(1,3051)	1:A:65:PRO:HG2	1:A:66:ASP:HB2	2	0.21
(1,3051)	1:A:108:ASP:HB2	1:A:65:PRO:HG2	2	0.21
(1,3004)	1:A:56:LYS:H	1:A:6:LYS:HD2	2	0.21
(1,3004)	1:A:56:LYS:H	1:A:56:LYS:HD2	2	0.21
(1,3004)	1:A:56:LYS:H	1:A:56:LYS:HD3	2	0.21
(1,2971)	1:A:159:GLU:HB2	1:A:155:GLN:HA	5	0.21
(1,2971)	1:A:159:GLU:HB2	1:A:156:PHE:HA	5	0.21
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:12:VAL:HG12	2	0.21
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:12:VAL:HG11	2	0.21
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:12:VAL:HG13	2	0.21
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:76:ALA:HB2	2	0.21
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:76:ALA:HB1	2	0.21
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:76:ALA:HB3	2	0.21
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:12:VAL:HG12	3	0.21
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:12:VAL:HG11	3	0.21
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:12:VAL:HG13	3	0.21
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:76:ALA:HB2	3	0.21
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:76:ALA:HB1	3	0.21
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:76:ALA:HB3	3	0.21
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:12:VAL:HG12	6	0.21
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:12:VAL:HG11	6	0.21
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:12:VAL:HG13	6	0.21

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:76:ALA:HB2	6	0.21
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:76:ALA:HB1	6	0.21
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:76:ALA:HB3	6	0.21
(1,2822)	1:A:52:ASN:HB3	1:A:57:MET:HB2	8	0.21
(1,2822)	1:A:68:TYR:HB3	1:A:17:LYS:HD3	8	0.21
(1,2822)	1:A:108:ASP:HB3	1:A:67:LEU:HG	8	0.21
(1,2822)	1:A:107:ALA:HB2	1:A:108:ASP:HB3	8	0.21
(1,2822)	1:A:107:ALA:HB1	1:A:108:ASP:HB3	8	0.21
(1,2822)	1:A:107:ALA:HB3	1:A:108:ASP:HB3	8	0.21
(1,2783)	1:A:131:CYS:H	1:A:130:LYS:HE2	1	0.21
(1,2783)	1:A:131:CYS:H	1:A:131:CYS:HB3	1	0.21
(1,2778)	1:A:17:LYS:HE3	1:A:17:LYS:HA	10	0.21
(1,2778)	1:A:113:CYS:HB2	1:A:133:PHE:HA	10	0.21
(1,2753)	1:A:136:ARG:HA	1:A:136:ARG:HD2	3	0.21
(1,2753)	1:A:136:ARG:HA	1:A:136:ARG:HD3	3	0.21
(1,2749)	1:A:82:ARG:HD3	1:A:82:ARG:HB2	3	0.21
(1,2749)	1:A:82:ARG:HD3	1:A:82:ARG:HB3	3	0.21
(1,2749)	1:A:82:ARG:HD3	1:A:82:ARG:HB2	8	0.21
(1,2749)	1:A:82:ARG:HD3	1:A:82:ARG:HB3	8	0.21
(1,2702)	1:A:117:PRO:HD3	1:A:116:ASP:HB3	4	0.21
(1,2702)	1:A:116:ASP:HB3	1:A:118:SER:HB2	4	0.21
(1,2556)	1:A:71:THR:HG21	1:A:16:ASN:HB2	7	0.21
(1,2556)	1:A:71:THR:HG22	1:A:16:ASN:HB2	7	0.21
(1,2556)	1:A:71:THR:HG23	1:A:16:ASN:HB2	7	0.21
(1,2556)	1:A:71:THR:HG21	1:A:54:ASP:HB2	7	0.21
(1,2556)	1:A:71:THR:HG21	1:A:54:ASP:HB3	7	0.21
(1,2556)	1:A:71:THR:HG22	1:A:54:ASP:HB2	7	0.21
(1,2556)	1:A:71:THR:HG22	1:A:54:ASP:HB3	7	0.21
(1,2556)	1:A:71:THR:HG23	1:A:54:ASP:HB2	7	0.21
(1,2556)	1:A:71:THR:HG23	1:A:54:ASP:HB3	7	0.21
(1,2544)	1:A:154:LYS:HA	1:A:120:GLU:HA	1	0.21
(1,2544)	1:A:154:LYS:HA	1:A:121:ILE:HA	1	0.21
(1,2544)	1:A:154:LYS:HA	1:A:120:GLU:HA	6	0.21
(1,2544)	1:A:154:LYS:HA	1:A:121:ILE:HA	6	0.21
(1,2402)	1:A:19:SER:H	1:A:19:SER:HB3	1	0.21
(1,2402)	1:A:19:SER:H	1:A:19:SER:HB3	6	0.21
(1,2252)	1:A:113:CYS:H	1:A:122:PHE:HB2	4	0.21
(1,223)	1:A:104:SER:H	1:A:13:HIS:HA	9	0.21
(1,2180)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB3	9	0.21
(1,2061)	1:A:101:MET:H	1:A:101:MET:HG3	7	0.21
(1,165)	1:A:150:THR:HG21	1:A:123:THR:HA	5	0.21
(1,165)	1:A:150:THR:HG22	1:A:123:THR:HA	5	0.21

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,165)	1:A:150:THR:HG23	1:A:123:THR:HA	5	0.21
(1,1387)	1:A:55:SER:HA	1:A:55:SER:HB2	4	0.21
(1,1387)	1:A:55:SER:HA	1:A:55:SER:HB2	7	0.21
(1,1305)	1:A:88:HIS:H	1:A:87:GLN:HB2	2	0.21
(1,1181)	1:A:64:LYS:HE2	1:A:64:LYS:HB2	7	0.21
(1,1181)	1:A:64:LYS:HE2	1:A:64:LYS:HB3	7	0.21
(1,1181)	1:A:64:LYS:HE3	1:A:64:LYS:HB2	7	0.21
(1,1181)	1:A:64:LYS:HE3	1:A:64:LYS:HB3	7	0.21
(1,1027)	1:A:75:THR:HB	1:A:18:GLY:HA3	2	0.21
(1,1027)	1:A:75:THR:HB	1:A:18:GLY:HA3	10	0.21
(1,994)	1:A:61:LYS:HE3	1:A:50:THR:HB	3	0.2
(1,937)	1:A:17:LYS:H	1:A:16:ASN:HB2	3	0.2
(1,773)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:65:PRO:HA	10	0.2
(1,717)	1:A:78:ARG:HD2	1:A:156:PHE:HD1	2	0.2
(1,717)	1:A:78:ARG:HD2	1:A:156:PHE:HD2	2	0.2
(1,60)	1:A:85:PHE:HD1	1:A:82:ARG:HB2	3	0.2
(1,60)	1:A:85:PHE:HD2	1:A:82:ARG:HB2	3	0.2
(1,495)	1:A:94:ALA:HB2	1:A:134:LYS:HA	9	0.2
(1,495)	1:A:94:ALA:HB1	1:A:134:LYS:HA	9	0.2
(1,495)	1:A:94:ALA:HB3	1:A:134:LYS:HA	9	0.2
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:6:LYS:HD2	9	0.2
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:56:LYS:HD2	9	0.2
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:56:LYS:HD3	9	0.2
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:57:MET:HB2	9	0.2
(1,3457)	1:A:125:ASN:HD22	1:A:126:GLU:H	5	0.2
(1,3457)	1:A:127:HIS:H	1:A:125:ASN:HD22	5	0.2
(1,3457)	1:A:125:ASN:HD22	1:A:126:GLU:H	9	0.2
(1,3457)	1:A:127:HIS:H	1:A:125:ASN:HD22	9	0.2
(1,3265)	1:A:12:VAL:H	1:A:9:LEU:HB2	9	0.2
(1,3265)	1:A:12:VAL:H	1:A:105:GLN:HG2	9	0.2
(1,3119)	1:A:6:LYS:HG2	1:A:53:ASP:H	9	0.2
(1,3119)	1:A:6:LYS:HG3	1:A:53:ASP:H	9	0.2
(1,3115)	1:A:6:LYS:HE3	1:A:6:LYS:HG3	6	0.2
(1,3115)	1:A:56:LYS:HE2	1:A:56:LYS:HG2	6	0.2
(1,3115)	1:A:56:LYS:HE3	1:A:56:LYS:HG2	6	0.2
(1,3088)	1:A:9:LEU:H	1:A:9:LEU:HD12	6	0.2
(1,3088)	1:A:9:LEU:H	1:A:9:LEU:HD11	6	0.2
(1,3088)	1:A:9:LEU:H	1:A:9:LEU:HD13	6	0.2
(1,3088)	1:A:9:LEU:HD12	1:A:33:LEU:H	6	0.2
(1,3088)	1:A:9:LEU:HD11	1:A:33:LEU:H	6	0.2
(1,3088)	1:A:9:LEU:HD13	1:A:33:LEU:H	6	0.2
(1,3088)	1:A:9:LEU:H	1:A:9:LEU:HD12	7	0.2

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3088)	1:A:9:LEU:H	1:A:9:LEU:HD11	7	0.2
(1,3088)	1:A:9:LEU:H	1:A:9:LEU:HD13	7	0.2
(1,3088)	1:A:9:LEU:HD12	1:A:33:LEU:H	7	0.2
(1,3088)	1:A:9:LEU:HD11	1:A:33:LEU:H	7	0.2
(1,3088)	1:A:9:LEU:HD13	1:A:33:LEU:H	7	0.2
(1,3088)	1:A:9:LEU:H	1:A:9:LEU:HD12	8	0.2
(1,3088)	1:A:9:LEU:H	1:A:9:LEU:HD11	8	0.2
(1,3088)	1:A:9:LEU:H	1:A:9:LEU:HD13	8	0.2
(1,3088)	1:A:9:LEU:HD12	1:A:33:LEU:H	8	0.2
(1,3088)	1:A:9:LEU:HD11	1:A:33:LEU:H	8	0.2
(1,3088)	1:A:9:LEU:HD13	1:A:33:LEU:H	8	0.2
(1,3032)	1:A:27:PRO:HG2	1:A:28:VAL:H	9	0.2
(1,3032)	1:A:27:PRO:HG2	1:A:58:CYS:H	9	0.2
(1,3004)	1:A:56:LYS:H	1:A:6:LYS:HD2	3	0.2
(1,3004)	1:A:56:LYS:H	1:A:56:LYS:HD2	3	0.2
(1,3004)	1:A:56:LYS:H	1:A:56:LYS:HD3	3	0.2
(1,2998)	1:A:87:GLN:H	1:A:87:GLN:HB3	10	0.2
(1,2998)	1:A:32:SER:H	1:A:35:GLN:HB2	10	0.2
(1,2992)	1:A:49:PHE:H	1:A:48:HIS:HB3	4	0.2
(1,2992)	1:A:16:ASN:H	1:A:13:HIS:HB3	4	0.2
(1,2967)	1:A:159:GLU:HB3	1:A:156:PHE:HD1	4	0.2
(1,2967)	1:A:159:GLU:HB3	1:A:156:PHE:HD2	4	0.2
(1,2967)	1:A:159:GLU:H	1:A:159:GLU:HB3	4	0.2
(1,2967)	1:A:159:GLU:HB3	1:A:156:PHE:HD1	6	0.2
(1,2967)	1:A:159:GLU:HB3	1:A:156:PHE:HD2	6	0.2
(1,2967)	1:A:159:GLU:H	1:A:159:GLU:HB3	6	0.2
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:12:VAL:HG12	5	0.2
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:12:VAL:HG11	5	0.2
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:12:VAL:HG13	5	0.2
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:76:ALA:HB2	5	0.2
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:76:ALA:HB1	5	0.2
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:76:ALA:HB3	5	0.2
(1,2863)	1:A:7:LEU:HB3	1:A:34:GLU:HG2	9	0.2
(1,2863)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:9:LEU:HB2	9	0.2
(1,2859)	1:A:16:ASN:HB2	1:A:17:LYS:HG3	4	0.2
(1,2859)	1:A:71:THR:HG21	1:A:16:ASN:HB2	4	0.2
(1,2859)	1:A:71:THR:HG22	1:A:16:ASN:HB2	4	0.2
(1,2859)	1:A:71:THR:HG23	1:A:16:ASN:HB2	4	0.2
(1,2822)	1:A:52:ASN:HB3	1:A:57:MET:HB2	5	0.2
(1,2822)	1:A:68:TYR:HB3	1:A:17:LYS:HD3	5	0.2
(1,2822)	1:A:108:ASP:HB3	1:A:67:LEU:HG	5	0.2
(1,2822)	1:A:107:ALA:HB2	1:A:108:ASP:HB3	5	0.2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2822)	1:A:107:ALA:HB1	1:A:108:ASP:HB3	5	0.2
(1,2822)	1:A:107:ALA:HB3	1:A:108:ASP:HB3	5	0.2
(1,2822)	1:A:52:ASN:HB3	1:A:57:MET:HB2	7	0.2
(1,2822)	1:A:68:TYR:HB3	1:A:17:LYS:HD3	7	0.2
(1,2822)	1:A:108:ASP:HB3	1:A:67:LEU:HG	7	0.2
(1,2822)	1:A:107:ALA:HB2	1:A:108:ASP:HB3	7	0.2
(1,2822)	1:A:107:ALA:HB1	1:A:108:ASP:HB3	7	0.2
(1,2822)	1:A:107:ALA:HB3	1:A:108:ASP:HB3	7	0.2
(1,2771)	1:A:154:LYS:HE3	1:A:154:LYS:HG2	5	0.2
(1,2771)	1:A:154:LYS:HE3	1:A:154:LYS:HG3	5	0.2
(1,2753)	1:A:136:ARG:HA	1:A:136:ARG:HD2	8	0.2
(1,2753)	1:A:136:ARG:HA	1:A:136:ARG:HD3	8	0.2
(1,2702)	1:A:117:PRO:HD3	1:A:116:ASP:HB3	8	0.2
(1,2702)	1:A:116:ASP:HB3	1:A:118:SER:HB2	8	0.2
(1,2702)	1:A:117:PRO:HD3	1:A:116:ASP:HB3	10	0.2
(1,2702)	1:A:116:ASP:HB3	1:A:118:SER:HB2	10	0.2
(1,2690)	1:A:94:ALA:HA	1:A:134:LYS:HB3	2	0.2
(1,2690)	1:A:94:ALA:HA	1:A:95:PRO:HG2	2	0.2
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG12	1:A:143:GLU:HB3	5	0.2
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG11	1:A:143:GLU:HB3	5	0.2
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG13	1:A:143:GLU:HB3	5	0.2
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG12	1:A:149:VAL:HB	5	0.2
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG11	1:A:149:VAL:HB	5	0.2
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG13	1:A:149:VAL:HB	5	0.2
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG12	1:A:143:GLU:HB3	10	0.2
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG11	1:A:143:GLU:HB3	10	0.2
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG13	1:A:143:GLU:HB3	10	0.2
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG12	1:A:149:VAL:HB	10	0.2
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG11	1:A:149:VAL:HB	10	0.2
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG13	1:A:149:VAL:HB	10	0.2
(1,2532)	1:A:59:HIS:HD2	1:A:27:PRO:HG2	6	0.2
(1,2532)	1:A:59:HIS:HD2	1:A:57:MET:HB3	6	0.2
(1,223)	1:A:104:SER:H	1:A:13:HIS:HA	7	0.2
(1,2211)	1:A:17:LYS:H	1:A:73:GLY:HA2	8	0.2
(1,2180)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB3	1	0.2
(1,218)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:151:SER:HB2	2	0.2
(1,218)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:151:SER:HB2	2	0.2
(1,218)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:151:SER:HB2	2	0.2
(1,167)	1:A:150:THR:HG21	1:A:85:PHE:HB2	3	0.2
(1,167)	1:A:150:THR:HG22	1:A:85:PHE:HB2	3	0.2
(1,167)	1:A:150:THR:HG23	1:A:85:PHE:HB2	3	0.2
(1,167)	1:A:150:THR:HG21	1:A:85:PHE:HB2	6	0.2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,167)	1:A:150:THR:HG22	1:A:85:PHE:HB2	6	0.2
(1,167)	1:A:150:THR:HG23	1:A:85:PHE:HB2	6	0.2
(1,165)	1:A:150:THR:HG21	1:A:123:THR:HA	1	0.2
(1,165)	1:A:150:THR:HG22	1:A:123:THR:HA	1	0.2
(1,165)	1:A:150:THR:HG23	1:A:123:THR:HA	1	0.2
(1,165)	1:A:150:THR:HG21	1:A:123:THR:HA	4	0.2
(1,165)	1:A:150:THR:HG22	1:A:123:THR:HA	4	0.2
(1,165)	1:A:150:THR:HG23	1:A:123:THR:HA	4	0.2
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD22	1:A:4:PRO:HD3	8	0.2
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD21	1:A:4:PRO:HD3	8	0.2
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD23	1:A:4:PRO:HD3	8	0.2
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD12	1:A:4:PRO:HD3	8	0.2
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD11	1:A:4:PRO:HD3	8	0.2
(1,1611)	1:A:7:LEU:HD13	1:A:4:PRO:HD3	8	0.2
(1,1496)	1:A:70:LEU:HG	1:A:17:LYS:HA	10	0.2
(1,1429)	1:A:136:ARG:HA	1:A:136:ARG:HG3	10	0.2
(1,1305)	1:A:88:HIS:H	1:A:87:GLN:HB2	7	0.2
(1,1296)	1:A:56:LYS:HA	1:A:6:LYS:HD2	7	0.2
(1,1292)	1:A:32:SER:HB2	1:A:35:GLN:HB3	2	0.2
(1,1258)	1:A:86:GLU:HB2	1:A:151:SER:HB2	10	0.2
(1,1027)	1:A:75:THR:HB	1:A:18:GLY:HA3	5	0.2
(1,1027)	1:A:75:THR:HB	1:A:18:GLY:HA3	7	0.2
(1,974)	1:A:86:GLU:H	1:A:85:PHE:HB2	5	0.19
(1,974)	1:A:86:GLU:H	1:A:85:PHE:HB2	9	0.19
(1,935)	1:A:73:GLY:H	1:A:16:ASN:HB2	3	0.19
(1,838)	1:A:125:ASN:H	1:A:125:ASN:HB3	8	0.19
(1,717)	1:A:78:ARG:HD2	1:A:156:PHE:HD1	6	0.19
(1,717)	1:A:78:ARG:HD2	1:A:156:PHE:HD2	6	0.19
(1,713)	1:A:53:ASP:HB3	1:A:74:LYS:HG3	2	0.19
(1,713)	1:A:53:ASP:HB3	1:A:74:LYS:HG3	7	0.19
(1,688)	1:A:133:PHE:HB2	1:A:98:MET:HG3	7	0.19
(1,534)	1:A:4:PRO:HD3	1:A:32:SER:HB3	2	0.19
(1,495)	1:A:94:ALA:HB2	1:A:134:LYS:HA	3	0.19
(1,495)	1:A:94:ALA:HB1	1:A:134:LYS:HA	3	0.19
(1,495)	1:A:94:ALA:HB3	1:A:134:LYS:HA	3	0.19
(1,396)	1:A:107:ALA:HB2	1:A:77:SER:HB2	3	0.19
(1,396)	1:A:107:ALA:HB1	1:A:77:SER:HB2	3	0.19
(1,396)	1:A:107:ALA:HB3	1:A:77:SER:HB2	3	0.19
(1,363)	1:A:108:ASP:HA	1:A:77:SER:HB3	1	0.19
(1,3412)	1:A:16:ASN:HD22	1:A:71:THR:HG21	2	0.19
(1,3412)	1:A:16:ASN:HD22	1:A:71:THR:HG22	2	0.19
(1,3412)	1:A:16:ASN:HD22	1:A:71:THR:HG23	2	0.19

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3412)	1:A:115:ALA:H	1:A:112:ALA:HB2	2	0.19
(1,3412)	1:A:115:ALA:H	1:A:112:ALA:HB1	2	0.19
(1,3412)	1:A:115:ALA:H	1:A:112:ALA:HB3	2	0.19
(1,3384)	1:A:129:GLN:H	1:A:128:ASP:HB2	9	0.19
(1,3384)	1:A:129:GLN:H	1:A:129:GLN:HG2	9	0.19
(1,3384)	1:A:129:GLN:H	1:A:129:GLN:HG3	9	0.19
(1,3149)	1:A:40:CYS:HB3	1:A:60:VAL:HG12	8	0.19
(1,3149)	1:A:40:CYS:HB3	1:A:60:VAL:HG11	8	0.19
(1,3149)	1:A:40:CYS:HB3	1:A:60:VAL:HG13	8	0.19
(1,3149)	1:A:46:CYS:HB2	1:A:60:VAL:HG12	8	0.19
(1,3149)	1:A:46:CYS:HB2	1:A:60:VAL:HG11	8	0.19
(1,3149)	1:A:46:CYS:HB2	1:A:60:VAL:HG13	8	0.19
(1,3119)	1:A:6:LYS:HG2	1:A:53:ASP:H	4	0.19
(1,3119)	1:A:6:LYS:HG3	1:A:53:ASP:H	4	0.19
(1,3092)	1:A:11:CYS:H	1:A:76:ALA:HB2	7	0.19
(1,3092)	1:A:11:CYS:H	1:A:76:ALA:HB1	7	0.19
(1,3092)	1:A:11:CYS:H	1:A:76:ALA:HB3	7	0.19
(1,3092)	1:A:49:PHE:H	1:A:76:ALA:HB2	7	0.19
(1,3092)	1:A:49:PHE:H	1:A:76:ALA:HB1	7	0.19
(1,3092)	1:A:49:PHE:H	1:A:76:ALA:HB3	7	0.19
(1,3092)	1:A:11:CYS:H	1:A:76:ALA:HB2	8	0.19
(1,3092)	1:A:11:CYS:H	1:A:76:ALA:HB1	8	0.19
(1,3092)	1:A:11:CYS:H	1:A:76:ALA:HB3	8	0.19
(1,3092)	1:A:49:PHE:H	1:A:76:ALA:HB2	8	0.19
(1,3092)	1:A:49:PHE:H	1:A:76:ALA:HB1	8	0.19
(1,3092)	1:A:49:PHE:H	1:A:76:ALA:HB3	8	0.19
(1,3088)	1:A:9:LEU:H	1:A:9:LEU:HD12	1	0.19
(1,3088)	1:A:9:LEU:H	1:A:9:LEU:HD11	1	0.19
(1,3088)	1:A:9:LEU:H	1:A:9:LEU:HD13	1	0.19
(1,3088)	1:A:9:LEU:HD12	1:A:33:LEU:H	1	0.19
(1,3088)	1:A:9:LEU:HD11	1:A:33:LEU:H	1	0.19
(1,3088)	1:A:9:LEU:HD13	1:A:33:LEU:H	1	0.19
(1,3004)	1:A:56:LYS:H	1:A:6:LYS:HD2	9	0.19
(1,3004)	1:A:56:LYS:H	1:A:56:LYS:HD2	9	0.19
(1,3004)	1:A:56:LYS:H	1:A:56:LYS:HD3	9	0.19
(1,2982)	1:A:64:LYS:HA	1:A:64:LYS:HD3	4	0.19
(1,2982)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:107:ALA:HA	4	0.19
(1,2982)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:108:ASP:HA	4	0.19
(1,2907)	1:A:89:VAL:HB	1:A:151:SER:HB2	6	0.19
(1,2907)	1:A:110:GLN:HG2	1:A:77:SER:HB2	6	0.19
(1,2907)	1:A:84:CYS:HB3	1:A:154:LYS:HB3	6	0.19
(1,2907)	1:A:153:PRO:HD3	1:A:154:LYS:HB3	6	0.19

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2901)	1:A:22:PRO:HD3	1:A:62:GLU:HG3	5	0.19
(1,2901)	1:A:129:GLN:HG3	1:A:126:GLU:HA	5	0.19
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:12:VAL:HG12	1	0.19
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:12:VAL:HG11	1	0.19
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:12:VAL:HG13	1	0.19
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:76:ALA:HB2	1	0.19
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:76:ALA:HB1	1	0.19
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:76:ALA:HB3	1	0.19
(1,2825)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:57:MET:HB2	7	0.19
(1,2825)	1:A:107:ALA:HB2	1:A:108:ASP:HB2	7	0.19
(1,2825)	1:A:107:ALA:HB1	1:A:108:ASP:HB2	7	0.19
(1,2825)	1:A:107:ALA:HB3	1:A:108:ASP:HB2	7	0.19
(1,2824)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:44:ASP:HB2	3	0.19
(1,2824)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:44:ASP:HB2	3	0.19
(1,2824)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:44:ASP:HB2	3	0.19
(1,2824)	1:A:149:VAL:HG12	1:A:125:ASN:HB2	3	0.19
(1,2824)	1:A:149:VAL:HG11	1:A:125:ASN:HB2	3	0.19
(1,2824)	1:A:149:VAL:HG13	1:A:125:ASN:HB2	3	0.19
(1,2822)	1:A:52:ASN:HB3	1:A:57:MET:HB2	4	0.19
(1,2822)	1:A:68:TYR:HB3	1:A:17:LYS:HD3	4	0.19
(1,2822)	1:A:108:ASP:HB3	1:A:67:LEU:HG	4	0.19
(1,2822)	1:A:107:ALA:HB2	1:A:108:ASP:HB3	4	0.19
(1,2822)	1:A:107:ALA:HB1	1:A:108:ASP:HB3	4	0.19
(1,2822)	1:A:107:ALA:HB3	1:A:108:ASP:HB3	4	0.19
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG12	1:A:143:GLU:HB3	4	0.19
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG11	1:A:143:GLU:HB3	4	0.19
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG13	1:A:143:GLU:HB3	4	0.19
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG12	1:A:149:VAL:HB	4	0.19
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG11	1:A:149:VAL:HB	4	0.19
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG13	1:A:149:VAL:HB	4	0.19
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG12	1:A:143:GLU:HB3	6	0.19
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG11	1:A:143:GLU:HB3	6	0.19
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG13	1:A:143:GLU:HB3	6	0.19
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG12	1:A:149:VAL:HB	6	0.19
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG11	1:A:149:VAL:HB	6	0.19
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG13	1:A:149:VAL:HB	6	0.19
(1,2556)	1:A:71:THR:HG21	1:A:16:ASN:HB2	1	0.19
(1,2556)	1:A:71:THR:HG22	1:A:16:ASN:HB2	1	0.19
(1,2556)	1:A:71:THR:HG23	1:A:16:ASN:HB2	1	0.19
(1,2556)	1:A:71:THR:HG21	1:A:54:ASP:HB2	1	0.19
(1,2556)	1:A:71:THR:HG21	1:A:54:ASP:HB3	1	0.19
(1,2556)	1:A:71:THR:HG22	1:A:54:ASP:HB2	1	0.19

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2556)	1:A:71:THR:HG22	1:A:54:ASP:HB3	1	0.19
(1,2556)	1:A:71:THR:HG23	1:A:54:ASP:HB2	1	0.19
(1,2556)	1:A:71:THR:HG23	1:A:54:ASP:HB3	1	0.19
(1,2544)	1:A:154:LYS:HA	1:A:120:GLU:HA	5	0.19
(1,2544)	1:A:154:LYS:HA	1:A:121:ILE:HA	5	0.19
(1,2544)	1:A:154:LYS:HA	1:A:120:GLU:HA	10	0.19
(1,2544)	1:A:154:LYS:HA	1:A:121:ILE:HA	10	0.19
(1,2488)	1:A:68:TYR:HD1	1:A:20:ARG:HB2	4	0.19
(1,2488)	1:A:68:TYR:HD1	1:A:20:ARG:HB3	4	0.19
(1,2488)	1:A:68:TYR:HD2	1:A:20:ARG:HB2	4	0.19
(1,2488)	1:A:68:TYR:HD2	1:A:20:ARG:HB3	4	0.19
(1,2488)	1:A:142:LYS:HB3	1:A:91:TYR:HD1	4	0.19
(1,2488)	1:A:142:LYS:HB3	1:A:91:TYR:HD2	4	0.19
(1,167)	1:A:150:THR:HG21	1:A:85:PHE:HB2	2	0.19
(1,167)	1:A:150:THR:HG22	1:A:85:PHE:HB2	2	0.19
(1,167)	1:A:150:THR:HG23	1:A:85:PHE:HB2	2	0.19
(1,165)	1:A:150:THR:HG21	1:A:123:THR:HA	6	0.19
(1,165)	1:A:150:THR:HG22	1:A:123:THR:HA	6	0.19
(1,165)	1:A:150:THR:HG23	1:A:123:THR:HA	6	0.19
(1,1569)	1:A:74:LYS:HG2	1:A:12:VAL:HB	2	0.19
(1,1569)	1:A:74:LYS:HG2	1:A:12:VAL:HB	3	0.19
(1,1569)	1:A:74:LYS:HG2	1:A:12:VAL:HB	4	0.19
(1,1569)	1:A:74:LYS:HG2	1:A:12:VAL:HB	8	0.19
(1,1476)	1:A:33:LEU:HD12	1:A:14:SER:HB2	1	0.19
(1,1476)	1:A:33:LEU:HD11	1:A:14:SER:HB2	1	0.19
(1,1476)	1:A:33:LEU:HD13	1:A:14:SER:HB2	1	0.19
(1,1422)	1:A:65:PRO:HG2	1:A:65:PRO:HA	8	0.19
(1,1422)	1:A:65:PRO:HG2	1:A:65:PRO:HA	10	0.19
(1,1325)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:36:CYS:H	1	0.19
(1,1236)	1:A:78:ARG:HB3	1:A:78:ARG:HD3	8	0.19
(1,1212)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:27:PRO:HA	1	0.19
(1,1212)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:27:PRO:HA	3	0.19
(1,1212)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:27:PRO:HA	5	0.19
(1,1212)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:27:PRO:HA	7	0.19
(1,1212)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:27:PRO:HA	8	0.19
(1,1212)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:27:PRO:HA	10	0.19
(1,1159)	1:A:29:PRO:HB3	1:A:57:MET:HA	10	0.19
(1,935)	1:A:73:GLY:H	1:A:16:ASN:HB2	5	0.18
(1,758)	1:A:64:LYS:H	1:A:64:LYS:HE2	1	0.18
(1,758)	1:A:64:LYS:H	1:A:64:LYS:HE3	1	0.18
(1,748)	1:A:96:ASP:H	1:A:96:ASP:HB3	9	0.18
(1,713)	1:A:53:ASP:HB3	1:A:74:LYS:HG3	6	0.18

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,549)	1:A:74:LYS:H	1:A:73:GLY:HA3	1	0.18
(1,549)	1:A:74:LYS:H	1:A:73:GLY:HA3	8	0.18
(1,534)	1:A:4:PRO:HD3	1:A:32:SER:HB3	8	0.18
(1,456)	1:A:38:ALA:HB2	1:A:35:GLN:HG2	3	0.18
(1,456)	1:A:38:ALA:HB2	1:A:35:GLN:HG3	3	0.18
(1,456)	1:A:38:ALA:HB1	1:A:35:GLN:HG2	3	0.18
(1,456)	1:A:38:ALA:HB1	1:A:35:GLN:HG3	3	0.18
(1,456)	1:A:38:ALA:HB3	1:A:35:GLN:HG2	3	0.18
(1,456)	1:A:38:ALA:HB3	1:A:35:GLN:HG3	3	0.18
(1,415)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:66:ASP:HB2	5	0.18
(1,415)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:66:ASP:HB2	5	0.18
(1,415)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:66:ASP:HB2	5	0.18
(1,396)	1:A:107:ALA:HB2	1:A:77:SER:HB2	4	0.18
(1,396)	1:A:107:ALA:HB1	1:A:77:SER:HB2	4	0.18
(1,396)	1:A:107:ALA:HB3	1:A:77:SER:HB2	4	0.18
(1,3522)	1:A:105:GLN:HE21	1:A:105:GLN:HB3	8	0.18
(1,3522)	1:A:105:GLN:HE21	1:A:105:GLN:HG3	8	0.18
(1,3507)	1:A:35:GLN:HE21	1:A:4:PRO:HG2	2	0.18
(1,3507)	1:A:35:GLN:HE21	1:A:4:PRO:HG3	2	0.18
(1,3507)	1:A:35:GLN:HE21	1:A:35:GLN:HB2	2	0.18
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:6:LYS:HD2	3	0.18
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:56:LYS:HD2	3	0.18
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:56:LYS:HD3	3	0.18
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:57:MET:HB2	3	0.18
(1,3457)	1:A:125:ASN:HD22	1:A:126:GLU:H	6	0.18
(1,3457)	1:A:127:HIS:H	1:A:125:ASN:HD22	6	0.18
(1,3411)	1:A:115:ALA:H	1:A:65:PRO:HD2	7	0.18
(1,3411)	1:A:115:ALA:H	1:A:113:CYS:HB3	7	0.18
(1,328)	1:A:100:ALA:HB2	1:A:101:MET:HA	10	0.18
(1,328)	1:A:100:ALA:HB1	1:A:101:MET:HA	10	0.18
(1,328)	1:A:100:ALA:HB3	1:A:101:MET:HA	10	0.18
(1,3265)	1:A:12:VAL:H	1:A:9:LEU:HB2	2	0.18
(1,3265)	1:A:12:VAL:H	1:A:105:GLN:HG2	2	0.18
(1,3149)	1:A:40:CYS:HB3	1:A:60:VAL:HG12	1	0.18
(1,3149)	1:A:40:CYS:HB3	1:A:60:VAL:HG11	1	0.18
(1,3149)	1:A:40:CYS:HB3	1:A:60:VAL:HG13	1	0.18
(1,3149)	1:A:46:CYS:HB2	1:A:60:VAL:HG12	1	0.18
(1,3149)	1:A:46:CYS:HB2	1:A:60:VAL:HG11	1	0.18
(1,3149)	1:A:46:CYS:HB2	1:A:60:VAL:HG13	1	0.18
(1,3149)	1:A:40:CYS:HB3	1:A:60:VAL:HG12	4	0.18
(1,3149)	1:A:40:CYS:HB3	1:A:60:VAL:HG11	4	0.18
(1,3149)	1:A:40:CYS:HB3	1:A:60:VAL:HG13	4	0.18

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3149)	1:A:46:CYS:HB2	1:A:60:VAL:HG12	4	0.18
(1,3149)	1:A:46:CYS:HB2	1:A:60:VAL:HG11	4	0.18
(1,3149)	1:A:46:CYS:HB2	1:A:60:VAL:HG13	4	0.18
(1,3088)	1:A:9:LEU:H	1:A:9:LEU:HD12	2	0.18
(1,3088)	1:A:9:LEU:H	1:A:9:LEU:HD11	2	0.18
(1,3088)	1:A:9:LEU:H	1:A:9:LEU:HD13	2	0.18
(1,3088)	1:A:9:LEU:HD12	1:A:33:LEU:H	2	0.18
(1,3088)	1:A:9:LEU:HD11	1:A:33:LEU:H	2	0.18
(1,3088)	1:A:9:LEU:HD13	1:A:33:LEU:H	2	0.18
(1,3088)	1:A:9:LEU:H	1:A:9:LEU:HD12	3	0.18
(1,3088)	1:A:9:LEU:H	1:A:9:LEU:HD11	3	0.18
(1,3088)	1:A:9:LEU:H	1:A:9:LEU:HD13	3	0.18
(1,3088)	1:A:9:LEU:HD12	1:A:33:LEU:H	3	0.18
(1,3088)	1:A:9:LEU:HD11	1:A:33:LEU:H	3	0.18
(1,3088)	1:A:9:LEU:HD13	1:A:33:LEU:H	3	0.18
(1,3086)	1:A:37:ALA:HA	1:A:41:LYS:HG2	9	0.18
(1,3086)	1:A:41:LYS:HG2	1:A:40:CYS:HB3	9	0.18
(1,3032)	1:A:27:PRO:HG2	1:A:28:VAL:H	5	0.18
(1,3032)	1:A:27:PRO:HG2	1:A:58:CYS:H	5	0.18
(1,2992)	1:A:49:PHE:H	1:A:48:HIS:HB3	1	0.18
(1,2992)	1:A:16:ASN:H	1:A:13:HIS:HB3	1	0.18
(1,2974)	1:A:25:GLY:HA2	1:A:26:GLU:HB2	4	0.18
(1,2974)	1:A:25:GLY:HA3	1:A:26:GLU:HB2	4	0.18
(1,2974)	1:A:98:MET:HG2	1:A:113:CYS:HA	4	0.18
(1,2974)	1:A:98:MET:HG2	1:A:119:CYS:HB3	4	0.18
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:12:VAL:HG12	9	0.18
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:12:VAL:HG11	9	0.18
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:12:VAL:HG13	9	0.18
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:76:ALA:HB2	9	0.18
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:76:ALA:HB1	9	0.18
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:76:ALA:HB3	9	0.18
(1,2825)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:57:MET:HB2	2	0.18
(1,2825)	1:A:107:ALA:HB2	1:A:108:ASP:HB2	2	0.18
(1,2825)	1:A:107:ALA:HB1	1:A:108:ASP:HB2	2	0.18
(1,2825)	1:A:107:ALA:HB3	1:A:108:ASP:HB2	2	0.18
(1,2824)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:44:ASP:HB2	7	0.18
(1,2824)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:44:ASP:HB2	7	0.18
(1,2824)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:44:ASP:HB2	7	0.18
(1,2824)	1:A:149:VAL:HG12	1:A:125:ASN:HB2	7	0.18
(1,2824)	1:A:149:VAL:HG11	1:A:125:ASN:HB2	7	0.18
(1,2824)	1:A:149:VAL:HG13	1:A:125:ASN:HB2	7	0.18
(1,2811)	1:A:128:ASP:HB2	1:A:130:LYS:HG2	2	0.18

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2811)	1:A:128:ASP:HB2	1:A:130:LYS:HG3	2	0.18
(1,2709)	1:A:148:GLY:HA2	1:A:146:VAL:HB	5	0.18
(1,2709)	1:A:148:GLY:HA2	1:A:147:LEU:HB3	5	0.18
(1,2652)	1:A:78:ARG:HA	1:A:37:ALA:HB2	7	0.18
(1,2652)	1:A:78:ARG:HA	1:A:37:ALA:HB1	7	0.18
(1,2652)	1:A:78:ARG:HA	1:A:37:ALA:HB3	7	0.18
(1,2652)	1:A:94:ALA:HB2	1:A:137:GLY:HA2	7	0.18
(1,2652)	1:A:94:ALA:HB1	1:A:137:GLY:HA2	7	0.18
(1,2652)	1:A:94:ALA:HB3	1:A:137:GLY:HA2	7	0.18
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG12	1:A:143:GLU:HB3	1	0.18
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG11	1:A:143:GLU:HB3	1	0.18
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG13	1:A:143:GLU:HB3	1	0.18
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG12	1:A:149:VAL:HB	1	0.18
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG11	1:A:149:VAL:HB	1	0.18
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG13	1:A:149:VAL:HB	1	0.18
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG12	1:A:143:GLU:HB3	2	0.18
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG11	1:A:143:GLU:HB3	2	0.18
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG13	1:A:143:GLU:HB3	2	0.18
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG12	1:A:149:VAL:HB	2	0.18
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG11	1:A:149:VAL:HB	2	0.18
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG13	1:A:149:VAL:HB	2	0.18
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG12	1:A:143:GLU:HB3	3	0.18
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG11	1:A:143:GLU:HB3	3	0.18
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG13	1:A:143:GLU:HB3	3	0.18
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG12	1:A:149:VAL:HB	3	0.18
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG11	1:A:149:VAL:HB	3	0.18
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG13	1:A:149:VAL:HB	3	0.18
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG12	1:A:143:GLU:HB3	7	0.18
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG11	1:A:143:GLU:HB3	7	0.18
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG13	1:A:143:GLU:HB3	7	0.18
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG12	1:A:149:VAL:HB	7	0.18
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG11	1:A:149:VAL:HB	7	0.18
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG13	1:A:149:VAL:HB	7	0.18
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG12	1:A:143:GLU:HB3	8	0.18
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG11	1:A:143:GLU:HB3	8	0.18
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG13	1:A:143:GLU:HB3	8	0.18
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG12	1:A:149:VAL:HB	8	0.18
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG11	1:A:149:VAL:HB	8	0.18
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG13	1:A:149:VAL:HB	8	0.18
(1,2544)	1:A:154:LYS:HA	1:A:120:GLU:HA	4	0.18
(1,2544)	1:A:154:LYS:HA	1:A:121:ILE:HA	4	0.18
(1,2532)	1:A:59:HIS:HD2	1:A:27:PRO:HG2	1	0.18

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2532)	1:A:59:HIS:HD2	1:A:57:MET:HB3	1	0.18
(1,2488)	1:A:68:TYR:HD1	1:A:20:ARG:HB2	5	0.18
(1,2488)	1:A:68:TYR:HD1	1:A:20:ARG:HB3	5	0.18
(1,2488)	1:A:68:TYR:HD2	1:A:20:ARG:HB2	5	0.18
(1,2488)	1:A:68:TYR:HD2	1:A:20:ARG:HB3	5	0.18
(1,2488)	1:A:142:LYS:HB3	1:A:91:TYR:HD1	5	0.18
(1,2488)	1:A:142:LYS:HB3	1:A:91:TYR:HD2	5	0.18
(1,2311)	1:A:112:ALA:H	1:A:65:PRO:HD2	6	0.18
(1,2269)	1:A:141:PHE:H	1:A:142:LYS:HB3	4	0.18
(1,223)	1:A:104:SER:H	1:A:13:HIS:HA	6	0.18
(1,178)	1:A:67:LEU:H	1:A:67:LEU:HD22	2	0.18
(1,178)	1:A:67:LEU:H	1:A:67:LEU:HD21	2	0.18
(1,178)	1:A:67:LEU:H	1:A:67:LEU:HD23	2	0.18
(1,1767)	1:A:82:ARG:H	1:A:82:ARG:HB3	9	0.18
(1,165)	1:A:150:THR:HG21	1:A:123:THR:HA	3	0.18
(1,165)	1:A:150:THR:HG22	1:A:123:THR:HA	3	0.18
(1,165)	1:A:150:THR:HG23	1:A:123:THR:HA	3	0.18
(1,1569)	1:A:74:LYS:HG2	1:A:12:VAL:HB	5	0.18
(1,1569)	1:A:74:LYS:HG2	1:A:12:VAL:HB	6	0.18
(1,1569)	1:A:74:LYS:HG2	1:A:12:VAL:HB	10	0.18
(1,1507)	1:A:122:PHE:H	1:A:121:ILE:HG12	1	0.18
(1,1507)	1:A:122:PHE:H	1:A:121:ILE:HG12	10	0.18
(1,1492)	1:A:74:LYS:H	1:A:70:LEU:HG	5	0.18
(1,1492)	1:A:74:LYS:H	1:A:70:LEU:HG	8	0.18
(1,1492)	1:A:74:LYS:H	1:A:70:LEU:HG	9	0.18
(1,1422)	1:A:65:PRO:HG2	1:A:65:PRO:HA	6	0.18
(1,1325)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:36:CYS:H	7	0.18
(1,1325)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:36:CYS:H	8	0.18
(1,1296)	1:A:56:LYS:HA	1:A:6:LYS:HD2	9	0.18
(1,1236)	1:A:78:ARG:HB3	1:A:78:ARG:HD3	6	0.18
(1,1212)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:27:PRO:HA	2	0.18
(1,1212)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:27:PRO:HA	4	0.18
(1,1212)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:27:PRO:HA	6	0.18
(1,1212)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:27:PRO:HA	9	0.18
(1,930)	1:A:16:ASN:HB3	1:A:16:ASN:HD21	3	0.17
(1,92)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:88:HIS:HA	1	0.17
(1,92)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:88:HIS:HA	8	0.17
(1,92)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:88:HIS:HA	10	0.17
(1,906)	1:A:24:ILE:HB	1:A:62:GLU:HG2	8	0.17
(1,838)	1:A:125:ASN:H	1:A:125:ASN:HB3	1	0.17
(1,838)	1:A:125:ASN:H	1:A:125:ASN:HB3	2	0.17
(1,838)	1:A:125:ASN:H	1:A:125:ASN:HB3	10	0.17

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,821)	1:A:52:ASN:HB3	1:A:51:TYR:HA	4	0.17
(1,773)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:65:PRO:HA	8	0.17
(1,758)	1:A:64:LYS:H	1:A:64:LYS:HE2	10	0.17
(1,758)	1:A:64:LYS:H	1:A:64:LYS:HE3	10	0.17
(1,733)	1:A:132:THR:H	1:A:131:CYS:HB2	2	0.17
(1,733)	1:A:132:THR:H	1:A:131:CYS:HB2	10	0.17
(1,717)	1:A:78:ARG:HD2	1:A:156:PHE:HD1	10	0.17
(1,717)	1:A:78:ARG:HD2	1:A:156:PHE:HD2	10	0.17
(1,713)	1:A:53:ASP:HB3	1:A:74:LYS:HG3	3	0.17
(1,713)	1:A:53:ASP:HB3	1:A:74:LYS:HG3	8	0.17
(1,713)	1:A:53:ASP:HB3	1:A:74:LYS:HG3	10	0.17
(1,688)	1:A:133:PHE:HB2	1:A:98:MET:HG3	2	0.17
(1,688)	1:A:133:PHE:HB2	1:A:98:MET:HG3	6	0.17
(1,658)	1:A:50:THR:H	1:A:49:PHE:HB3	5	0.17
(1,658)	1:A:50:THR:H	1:A:49:PHE:HB3	9	0.17
(1,556)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:70:LEU:HD12	2	0.17
(1,556)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:70:LEU:HD11	2	0.17
(1,556)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:70:LEU:HD13	2	0.17
(1,549)	1:A:74:LYS:H	1:A:73:GLY:HA3	6	0.17
(1,549)	1:A:74:LYS:H	1:A:73:GLY:HA3	7	0.17
(1,456)	1:A:38:ALA:HB2	1:A:35:GLN:HG2	7	0.17
(1,456)	1:A:38:ALA:HB2	1:A:35:GLN:HG3	7	0.17
(1,456)	1:A:38:ALA:HB1	1:A:35:GLN:HG2	7	0.17
(1,456)	1:A:38:ALA:HB1	1:A:35:GLN:HG3	7	0.17
(1,456)	1:A:38:ALA:HB3	1:A:35:GLN:HG2	7	0.17
(1,456)	1:A:38:ALA:HB3	1:A:35:GLN:HG3	7	0.17
(1,415)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:66:ASP:HB2	4	0.17
(1,415)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:66:ASP:HB2	4	0.17
(1,415)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:66:ASP:HB2	4	0.17
(1,380)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:65:PRO:HG3	1	0.17
(1,380)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:65:PRO:HG3	1	0.17
(1,380)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:65:PRO:HG3	1	0.17
(1,3522)	1:A:105:GLN:HE21	1:A:105:GLN:HB3	1	0.17
(1,3522)	1:A:105:GLN:HE21	1:A:105:GLN:HG3	1	0.17
(1,3522)	1:A:105:GLN:HE21	1:A:105:GLN:HB3	3	0.17
(1,3522)	1:A:105:GLN:HE21	1:A:105:GLN:HG3	3	0.17
(1,3522)	1:A:105:GLN:HE21	1:A:105:GLN:HB3	7	0.17
(1,3522)	1:A:105:GLN:HE21	1:A:105:GLN:HG3	7	0.17
(1,3507)	1:A:35:GLN:HE21	1:A:4:PRO:HG2	9	0.17
(1,3507)	1:A:35:GLN:HE21	1:A:4:PRO:HG3	9	0.17
(1,3507)	1:A:35:GLN:HE21	1:A:35:GLN:HB2	9	0.17
(1,3457)	1:A:125:ASN:HD22	1:A:126:GLU:H	7	0.17

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3457)	1:A:127:HIS:H	1:A:125:ASN:HD22	7	0.17
(1,329)	1:A:100:ALA:HB2	1:A:130:LYS:HE2	8	0.17
(1,329)	1:A:100:ALA:HB1	1:A:130:LYS:HE2	8	0.17
(1,329)	1:A:100:ALA:HB3	1:A:130:LYS:HE2	8	0.17
(1,3265)	1:A:12:VAL:H	1:A:9:LEU:HB2	5	0.17
(1,3265)	1:A:12:VAL:H	1:A:105:GLN:HG2	5	0.17
(1,3265)	1:A:12:VAL:H	1:A:9:LEU:HB2	8	0.17
(1,3265)	1:A:12:VAL:H	1:A:105:GLN:HG2	8	0.17
(1,3220)	1:A:13:HIS:H	1:A:12:VAL:H	4	0.17
(1,3220)	1:A:13:HIS:H	1:A:13:HIS:HD2	4	0.17
(1,3149)	1:A:40:CYS:HB3	1:A:60:VAL:HG12	5	0.17
(1,3149)	1:A:40:CYS:HB3	1:A:60:VAL:HG11	5	0.17
(1,3149)	1:A:40:CYS:HB3	1:A:60:VAL:HG13	5	0.17
(1,3149)	1:A:46:CYS:HB2	1:A:60:VAL:HG12	5	0.17
(1,3149)	1:A:46:CYS:HB2	1:A:60:VAL:HG11	5	0.17
(1,3149)	1:A:46:CYS:HB2	1:A:60:VAL:HG13	5	0.17
(1,3149)	1:A:40:CYS:HB3	1:A:60:VAL:HG12	7	0.17
(1,3149)	1:A:40:CYS:HB3	1:A:60:VAL:HG11	7	0.17
(1,3149)	1:A:40:CYS:HB3	1:A:60:VAL:HG13	7	0.17
(1,3149)	1:A:46:CYS:HB2	1:A:60:VAL:HG12	7	0.17
(1,3149)	1:A:46:CYS:HB2	1:A:60:VAL:HG11	7	0.17
(1,3149)	1:A:46:CYS:HB2	1:A:60:VAL:HG13	7	0.17
(1,3149)	1:A:40:CYS:HB3	1:A:60:VAL:HG12	9	0.17
(1,3149)	1:A:40:CYS:HB3	1:A:60:VAL:HG11	9	0.17
(1,3149)	1:A:40:CYS:HB3	1:A:60:VAL:HG13	9	0.17
(1,3149)	1:A:46:CYS:HB2	1:A:60:VAL:HG12	9	0.17
(1,3149)	1:A:46:CYS:HB2	1:A:60:VAL:HG11	9	0.17
(1,3149)	1:A:46:CYS:HB2	1:A:60:VAL:HG13	9	0.17
(1,3092)	1:A:11:CYS:H	1:A:76:ALA:HB2	1	0.17
(1,3092)	1:A:11:CYS:H	1:A:76:ALA:HB1	1	0.17
(1,3092)	1:A:11:CYS:H	1:A:76:ALA:HB3	1	0.17
(1,3092)	1:A:49:PHE:H	1:A:76:ALA:HB2	1	0.17
(1,3092)	1:A:49:PHE:H	1:A:76:ALA:HB1	1	0.17
(1,3092)	1:A:49:PHE:H	1:A:76:ALA:HB3	1	0.17
(1,3092)	1:A:11:CYS:H	1:A:76:ALA:HB2	2	0.17
(1,3092)	1:A:11:CYS:H	1:A:76:ALA:HB1	2	0.17
(1,3092)	1:A:11:CYS:H	1:A:76:ALA:HB3	2	0.17
(1,3092)	1:A:49:PHE:H	1:A:76:ALA:HB2	2	0.17
(1,3092)	1:A:49:PHE:H	1:A:76:ALA:HB1	2	0.17
(1,3092)	1:A:49:PHE:H	1:A:76:ALA:HB3	2	0.17
(1,3092)	1:A:11:CYS:H	1:A:76:ALA:HB2	5	0.17
(1,3092)	1:A:11:CYS:H	1:A:76:ALA:HB1	5	0.17

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3092)	1:A:11:CYS:H	1:A:76:ALA:HB3	5	0.17
(1,3092)	1:A:49:PHE:H	1:A:76:ALA:HB2	5	0.17
(1,3092)	1:A:49:PHE:H	1:A:76:ALA:HB1	5	0.17
(1,3092)	1:A:49:PHE:H	1:A:76:ALA:HB3	5	0.17
(1,3092)	1:A:11:CYS:H	1:A:76:ALA:HB2	6	0.17
(1,3092)	1:A:11:CYS:H	1:A:76:ALA:HB1	6	0.17
(1,3092)	1:A:11:CYS:H	1:A:76:ALA:HB3	6	0.17
(1,3092)	1:A:49:PHE:H	1:A:76:ALA:HB2	6	0.17
(1,3092)	1:A:49:PHE:H	1:A:76:ALA:HB1	6	0.17
(1,3092)	1:A:49:PHE:H	1:A:76:ALA:HB3	6	0.17
(1,3092)	1:A:11:CYS:H	1:A:76:ALA:HB2	9	0.17
(1,3092)	1:A:11:CYS:H	1:A:76:ALA:HB1	9	0.17
(1,3092)	1:A:11:CYS:H	1:A:76:ALA:HB3	9	0.17
(1,3092)	1:A:49:PHE:H	1:A:76:ALA:HB2	9	0.17
(1,3092)	1:A:49:PHE:H	1:A:76:ALA:HB1	9	0.17
(1,3092)	1:A:49:PHE:H	1:A:76:ALA:HB3	9	0.17
(1,3092)	1:A:11:CYS:H	1:A:76:ALA:HB2	10	0.17
(1,3092)	1:A:11:CYS:H	1:A:76:ALA:HB1	10	0.17
(1,3092)	1:A:11:CYS:H	1:A:76:ALA:HB3	10	0.17
(1,3092)	1:A:49:PHE:H	1:A:76:ALA:HB2	10	0.17
(1,3092)	1:A:49:PHE:H	1:A:76:ALA:HB1	10	0.17
(1,3092)	1:A:49:PHE:H	1:A:76:ALA:HB3	10	0.17
(1,3088)	1:A:9:LEU:H	1:A:9:LEU:HD12	5	0.17
(1,3088)	1:A:9:LEU:H	1:A:9:LEU:HD11	5	0.17
(1,3088)	1:A:9:LEU:H	1:A:9:LEU:HD13	5	0.17
(1,3088)	1:A:9:LEU:HD12	1:A:33:LEU:H	5	0.17
(1,3088)	1:A:9:LEU:HD11	1:A:33:LEU:H	5	0.17
(1,3088)	1:A:9:LEU:HD13	1:A:33:LEU:H	5	0.17
(1,3074)	1:A:78:ARG:HA	1:A:78:ARG:HG2	10	0.17
(1,3074)	1:A:78:ARG:HG2	1:A:79:SER:HB2	10	0.17
(1,2998)	1:A:87:GLN:H	1:A:87:GLN:HB3	5	0.17
(1,2998)	1:A:32:SER:H	1:A:35:GLN:HB2	5	0.17
(1,2945)	1:A:102:VAL:HB	1:A:17:LYS:HD2	1	0.17
(1,2945)	1:A:102:VAL:HB	1:A:130:LYS:HG2	1	0.17
(1,2945)	1:A:102:VAL:HB	1:A:130:LYS:HG3	1	0.17
(1,2901)	1:A:22:PRO:HD3	1:A:62:GLU:HG3	3	0.17
(1,2901)	1:A:129:GLN:HG3	1:A:126:GLU:HA	3	0.17
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG22	6	0.17
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG21	6	0.17
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG23	6	0.17
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG12	6	0.17
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG11	6	0.17

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG13	6	0.17
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:33:LEU:HD22	6	0.17
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:33:LEU:HD21	6	0.17
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:33:LEU:HD23	6	0.17
(1,2892)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HE2	4	0.17
(1,2892)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HE3	4	0.17
(1,2892)	1:A:80:CYS:HB2	1:A:11:CYS:HB2	4	0.17
(1,2850)	1:A:101:MET:HB3	1:A:99:THR:HG21	8	0.17
(1,2850)	1:A:101:MET:HB3	1:A:99:THR:HG22	8	0.17
(1,2850)	1:A:101:MET:HB3	1:A:99:THR:HG23	8	0.17
(1,2850)	1:A:100:ALA:HB2	1:A:101:MET:HB3	8	0.17
(1,2850)	1:A:100:ALA:HB1	1:A:101:MET:HB3	8	0.17
(1,2850)	1:A:100:ALA:HB3	1:A:101:MET:HB3	8	0.17
(1,2850)	1:A:101:MET:HB3	1:A:99:THR:HG21	10	0.17
(1,2850)	1:A:101:MET:HB3	1:A:99:THR:HG22	10	0.17
(1,2850)	1:A:101:MET:HB3	1:A:99:THR:HG23	10	0.17
(1,2850)	1:A:100:ALA:HB2	1:A:101:MET:HB3	10	0.17
(1,2850)	1:A:100:ALA:HB1	1:A:101:MET:HB3	10	0.17
(1,2850)	1:A:100:ALA:HB3	1:A:101:MET:HB3	10	0.17
(1,2825)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:57:MET:HB2	6	0.17
(1,2825)	1:A:107:ALA:HB2	1:A:108:ASP:HB2	6	0.17
(1,2825)	1:A:107:ALA:HB1	1:A:108:ASP:HB2	6	0.17
(1,2825)	1:A:107:ALA:HB3	1:A:108:ASP:HB2	6	0.17
(1,2811)	1:A:128:ASP:HB2	1:A:130:LYS:HG2	1	0.17
(1,2811)	1:A:128:ASP:HB2	1:A:130:LYS:HG3	1	0.17
(1,2784)	1:A:101:MET:H	1:A:130:LYS:HE2	5	0.17
(1,2784)	1:A:130:LYS:HE3	1:A:125:ASN:H	5	0.17
(1,2784)	1:A:101:MET:H	1:A:131:CYS:HB3	5	0.17
(1,2748)	1:A:82:ARG:HD3	1:A:82:ARG:HA	2	0.17
(1,2748)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:THR:HB	2	0.17
(1,2713)	1:A:148:GLY:HA2	1:A:147:LEU:HB2	1	0.17
(1,2713)	1:A:160:GLY:HA3	1:A:114:ALA:HB2	1	0.17
(1,2713)	1:A:160:GLY:HA3	1:A:114:ALA:HB1	1	0.17
(1,2713)	1:A:160:GLY:HA3	1:A:114:ALA:HB3	1	0.17
(1,261)	1:A:105:GLN:HE22	1:A:13:HIS:HA	4	0.17
(1,2595)	1:A:75:THR:HG21	1:A:13:HIS:HB2	5	0.17
(1,2595)	1:A:75:THR:HG22	1:A:13:HIS:HB2	5	0.17
(1,2595)	1:A:75:THR:HG23	1:A:13:HIS:HB2	5	0.17
(1,2595)	1:A:75:THR:HG21	1:A:13:HIS:HB3	5	0.17
(1,2595)	1:A:75:THR:HG22	1:A:13:HIS:HB3	5	0.17
(1,2595)	1:A:75:THR:HG23	1:A:13:HIS:HB3	5	0.17
(1,2595)	1:A:75:THR:HG21	1:A:48:HIS:HB3	5	0.17

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2595)	1:A:75:THR:HG22	1:A:48:HIS:HB3	5	0.17
(1,2595)	1:A:75:THR:HG23	1:A:48:HIS:HB3	5	0.17
(1,2595)	1:A:75:THR:HG21	1:A:13:HIS:HB2	6	0.17
(1,2595)	1:A:75:THR:HG22	1:A:13:HIS:HB2	6	0.17
(1,2595)	1:A:75:THR:HG23	1:A:13:HIS:HB2	6	0.17
(1,2595)	1:A:75:THR:HG21	1:A:13:HIS:HB3	6	0.17
(1,2595)	1:A:75:THR:HG22	1:A:13:HIS:HB3	6	0.17
(1,2595)	1:A:75:THR:HG23	1:A:13:HIS:HB3	6	0.17
(1,2595)	1:A:75:THR:HG21	1:A:48:HIS:HB3	6	0.17
(1,2595)	1:A:75:THR:HG22	1:A:48:HIS:HB3	6	0.17
(1,2595)	1:A:75:THR:HG23	1:A:48:HIS:HB3	6	0.17
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG12	1:A:143:GLU:HB3	9	0.17
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG11	1:A:143:GLU:HB3	9	0.17
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG13	1:A:143:GLU:HB3	9	0.17
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG12	1:A:149:VAL:HB	9	0.17
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG11	1:A:149:VAL:HB	9	0.17
(1,2583)	1:A:146:VAL:HG13	1:A:149:VAL:HB	9	0.17
(1,2568)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:60:VAL:HB	1	0.17
(1,2568)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:60:VAL:HB	1	0.17
(1,2568)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:60:VAL:HB	1	0.17
(1,2568)	1:A:149:VAL:HG12	1:A:125:ASN:HB2	1	0.17
(1,2568)	1:A:149:VAL:HG11	1:A:125:ASN:HB2	1	0.17
(1,2568)	1:A:149:VAL:HG13	1:A:125:ASN:HB2	1	0.17
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD22	1:A:17:LYS:HE3	1	0.17
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD21	1:A:17:LYS:HE3	1	0.17
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD23	1:A:17:LYS:HE3	1	0.17
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD22	1:A:48:HIS:HB2	1	0.17
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD21	1:A:48:HIS:HB2	1	0.17
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD23	1:A:48:HIS:HB2	1	0.17
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD22	1:A:68:TYR:HB2	1	0.17
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD21	1:A:68:TYR:HB2	1	0.17
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD23	1:A:68:TYR:HB2	1	0.17
(1,2410)	1:A:31:VAL:H	1:A:6:LYS:H	3	0.17
(1,2317)	1:A:125:ASN:HD22	1:A:128:ASP:HB2	10	0.17
(1,2252)	1:A:113:CYS:H	1:A:122:PHE:HB2	8	0.17
(1,2180)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB3	8	0.17
(1,2180)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB3	10	0.17
(1,1782)	1:A:52:ASN:H	1:A:57:MET:HB3	4	0.17
(1,178)	1:A:67:LEU:H	1:A:67:LEU:HD22	1	0.17
(1,178)	1:A:67:LEU:H	1:A:67:LEU:HD21	1	0.17
(1,178)	1:A:67:LEU:H	1:A:67:LEU:HD23	1	0.17
(1,178)	1:A:67:LEU:H	1:A:67:LEU:HD22	7	0.17

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,178)	1:A:67:LEU:H	1:A:67:LEU:HD21	7	0.17
(1,178)	1:A:67:LEU:H	1:A:67:LEU:HD23	7	0.17
(1,165)	1:A:150:THR:HG21	1:A:123:THR:HA	8	0.17
(1,165)	1:A:150:THR:HG22	1:A:123:THR:HA	8	0.17
(1,165)	1:A:150:THR:HG23	1:A:123:THR:HA	8	0.17
(1,1569)	1:A:74:LYS:HG2	1:A:12:VAL:HB	7	0.17
(1,1492)	1:A:74:LYS:H	1:A:70:LEU:HG	1	0.17
(1,1492)	1:A:74:LYS:H	1:A:70:LEU:HG	7	0.17
(1,1492)	1:A:74:LYS:H	1:A:70:LEU:HG	10	0.17
(1,1422)	1:A:65:PRO:HG2	1:A:65:PRO:HA	1	0.17
(1,1304)	1:A:6:LYS:HD3	1:A:56:LYS:HB2	1	0.17
(1,1251)	1:A:65:PRO:HB2	1:A:75:THR:HG21	2	0.17
(1,1251)	1:A:65:PRO:HB2	1:A:75:THR:HG22	2	0.17
(1,1251)	1:A:65:PRO:HB2	1:A:75:THR:HG23	2	0.17
(1,1236)	1:A:78:ARG:HB3	1:A:78:ARG:HD3	3	0.17
(1,1236)	1:A:78:ARG:HB3	1:A:78:ARG:HD3	9	0.17
(1,1159)	1:A:29:PRO:HB3	1:A:57:MET:HA	3	0.17
(1,1027)	1:A:75:THR:HB	1:A:18:GLY:HA3	3	0.17
(1,935)	1:A:73:GLY:H	1:A:16:ASN:HB2	10	0.16
(1,92)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:88:HIS:HA	2	0.16
(1,92)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:88:HIS:HA	3	0.16
(1,92)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:88:HIS:HA	4	0.16
(1,92)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:88:HIS:HA	5	0.16
(1,92)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:88:HIS:HA	6	0.16
(1,92)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:88:HIS:HA	7	0.16
(1,92)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:88:HIS:HA	9	0.16
(1,899)	1:A:16:ASN:H	1:A:15:ASP:HB3	8	0.16
(1,892)	1:A:101:MET:HB3	1:A:101:MET:HG3	7	0.16
(1,888)	1:A:101:MET:HB3	1:A:102:VAL:H	7	0.16
(1,838)	1:A:125:ASN:H	1:A:125:ASN:HB3	3	0.16
(1,773)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:65:PRO:HA	6	0.16
(1,773)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:65:PRO:HA	7	0.16
(1,748)	1:A:96:ASP:H	1:A:96:ASP:HB3	10	0.16
(1,713)	1:A:53:ASP:HB3	1:A:74:LYS:HG3	4	0.16
(1,713)	1:A:53:ASP:HB3	1:A:74:LYS:HG3	5	0.16
(1,688)	1:A:133:PHE:HB2	1:A:98:MET:HG3	3	0.16
(1,688)	1:A:133:PHE:HB2	1:A:98:MET:HG3	9	0.16
(1,60)	1:A:85:PHE:HD1	1:A:82:ARG:HB2	10	0.16
(1,60)	1:A:85:PHE:HD2	1:A:82:ARG:HB2	10	0.16
(1,556)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:70:LEU:HD12	9	0.16
(1,556)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:70:LEU:HD11	9	0.16
(1,556)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:70:LEU:HD13	9	0.16

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,404)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:9:LEU:HD12	1	0.16
(1,404)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:9:LEU:HD11	1	0.16
(1,404)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:9:LEU:HD13	1	0.16
(1,404)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:9:LEU:HD12	1	0.16
(1,404)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:9:LEU:HD11	1	0.16
(1,404)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:9:LEU:HD13	1	0.16
(1,404)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:9:LEU:HD12	1	0.16
(1,404)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:9:LEU:HD11	1	0.16
(1,404)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:9:LEU:HD13	1	0.16
(1,3522)	1:A:105:GLN:HE21	1:A:105:GLN:HB3	2	0.16
(1,3522)	1:A:105:GLN:HE21	1:A:105:GLN:HG3	2	0.16
(1,3522)	1:A:105:GLN:HE21	1:A:105:GLN:HB3	9	0.16
(1,3522)	1:A:105:GLN:HE21	1:A:105:GLN:HG3	9	0.16
(1,3457)	1:A:125:ASN:HD22	1:A:126:GLU:H	1	0.16
(1,3457)	1:A:127:HIS:H	1:A:125:ASN:HD22	1	0.16
(1,3457)	1:A:125:ASN:HD22	1:A:126:GLU:H	3	0.16
(1,3457)	1:A:127:HIS:H	1:A:125:ASN:HD22	3	0.16
(1,3350)	1:A:127:HIS:H	1:A:128:ASP:HB2	9	0.16
(1,3350)	1:A:127:HIS:H	1:A:129:GLN:HG2	9	0.16
(1,3347)	1:A:101:MET:H	1:A:130:LYS:HE2	6	0.16
(1,3347)	1:A:101:MET:H	1:A:131:CYS:HB3	6	0.16
(1,3149)	1:A:40:CYS:HB3	1:A:60:VAL:HG12	2	0.16
(1,3149)	1:A:40:CYS:HB3	1:A:60:VAL:HG11	2	0.16
(1,3149)	1:A:40:CYS:HB3	1:A:60:VAL:HG13	2	0.16
(1,3149)	1:A:46:CYS:HB2	1:A:60:VAL:HG12	2	0.16
(1,3149)	1:A:46:CYS:HB2	1:A:60:VAL:HG11	2	0.16
(1,3149)	1:A:46:CYS:HB2	1:A:60:VAL:HG13	2	0.16
(1,3127)	1:A:123:THR:HG21	1:A:92:GLU:HG2	5	0.16
(1,3127)	1:A:123:THR:HG21	1:A:92:GLU:HG3	5	0.16
(1,3127)	1:A:123:THR:HG22	1:A:92:GLU:HG2	5	0.16
(1,3127)	1:A:123:THR:HG22	1:A:92:GLU:HG3	5	0.16
(1,3127)	1:A:123:THR:HG23	1:A:92:GLU:HG2	5	0.16
(1,3127)	1:A:123:THR:HG23	1:A:92:GLU:HG3	5	0.16
(1,3127)	1:A:132:THR:HG21	1:A:92:GLU:HG2	5	0.16
(1,3127)	1:A:132:THR:HG21	1:A:92:GLU:HG3	5	0.16
(1,3127)	1:A:132:THR:HG22	1:A:92:GLU:HG2	5	0.16
(1,3127)	1:A:132:THR:HG22	1:A:92:GLU:HG3	5	0.16
(1,3127)	1:A:132:THR:HG23	1:A:92:GLU:HG2	5	0.16
(1,3127)	1:A:132:THR:HG23	1:A:92:GLU:HG3	5	0.16
(1,3095)	1:A:13:HIS:HB2	1:A:76:ALA:HB2	10	0.16
(1,3095)	1:A:13:HIS:HB2	1:A:76:ALA:HB1	10	0.16
(1,3095)	1:A:13:HIS:HB2	1:A:76:ALA:HB3	10	0.16

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3095)	1:A:13:HIS:HB3	1:A:76:ALA:HB2	10	0.16
(1,3095)	1:A:13:HIS:HB3	1:A:76:ALA:HB1	10	0.16
(1,3095)	1:A:13:HIS:HB3	1:A:76:ALA:HB3	10	0.16
(1,3044)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:87:GLN:HB2	3	0.16
(1,3044)	1:A:146:VAL:HB	1:A:88:HIS:HB2	3	0.16
(1,3044)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:147:LEU:HG	3	0.16
(1,3036)	1:A:55:SER:HB3	1:A:52:ASN:HB2	7	0.16
(1,3036)	1:A:55:SER:HB3	1:A:57:MET:HG2	7	0.16
(1,3036)	1:A:55:SER:HB3	1:A:57:MET:HG3	7	0.16
(1,3032)	1:A:27:PRO:HG2	1:A:28:VAL:H	7	0.16
(1,3032)	1:A:27:PRO:HG2	1:A:58:CYS:H	7	0.16
(1,2992)	1:A:49:PHE:H	1:A:48:HIS:HB3	2	0.16
(1,2992)	1:A:16:ASN:H	1:A:13:HIS:HB3	2	0.16
(1,2945)	1:A:102:VAL:HB	1:A:17:LYS:HD2	3	0.16
(1,2945)	1:A:102:VAL:HB	1:A:130:LYS:HG2	3	0.16
(1,2945)	1:A:102:VAL:HB	1:A:130:LYS:HG3	3	0.16
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG22	2	0.16
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG21	2	0.16
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG23	2	0.16
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG12	2	0.16
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG11	2	0.16
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG13	2	0.16
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:33:LEU:HD22	2	0.16
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:33:LEU:HD21	2	0.16
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:33:LEU:HD23	2	0.16
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG22	5	0.16
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG21	5	0.16
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG23	5	0.16
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG12	5	0.16
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG11	5	0.16
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG13	5	0.16
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:33:LEU:HD22	5	0.16
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:33:LEU:HD21	5	0.16
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:33:LEU:HD23	5	0.16
(1,2892)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HE2	5	0.16
(1,2892)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HE3	5	0.16
(1,2892)	1:A:80:CYS:HB2	1:A:11:CYS:HB2	5	0.16
(1,2825)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:57:MET:HB2	10	0.16
(1,2825)	1:A:107:ALA:HB2	1:A:108:ASP:HB2	10	0.16
(1,2825)	1:A:107:ALA:HB1	1:A:108:ASP:HB2	10	0.16
(1,2825)	1:A:107:ALA:HB3	1:A:108:ASP:HB2	10	0.16
(1,2824)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:44:ASP:HB2	5	0.16

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2824)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:44:ASP:HB2	5	0.16
(1,2824)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:44:ASP:HB2	5	0.16
(1,2824)	1:A:149:VAL:HG12	1:A:125:ASN:HB2	5	0.16
(1,2824)	1:A:149:VAL:HG11	1:A:125:ASN:HB2	5	0.16
(1,2824)	1:A:149:VAL:HG13	1:A:125:ASN:HB2	5	0.16
(1,2785)	1:A:130:LYS:HE2	1:A:125:ASN:HD21	5	0.16
(1,2785)	1:A:130:LYS:HE3	1:A:125:ASN:HD21	5	0.16
(1,2785)	1:A:131:CYS:HB3	1:A:112:ALA:H	5	0.16
(1,2784)	1:A:101:MET:H	1:A:130:LYS:HE2	10	0.16
(1,2784)	1:A:130:LYS:HE3	1:A:125:ASN:H	10	0.16
(1,2784)	1:A:101:MET:H	1:A:131:CYS:HB3	10	0.16
(1,2778)	1:A:17:LYS:HE3	1:A:17:LYS:HA	7	0.16
(1,2778)	1:A:113:CYS:HB2	1:A:133:PHE:HA	7	0.16
(1,2713)	1:A:148:GLY:HA2	1:A:147:LEU:HB2	3	0.16
(1,2713)	1:A:160:GLY:HA3	1:A:114:ALA:HB2	3	0.16
(1,2713)	1:A:160:GLY:HA3	1:A:114:ALA:HB1	3	0.16
(1,2713)	1:A:160:GLY:HA3	1:A:114:ALA:HB3	3	0.16
(1,2702)	1:A:117:PRO:HD3	1:A:116:ASP:HB3	2	0.16
(1,2702)	1:A:116:ASP:HB3	1:A:118:SER:HB2	2	0.16
(1,2696)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:64:LYS:HG2	8	0.16
(1,2696)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:65:PRO:HB3	8	0.16
(1,2690)	1:A:94:ALA:HA	1:A:134:LYS:HB3	6	0.16
(1,2690)	1:A:94:ALA:HA	1:A:95:PRO:HG2	6	0.16
(1,264)	1:A:136:ARG:HA	1:A:137:GLY:HA2	3	0.16
(1,264)	1:A:136:ARG:HA	1:A:137:GLY:HA2	5	0.16
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:33:LEU:HA	1	0.16
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:33:LEU:HA	1	0.16
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:33:LEU:HA	1	0.16
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:36:CYS:HB2	1	0.16
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:36:CYS:HB2	1	0.16
(1,2636)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:36:CYS:HB2	1	0.16
(1,2636)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:122:PHE:HB2	1	0.16
(1,2636)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:122:PHE:HB2	1	0.16
(1,2636)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:122:PHE:HB2	1	0.16
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG12	1:A:134:LYS:HB2	5	0.16
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG11	1:A:134:LYS:HB2	5	0.16
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG13	1:A:134:LYS:HB2	5	0.16
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG12	1:A:134:LYS:HG3	5	0.16
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG11	1:A:134:LYS:HG3	5	0.16
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG13	1:A:134:LYS:HG3	5	0.16
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG12	1:A:134:LYS:HB2	6	0.16
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG11	1:A:134:LYS:HB2	6	0.16

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG13	1:A:134:LYS:HB2	6	0.16
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG12	1:A:134:LYS:HG3	6	0.16
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG11	1:A:134:LYS:HG3	6	0.16
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG13	1:A:134:LYS:HG3	6	0.16
(1,2568)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:60:VAL:HB	9	0.16
(1,2568)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:60:VAL:HB	9	0.16
(1,2568)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:60:VAL:HB	9	0.16
(1,2568)	1:A:149:VAL:HG12	1:A:125:ASN:HB2	9	0.16
(1,2568)	1:A:149:VAL:HG11	1:A:125:ASN:HB2	9	0.16
(1,2568)	1:A:149:VAL:HG13	1:A:125:ASN:HB2	9	0.16
(1,2568)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:60:VAL:HB	10	0.16
(1,2568)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:60:VAL:HB	10	0.16
(1,2568)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:60:VAL:HB	10	0.16
(1,2568)	1:A:149:VAL:HG12	1:A:125:ASN:HB2	10	0.16
(1,2568)	1:A:149:VAL:HG11	1:A:125:ASN:HB2	10	0.16
(1,2568)	1:A:149:VAL:HG13	1:A:125:ASN:HB2	10	0.16
(1,246)	1:A:119:CYS:HA	1:A:116:ASP:HB3	9	0.16
(1,2317)	1:A:125:ASN:HD22	1:A:128:ASP:HB2	1	0.16
(1,223)	1:A:104:SER:H	1:A:13:HIS:HA	2	0.16
(1,1782)	1:A:52:ASN:H	1:A:57:MET:HB3	2	0.16
(1,1782)	1:A:52:ASN:H	1:A:57:MET:HB3	5	0.16
(1,178)	1:A:67:LEU:H	1:A:67:LEU:HD22	6	0.16
(1,178)	1:A:67:LEU:H	1:A:67:LEU:HD21	6	0.16
(1,178)	1:A:67:LEU:H	1:A:67:LEU:HD23	6	0.16
(1,173)	1:A:35:GLN:HE21	1:A:31:VAL:HG12	9	0.16
(1,173)	1:A:35:GLN:HE21	1:A:31:VAL:HG11	9	0.16
(1,173)	1:A:35:GLN:HE21	1:A:31:VAL:HG13	9	0.16
(1,1693)	1:A:20:ARG:HG2	1:A:19:SER:HA	2	0.16
(1,1693)	1:A:20:ARG:HG2	1:A:19:SER:HA	7	0.16
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:123:THR:HG21	2	0.16
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:123:THR:HG22	2	0.16
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:123:THR:HG23	2	0.16
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:123:THR:HG21	2	0.16
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:123:THR:HG22	2	0.16
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:123:THR:HG23	2	0.16
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:123:THR:HG21	2	0.16
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:123:THR:HG22	2	0.16
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:123:THR:HG23	2	0.16
(1,1569)	1:A:74:LYS:HG2	1:A:12:VAL:HB	1	0.16
(1,1531)	1:A:61:LYS:HG3	1:A:62:GLU:H	4	0.16
(1,1507)	1:A:122:PHE:H	1:A:121:ILE:HG12	7	0.16
(1,1507)	1:A:122:PHE:H	1:A:121:ILE:HG12	9	0.16

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1492)	1:A:74:LYS:H	1:A:70:LEU:HG	6	0.16
(1,1422)	1:A:65:PRO:HG2	1:A:65:PRO:HA	3	0.16
(1,1422)	1:A:65:PRO:HG2	1:A:65:PRO:HA	7	0.16
(1,1421)	1:A:108:ASP:HA	1:A:65:PRO:HG2	5	0.16
(1,1276)	1:A:143:GLU:H	1:A:142:LYS:HD2	4	0.16
(1,1276)	1:A:143:GLU:H	1:A:142:LYS:HD3	4	0.16
(1,1276)	1:A:143:GLU:H	1:A:142:LYS:HD2	5	0.16
(1,1276)	1:A:143:GLU:H	1:A:142:LYS:HD3	5	0.16
(1,127)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:88:HIS:HD2	10	0.16
(1,1236)	1:A:78:ARG:HB3	1:A:78:ARG:HD3	5	0.16
(1,1159)	1:A:29:PRO:HB3	1:A:57:MET:HA	9	0.16
(1,1059)	1:A:32:SER:H	1:A:35:GLN:HG2	7	0.16
(1,1059)	1:A:32:SER:H	1:A:35:GLN:HG3	7	0.16
(1,906)	1:A:24:ILE:HB	1:A:62:GLU:HG2	2	0.15
(1,906)	1:A:24:ILE:HB	1:A:62:GLU:HG2	6	0.15
(1,906)	1:A:24:ILE:HB	1:A:62:GLU:HG2	7	0.15
(1,906)	1:A:24:ILE:HB	1:A:62:GLU:HG2	10	0.15
(1,838)	1:A:125:ASN:H	1:A:125:ASN:HB3	4	0.15
(1,838)	1:A:125:ASN:H	1:A:125:ASN:HB3	5	0.15
(1,838)	1:A:125:ASN:H	1:A:125:ASN:HB3	6	0.15
(1,838)	1:A:125:ASN:H	1:A:125:ASN:HB3	7	0.15
(1,838)	1:A:125:ASN:H	1:A:125:ASN:HB3	9	0.15
(1,830)	1:A:57:MET:H	1:A:52:ASN:HB2	8	0.15
(1,784)	1:A:147:LEU:HA	1:A:147:LEU:HB2	2	0.15
(1,784)	1:A:147:LEU:HA	1:A:147:LEU:HB2	9	0.15
(1,784)	1:A:147:LEU:HA	1:A:147:LEU:HB2	10	0.15
(1,758)	1:A:64:LYS:H	1:A:64:LYS:HE2	6	0.15
(1,758)	1:A:64:LYS:H	1:A:64:LYS:HE3	6	0.15
(1,688)	1:A:133:PHE:HB2	1:A:98:MET:HG3	4	0.15
(1,658)	1:A:50:THR:H	1:A:49:PHE:HB3	8	0.15
(1,625)	1:A:44:ASP:HA	1:A:45:GLY:HA2	1	0.15
(1,549)	1:A:74:LYS:H	1:A:73:GLY:HA3	10	0.15
(1,456)	1:A:38:ALA:HB2	1:A:35:GLN:HG2	6	0.15
(1,456)	1:A:38:ALA:HB2	1:A:35:GLN:HG3	6	0.15
(1,456)	1:A:38:ALA:HB1	1:A:35:GLN:HG2	6	0.15
(1,456)	1:A:38:ALA:HB1	1:A:35:GLN:HG3	6	0.15
(1,456)	1:A:38:ALA:HB3	1:A:35:GLN:HG2	6	0.15
(1,456)	1:A:38:ALA:HB3	1:A:35:GLN:HG3	6	0.15
(1,3507)	1:A:35:GLN:HE21	1:A:4:PRO:HG2	4	0.15
(1,3507)	1:A:35:GLN:HE21	1:A:4:PRO:HG3	4	0.15
(1,3507)	1:A:35:GLN:HE21	1:A:35:GLN:HB2	4	0.15
(1,328)	1:A:100:ALA:HB2	1:A:101:MET:HA	3	0.15

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,328)	1:A:100:ALA:HB1	1:A:101:MET:HA	3	0.15
(1,328)	1:A:100:ALA:HB3	1:A:101:MET:HA	3	0.15
(1,3149)	1:A:40:CYS:HB3	1:A:60:VAL:HG12	3	0.15
(1,3149)	1:A:40:CYS:HB3	1:A:60:VAL:HG11	3	0.15
(1,3149)	1:A:40:CYS:HB3	1:A:60:VAL:HG13	3	0.15
(1,3149)	1:A:46:CYS:HB2	1:A:60:VAL:HG12	3	0.15
(1,3149)	1:A:46:CYS:HB2	1:A:60:VAL:HG11	3	0.15
(1,3149)	1:A:46:CYS:HB2	1:A:60:VAL:HG13	3	0.15
(1,3149)	1:A:40:CYS:HB3	1:A:60:VAL:HG12	6	0.15
(1,3149)	1:A:40:CYS:HB3	1:A:60:VAL:HG11	6	0.15
(1,3149)	1:A:40:CYS:HB3	1:A:60:VAL:HG13	6	0.15
(1,3149)	1:A:46:CYS:HB2	1:A:60:VAL:HG12	6	0.15
(1,3149)	1:A:46:CYS:HB2	1:A:60:VAL:HG11	6	0.15
(1,3149)	1:A:46:CYS:HB2	1:A:60:VAL:HG13	6	0.15
(1,3146)	1:A:156:PHE:HA	1:A:159:GLU:HG2	6	0.15
(1,3146)	1:A:156:PHE:HA	1:A:159:GLU:HG3	6	0.15
(1,3088)	1:A:9:LEU:H	1:A:9:LEU:HD12	9	0.15
(1,3088)	1:A:9:LEU:H	1:A:9:LEU:HD11	9	0.15
(1,3088)	1:A:9:LEU:H	1:A:9:LEU:HD13	9	0.15
(1,3088)	1:A:9:LEU:HD12	1:A:33:LEU:H	9	0.15
(1,3088)	1:A:9:LEU:HD11	1:A:33:LEU:H	9	0.15
(1,3088)	1:A:9:LEU:HD13	1:A:33:LEU:H	9	0.15
(1,3088)	1:A:9:LEU:H	1:A:9:LEU:HD12	10	0.15
(1,3088)	1:A:9:LEU:H	1:A:9:LEU:HD11	10	0.15
(1,3088)	1:A:9:LEU:H	1:A:9:LEU:HD13	10	0.15
(1,3088)	1:A:9:LEU:HD12	1:A:33:LEU:H	10	0.15
(1,3088)	1:A:9:LEU:HD11	1:A:33:LEU:H	10	0.15
(1,3088)	1:A:9:LEU:HD13	1:A:33:LEU:H	10	0.15
(1,3051)	1:A:65:PRO:HG2	1:A:66:ASP:HB2	4	0.15
(1,3051)	1:A:108:ASP:HB2	1:A:65:PRO:HG2	4	0.15
(1,3044)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:87:GLN:HB2	4	0.15
(1,3044)	1:A:146:VAL:HB	1:A:88:HIS:HB2	4	0.15
(1,3044)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:147:LEU:HG	4	0.15
(1,2992)	1:A:49:PHE:H	1:A:48:HIS:HB3	9	0.15
(1,2992)	1:A:16:ASN:H	1:A:13:HIS:HB3	9	0.15
(1,2992)	1:A:49:PHE:H	1:A:48:HIS:HB3	10	0.15
(1,2992)	1:A:16:ASN:H	1:A:13:HIS:HB3	10	0.15
(1,2971)	1:A:159:GLU:HB2	1:A:155:GLN:HA	2	0.15
(1,2971)	1:A:159:GLU:HB2	1:A:156:PHE:HA	2	0.15
(1,2967)	1:A:159:GLU:HB3	1:A:156:PHE:HD1	7	0.15
(1,2967)	1:A:159:GLU:HB3	1:A:156:PHE:HD2	7	0.15
(1,2967)	1:A:159:GLU:H	1:A:159:GLU:HB3	7	0.15

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2945)	1:A:102:VAL:HB	1:A:17:LYS:HD2	7	0.15
(1,2945)	1:A:102:VAL:HB	1:A:130:LYS:HG2	7	0.15
(1,2945)	1:A:102:VAL:HB	1:A:130:LYS:HG3	7	0.15
(1,2901)	1:A:22:PRO:HD3	1:A:62:GLU:HG3	4	0.15
(1,2901)	1:A:129:GLN:HG3	1:A:126:GLU:HA	4	0.15
(1,2901)	1:A:22:PRO:HD3	1:A:62:GLU:HG3	7	0.15
(1,2901)	1:A:129:GLN:HG3	1:A:126:GLU:HA	7	0.15
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG22	4	0.15
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG21	4	0.15
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG23	4	0.15
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG12	4	0.15
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG11	4	0.15
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG13	4	0.15
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:33:LEU:HD22	4	0.15
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:33:LEU:HD21	4	0.15
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:33:LEU:HD23	4	0.15
(1,2861)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:33:LEU:HD22	10	0.15
(1,2861)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:33:LEU:HD21	10	0.15
(1,2861)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:33:LEU:HD23	10	0.15
(1,2861)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:33:LEU:HD12	10	0.15
(1,2861)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:33:LEU:HD11	10	0.15
(1,2861)	1:A:34:GLU:HG3	1:A:33:LEU:HD13	10	0.15
(1,2851)	1:A:101:MET:HB2	1:A:99:THR:HG21	9	0.15
(1,2851)	1:A:101:MET:HB2	1:A:99:THR:HG22	9	0.15
(1,2851)	1:A:101:MET:HB2	1:A:99:THR:HG23	9	0.15
(1,2851)	1:A:100:ALA:HB2	1:A:101:MET:HB2	9	0.15
(1,2851)	1:A:100:ALA:HB1	1:A:101:MET:HB2	9	0.15
(1,2851)	1:A:100:ALA:HB3	1:A:101:MET:HB2	9	0.15
(1,2850)	1:A:101:MET:HB3	1:A:99:THR:HG21	2	0.15
(1,2850)	1:A:101:MET:HB3	1:A:99:THR:HG22	2	0.15
(1,2850)	1:A:101:MET:HB3	1:A:99:THR:HG23	2	0.15
(1,2850)	1:A:100:ALA:HB2	1:A:101:MET:HB3	2	0.15
(1,2850)	1:A:100:ALA:HB1	1:A:101:MET:HB3	2	0.15
(1,2850)	1:A:100:ALA:HB3	1:A:101:MET:HB3	2	0.15
(1,2850)	1:A:101:MET:HB3	1:A:99:THR:HG21	3	0.15
(1,2850)	1:A:101:MET:HB3	1:A:99:THR:HG22	3	0.15
(1,2850)	1:A:101:MET:HB3	1:A:99:THR:HG23	3	0.15
(1,2850)	1:A:100:ALA:HB2	1:A:101:MET:HB3	3	0.15
(1,2850)	1:A:100:ALA:HB1	1:A:101:MET:HB3	3	0.15
(1,2850)	1:A:100:ALA:HB3	1:A:101:MET:HB3	3	0.15
(1,2850)	1:A:101:MET:HB3	1:A:99:THR:HG21	9	0.15
(1,2850)	1:A:101:MET:HB3	1:A:99:THR:HG22	9	0.15

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2850)	1:A:101:MET:HB3	1:A:99:THR:HG23	9	0.15
(1,2850)	1:A:100:ALA:HB2	1:A:101:MET:HB3	9	0.15
(1,2850)	1:A:100:ALA:HB1	1:A:101:MET:HB3	9	0.15
(1,2850)	1:A:100:ALA:HB3	1:A:101:MET:HB3	9	0.15
(1,2825)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:57:MET:HB2	5	0.15
(1,2825)	1:A:107:ALA:HB2	1:A:108:ASP:HB2	5	0.15
(1,2825)	1:A:107:ALA:HB1	1:A:108:ASP:HB2	5	0.15
(1,2825)	1:A:107:ALA:HB3	1:A:108:ASP:HB2	5	0.15
(1,2825)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:57:MET:HB2	8	0.15
(1,2825)	1:A:107:ALA:HB2	1:A:108:ASP:HB2	8	0.15
(1,2825)	1:A:107:ALA:HB1	1:A:108:ASP:HB2	8	0.15
(1,2825)	1:A:107:ALA:HB3	1:A:108:ASP:HB2	8	0.15
(1,2825)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:57:MET:HB2	9	0.15
(1,2825)	1:A:107:ALA:HB2	1:A:108:ASP:HB2	9	0.15
(1,2825)	1:A:107:ALA:HB1	1:A:108:ASP:HB2	9	0.15
(1,2825)	1:A:107:ALA:HB3	1:A:108:ASP:HB2	9	0.15
(1,2811)	1:A:128:ASP:HB2	1:A:130:LYS:HG2	4	0.15
(1,2811)	1:A:128:ASP:HB2	1:A:130:LYS:HG3	4	0.15
(1,2811)	1:A:128:ASP:HB2	1:A:130:LYS:HG2	10	0.15
(1,2811)	1:A:128:ASP:HB2	1:A:130:LYS:HG3	10	0.15
(1,2748)	1:A:82:ARG:HD3	1:A:82:ARG:HA	7	0.15
(1,2748)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:THR:HB	7	0.15
(1,2746)	1:A:82:ARG:HD2	1:A:82:ARG:HB2	4	0.15
(1,2746)	1:A:82:ARG:HD2	1:A:82:ARG:HB3	4	0.15
(1,2690)	1:A:94:ALA:HA	1:A:134:LYS:HB3	3	0.15
(1,2690)	1:A:94:ALA:HA	1:A:95:PRO:HG2	3	0.15
(1,2690)	1:A:94:ALA:HA	1:A:134:LYS:HB3	7	0.15
(1,2690)	1:A:94:ALA:HA	1:A:95:PRO:HG2	7	0.15
(1,2690)	1:A:94:ALA:HA	1:A:134:LYS:HB3	8	0.15
(1,2690)	1:A:94:ALA:HA	1:A:95:PRO:HG2	8	0.15
(1,2656)	1:A:107:ALA:HA	1:A:85:PHE:HZ	4	0.15
(1,2656)	1:A:156:PHE:H	1:A:155:GLN:HA	4	0.15
(1,2652)	1:A:78:ARG:HA	1:A:37:ALA:HB2	10	0.15
(1,2652)	1:A:78:ARG:HA	1:A:37:ALA:HB1	10	0.15
(1,2652)	1:A:78:ARG:HA	1:A:37:ALA:HB3	10	0.15
(1,2652)	1:A:94:ALA:HB2	1:A:137:GLY:HA2	10	0.15
(1,2652)	1:A:94:ALA:HB1	1:A:137:GLY:HA2	10	0.15
(1,2652)	1:A:94:ALA:HB3	1:A:137:GLY:HA2	10	0.15
(1,264)	1:A:136:ARG:HA	1:A:137:GLY:HA2	9	0.15
(1,2595)	1:A:75:THR:HG21	1:A:13:HIS:HB2	7	0.15
(1,2595)	1:A:75:THR:HG22	1:A:13:HIS:HB2	7	0.15
(1,2595)	1:A:75:THR:HG23	1:A:13:HIS:HB2	7	0.15

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2595)	1:A:75:THR:HG21	1:A:13:HIS:HB3	7	0.15
(1,2595)	1:A:75:THR:HG22	1:A:13:HIS:HB3	7	0.15
(1,2595)	1:A:75:THR:HG23	1:A:13:HIS:HB3	7	0.15
(1,2595)	1:A:75:THR:HG21	1:A:48:HIS:HB3	7	0.15
(1,2595)	1:A:75:THR:HG22	1:A:48:HIS:HB3	7	0.15
(1,2595)	1:A:75:THR:HG23	1:A:48:HIS:HB3	7	0.15
(1,2595)	1:A:75:THR:HG21	1:A:13:HIS:HB2	8	0.15
(1,2595)	1:A:75:THR:HG22	1:A:13:HIS:HB2	8	0.15
(1,2595)	1:A:75:THR:HG23	1:A:13:HIS:HB2	8	0.15
(1,2595)	1:A:75:THR:HG21	1:A:13:HIS:HB3	8	0.15
(1,2595)	1:A:75:THR:HG22	1:A:13:HIS:HB3	8	0.15
(1,2595)	1:A:75:THR:HG23	1:A:13:HIS:HB3	8	0.15
(1,2595)	1:A:75:THR:HG21	1:A:48:HIS:HB3	8	0.15
(1,2595)	1:A:75:THR:HG22	1:A:48:HIS:HB3	8	0.15
(1,2595)	1:A:75:THR:HG23	1:A:48:HIS:HB3	8	0.15
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG12	1:A:134:LYS:HB2	1	0.15
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG11	1:A:134:LYS:HB2	1	0.15
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG13	1:A:134:LYS:HB2	1	0.15
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG12	1:A:134:LYS:HG3	1	0.15
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG11	1:A:134:LYS:HG3	1	0.15
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG13	1:A:134:LYS:HG3	1	0.15
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG12	1:A:134:LYS:HB2	9	0.15
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG11	1:A:134:LYS:HB2	9	0.15
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG13	1:A:134:LYS:HB2	9	0.15
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG12	1:A:134:LYS:HG3	9	0.15
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG11	1:A:134:LYS:HG3	9	0.15
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG13	1:A:134:LYS:HG3	9	0.15
(1,2410)	1:A:31:VAL:H	1:A:6:LYS:H	6	0.15
(1,223)	1:A:104:SER:H	1:A:13:HIS:HA	8	0.15
(1,223)	1:A:104:SER:H	1:A:13:HIS:HA	10	0.15
(1,2211)	1:A:17:LYS:H	1:A:73:GLY:HA2	6	0.15
(1,2211)	1:A:17:LYS:H	1:A:73:GLY:HA2	7	0.15
(1,2091)	1:A:56:LYS:H	1:A:56:LYS:HB3	6	0.15
(1,199)	1:A:73:GLY:H	1:A:71:THR:HG21	6	0.15
(1,199)	1:A:73:GLY:H	1:A:71:THR:HG22	6	0.15
(1,199)	1:A:73:GLY:H	1:A:71:THR:HG23	6	0.15
(1,197)	1:A:99:THR:H	1:A:99:THR:HG21	9	0.15
(1,197)	1:A:99:THR:H	1:A:99:THR:HG22	9	0.15
(1,197)	1:A:99:THR:H	1:A:99:THR:HG23	9	0.15
(1,1877)	1:A:7:LEU:H	1:A:32:SER:H	7	0.15
(1,1782)	1:A:52:ASN:H	1:A:57:MET:HB3	1	0.15
(1,178)	1:A:67:LEU:H	1:A:67:LEU:HD22	5	0.15

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,178)	1:A:67:LEU:H	1:A:67:LEU:HD21	5	0.15
(1,178)	1:A:67:LEU:H	1:A:67:LEU:HD23	5	0.15
(1,1693)	1:A:20:ARG:HG2	1:A:19:SER:HA	3	0.15
(1,1693)	1:A:20:ARG:HG2	1:A:19:SER:HA	8	0.15
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:123:THR:HG21	4	0.15
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:123:THR:HG22	4	0.15
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:123:THR:HG23	4	0.15
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:123:THR:HG21	4	0.15
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:123:THR:HG22	4	0.15
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:123:THR:HG23	4	0.15
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:123:THR:HG21	4	0.15
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:123:THR:HG22	4	0.15
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:123:THR:HG23	4	0.15
(1,165)	1:A:150:THR:HG21	1:A:123:THR:HA	7	0.15
(1,165)	1:A:150:THR:HG22	1:A:123:THR:HA	7	0.15
(1,165)	1:A:150:THR:HG23	1:A:123:THR:HA	7	0.15
(1,1605)	1:A:33:LEU:HD22	1:A:74:LYS:HB3	7	0.15
(1,1605)	1:A:33:LEU:HD21	1:A:74:LYS:HB3	7	0.15
(1,1605)	1:A:33:LEU:HD23	1:A:74:LYS:HB3	7	0.15
(1,1531)	1:A:61:LYS:HG3	1:A:62:GLU:H	3	0.15
(1,1507)	1:A:122:PHE:H	1:A:121:ILE:HG12	2	0.15
(1,1507)	1:A:122:PHE:H	1:A:121:ILE:HG12	3	0.15
(1,1507)	1:A:122:PHE:H	1:A:121:ILE:HG12	5	0.15
(1,1507)	1:A:122:PHE:H	1:A:121:ILE:HG12	8	0.15
(1,1476)	1:A:33:LEU:HD12	1:A:14:SER:HB2	10	0.15
(1,1476)	1:A:33:LEU:HD11	1:A:14:SER:HB2	10	0.15
(1,1476)	1:A:33:LEU:HD13	1:A:14:SER:HB2	10	0.15
(1,1449)	1:A:79:SER:H	1:A:77:SER:HB2	6	0.15
(1,1428)	1:A:136:ARG:H	1:A:136:ARG:HG3	10	0.15
(1,1422)	1:A:65:PRO:HG2	1:A:65:PRO:HA	2	0.15
(1,1296)	1:A:56:LYS:HA	1:A:6:LYS:HD2	10	0.15
(1,1276)	1:A:143:GLU:H	1:A:142:LYS:HD2	8	0.15
(1,1276)	1:A:143:GLU:H	1:A:142:LYS:HD3	8	0.15
(1,1260)	1:A:156:PHE:HB3	1:A:159:GLU:HB3	2	0.15
(1,1251)	1:A:65:PRO:HB2	1:A:75:THR:HG21	7	0.15
(1,1251)	1:A:65:PRO:HB2	1:A:75:THR:HG22	7	0.15
(1,1251)	1:A:65:PRO:HB2	1:A:75:THR:HG23	7	0.15
(1,1236)	1:A:78:ARG:HB3	1:A:78:ARG:HD3	4	0.15
(1,1159)	1:A:29:PRO:HB3	1:A:57:MET:HA	2	0.15
(1,953)	1:A:7:LEU:H	1:A:34:GLU:HG2	8	0.14
(1,906)	1:A:24:ILE:HB	1:A:62:GLU:HG2	1	0.14
(1,906)	1:A:24:ILE:HB	1:A:62:GLU:HG2	3	0.14

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,906)	1:A:24:ILE:HB	1:A:62:GLU:HG2	4	0.14
(1,906)	1:A:24:ILE:HB	1:A:62:GLU:HG2	9	0.14
(1,832)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:51:TYR:HA	1	0.14
(1,832)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:51:TYR:HA	4	0.14
(1,824)	1:A:125:ASN:HD22	1:A:125:ASN:HB3	8	0.14
(1,784)	1:A:147:LEU:HA	1:A:147:LEU:HB2	1	0.14
(1,784)	1:A:147:LEU:HA	1:A:147:LEU:HB2	3	0.14
(1,784)	1:A:147:LEU:HA	1:A:147:LEU:HB2	4	0.14
(1,784)	1:A:147:LEU:HA	1:A:147:LEU:HB2	5	0.14
(1,784)	1:A:147:LEU:HA	1:A:147:LEU:HB2	6	0.14
(1,784)	1:A:147:LEU:HA	1:A:147:LEU:HB2	7	0.14
(1,784)	1:A:147:LEU:HA	1:A:147:LEU:HB2	8	0.14
(1,733)	1:A:132:THR:H	1:A:131:CYS:HB2	3	0.14
(1,729)	1:A:17:LYS:HE2	1:A:67:LEU:HD22	1	0.14
(1,729)	1:A:17:LYS:HE2	1:A:67:LEU:HD21	1	0.14
(1,729)	1:A:17:LYS:HE2	1:A:67:LEU:HD23	1	0.14
(1,625)	1:A:44:ASP:HA	1:A:45:GLY:HA2	5	0.14
(1,625)	1:A:44:ASP:HA	1:A:45:GLY:HA2	6	0.14
(1,595)	1:A:70:LEU:HB2	1:A:18:GLY:HA2	2	0.14
(1,415)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:66:ASP:HB2	6	0.14
(1,415)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:66:ASP:HB2	6	0.14
(1,415)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:66:ASP:HB2	6	0.14
(1,415)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:66:ASP:HB2	7	0.14
(1,415)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:66:ASP:HB2	7	0.14
(1,415)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:66:ASP:HB2	7	0.14
(1,415)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:66:ASP:HB2	8	0.14
(1,415)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:66:ASP:HB2	8	0.14
(1,415)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:66:ASP:HB2	8	0.14
(1,415)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:66:ASP:HB2	10	0.14
(1,415)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:66:ASP:HB2	10	0.14
(1,415)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:66:ASP:HB2	10	0.14
(1,407)	1:A:142:LYS:H	1:A:140:ALA:HB2	3	0.14
(1,407)	1:A:142:LYS:H	1:A:140:ALA:HB1	3	0.14
(1,407)	1:A:142:LYS:H	1:A:140:ALA:HB3	3	0.14
(1,3507)	1:A:35:GLN:HE21	1:A:4:PRO:HG2	7	0.14
(1,3507)	1:A:35:GLN:HE21	1:A:4:PRO:HG3	7	0.14
(1,3507)	1:A:35:GLN:HE21	1:A:35:GLN:HB2	7	0.14
(1,3461)	1:A:110:GLN:HE22	1:A:110:GLN:HA	5	0.14
(1,3461)	1:A:110:GLN:HE22	1:A:157:CYS:HB3	5	0.14
(1,3461)	1:A:155:GLN:HE22	1:A:154:LYS:HA	5	0.14
(1,329)	1:A:100:ALA:HB2	1:A:130:LYS:HE2	10	0.14
(1,329)	1:A:100:ALA:HB1	1:A:130:LYS:HE2	10	0.14

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,329)	1:A:100:ALA:HB3	1:A:130:LYS:HE2	10	0.14
(1,328)	1:A:100:ALA:HB2	1:A:101:MET:HA	1	0.14
(1,328)	1:A:100:ALA:HB1	1:A:101:MET:HA	1	0.14
(1,328)	1:A:100:ALA:HB3	1:A:101:MET:HA	1	0.14
(1,328)	1:A:100:ALA:HB2	1:A:101:MET:HA	6	0.14
(1,328)	1:A:100:ALA:HB1	1:A:101:MET:HA	6	0.14
(1,328)	1:A:100:ALA:HB3	1:A:101:MET:HA	6	0.14
(1,328)	1:A:100:ALA:HB2	1:A:101:MET:HA	7	0.14
(1,328)	1:A:100:ALA:HB1	1:A:101:MET:HA	7	0.14
(1,328)	1:A:100:ALA:HB3	1:A:101:MET:HA	7	0.14
(1,3220)	1:A:13:HIS:H	1:A:12:VAL:H	1	0.14
(1,3220)	1:A:13:HIS:H	1:A:13:HIS:HD2	1	0.14
(1,3201)	1:A:52:ASN:H	1:A:53:ASP:HB3	9	0.14
(1,3201)	1:A:52:ASN:H	1:A:54:ASP:HB2	9	0.14
(1,3201)	1:A:52:ASN:H	1:A:54:ASP:HB3	9	0.14
(1,3201)	1:A:52:ASN:H	1:A:58:CYS:HB2	9	0.14
(1,3146)	1:A:156:PHE:HA	1:A:159:GLU:HG2	7	0.14
(1,3146)	1:A:156:PHE:HA	1:A:159:GLU:HG3	7	0.14
(1,3133)	1:A:23:THR:HG21	1:A:61:LYS:HA	2	0.14
(1,3133)	1:A:23:THR:HG22	1:A:61:LYS:HA	2	0.14
(1,3133)	1:A:23:THR:HG23	1:A:61:LYS:HA	2	0.14
(1,3133)	1:A:123:THR:HG21	1:A:150:THR:HA	2	0.14
(1,3133)	1:A:123:THR:HG22	1:A:150:THR:HA	2	0.14
(1,3133)	1:A:123:THR:HG23	1:A:150:THR:HA	2	0.14
(1,3086)	1:A:37:ALA:HA	1:A:41:LYS:HG2	1	0.14
(1,3086)	1:A:41:LYS:HG2	1:A:40:CYS:HB3	1	0.14
(1,2998)	1:A:87:GLN:H	1:A:87:GLN:HB3	4	0.14
(1,2998)	1:A:32:SER:H	1:A:35:GLN:HB2	4	0.14
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB3	1:A:23:THR:HG21	10	0.14
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB3	1:A:23:THR:HG22	10	0.14
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB3	1:A:23:THR:HG23	10	0.14
(1,2976)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:98:MET:HG2	10	0.14
(1,2976)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:98:MET:HG2	10	0.14
(1,2976)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:98:MET:HG2	10	0.14
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB2	1:A:23:THR:HG21	10	0.14
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB2	1:A:23:THR:HG22	10	0.14
(1,2976)	1:A:26:GLU:HB2	1:A:23:THR:HG23	10	0.14
(1,2971)	1:A:159:GLU:HB2	1:A:155:GLN:HA	1	0.14
(1,2971)	1:A:159:GLU:HB2	1:A:156:PHE:HA	1	0.14
(1,2967)	1:A:159:GLU:HB3	1:A:156:PHE:HD1	1	0.14
(1,2967)	1:A:159:GLU:HB3	1:A:156:PHE:HD2	1	0.14
(1,2967)	1:A:159:GLU:H	1:A:159:GLU:HB3	1	0.14

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2963)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:65:PRO:HB3	6	0.14
(1,2963)	1:A:41:LYS:HE2	1:A:78:ARG:HB3	6	0.14
(1,2963)	1:A:41:LYS:HE3	1:A:78:ARG:HB3	6	0.14
(1,2945)	1:A:102:VAL:HB	1:A:17:LYS:HD2	5	0.14
(1,2945)	1:A:102:VAL:HB	1:A:130:LYS:HG2	5	0.14
(1,2945)	1:A:102:VAL:HB	1:A:130:LYS:HG3	5	0.14
(1,2945)	1:A:102:VAL:HB	1:A:17:LYS:HD2	8	0.14
(1,2945)	1:A:102:VAL:HB	1:A:130:LYS:HG2	8	0.14
(1,2945)	1:A:102:VAL:HB	1:A:130:LYS:HG3	8	0.14
(1,2945)	1:A:102:VAL:HB	1:A:17:LYS:HD2	9	0.14
(1,2945)	1:A:102:VAL:HB	1:A:130:LYS:HG2	9	0.14
(1,2945)	1:A:102:VAL:HB	1:A:130:LYS:HG3	9	0.14
(1,2937)	1:A:101:MET:HG2	1:A:67:LEU:H	3	0.14
(1,2937)	1:A:102:VAL:H	1:A:101:MET:HG2	3	0.14
(1,2937)	1:A:101:MET:HG2	1:A:67:LEU:H	9	0.14
(1,2937)	1:A:102:VAL:H	1:A:101:MET:HG2	9	0.14
(1,2903)	1:A:28:VAL:HB	1:A:31:VAL:HA	8	0.14
(1,2903)	1:A:28:VAL:HB	1:A:57:MET:HA	8	0.14
(1,2901)	1:A:22:PRO:HD3	1:A:62:GLU:HG3	1	0.14
(1,2901)	1:A:129:GLN:HG3	1:A:126:GLU:HA	1	0.14
(1,2901)	1:A:22:PRO:HD3	1:A:62:GLU:HG3	6	0.14
(1,2901)	1:A:129:GLN:HG3	1:A:126:GLU:HA	6	0.14
(1,2901)	1:A:22:PRO:HD3	1:A:62:GLU:HG3	8	0.14
(1,2901)	1:A:129:GLN:HG3	1:A:126:GLU:HA	8	0.14
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG22	1	0.14
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG21	1	0.14
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG23	1	0.14
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG12	1	0.14
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG11	1	0.14
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG13	1	0.14
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:33:LEU:HD22	1	0.14
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:33:LEU:HD21	1	0.14
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:33:LEU:HD23	1	0.14
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG22	3	0.14
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG21	3	0.14
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG23	3	0.14
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG12	3	0.14
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG11	3	0.14
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG13	3	0.14
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:33:LEU:HD22	3	0.14
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:33:LEU:HD21	3	0.14
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:33:LEU:HD23	3	0.14

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG22	7	0.14
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG21	7	0.14
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG23	7	0.14
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG12	7	0.14
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG11	7	0.14
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG13	7	0.14
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:33:LEU:HD22	7	0.14
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:33:LEU:HD21	7	0.14
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:33:LEU:HD23	7	0.14
(1,2892)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HE2	1	0.14
(1,2892)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HE3	1	0.14
(1,2892)	1:A:80:CYS:HB2	1:A:11:CYS:HB2	1	0.14
(1,2892)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HE2	8	0.14
(1,2892)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HE3	8	0.14
(1,2892)	1:A:80:CYS:HB2	1:A:11:CYS:HB2	8	0.14
(1,2892)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HE2	10	0.14
(1,2892)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HE3	10	0.14
(1,2892)	1:A:80:CYS:HB2	1:A:11:CYS:HB2	10	0.14
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:12:VAL:HG12	4	0.14
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:12:VAL:HG11	4	0.14
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:12:VAL:HG13	4	0.14
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:76:ALA:HB2	4	0.14
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:76:ALA:HB1	4	0.14
(1,2884)	1:A:80:CYS:HB3	1:A:76:ALA:HB3	4	0.14
(1,2863)	1:A:7:LEU:HB3	1:A:34:GLU:HG2	3	0.14
(1,2863)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:9:LEU:HB2	3	0.14
(1,2858)	1:A:16:ASN:HB3	1:A:17:LYS:HG3	2	0.14
(1,2858)	1:A:16:ASN:HB3	1:A:71:THR:HG21	2	0.14
(1,2858)	1:A:16:ASN:HB3	1:A:71:THR:HG22	2	0.14
(1,2858)	1:A:16:ASN:HB3	1:A:71:THR:HG23	2	0.14
(1,2811)	1:A:128:ASP:HB2	1:A:130:LYS:HG2	5	0.14
(1,2811)	1:A:128:ASP:HB2	1:A:130:LYS:HG3	5	0.14
(1,2811)	1:A:128:ASP:HB2	1:A:130:LYS:HG2	8	0.14
(1,2811)	1:A:128:ASP:HB2	1:A:130:LYS:HG3	8	0.14
(1,2783)	1:A:131:CYS:H	1:A:130:LYS:HE2	10	0.14
(1,2783)	1:A:131:CYS:H	1:A:131:CYS:HB3	10	0.14
(1,2748)	1:A:82:ARG:HD3	1:A:82:ARG:HA	10	0.14
(1,2748)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:THR:HB	10	0.14
(1,2716)	1:A:160:GLY:HA2	1:A:156:PHE:HD1	8	0.14
(1,2716)	1:A:160:GLY:HA2	1:A:156:PHE:HD2	8	0.14
(1,2716)	1:A:159:GLU:H	1:A:160:GLY:HA2	8	0.14
(1,2716)	1:A:160:GLY:HA2	1:A:156:PHE:HD1	10	0.14

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2716)	1:A:160:GLY:HA2	1:A:156:PHE:HD2	10	0.14
(1,2716)	1:A:159:GLU:H	1:A:160:GLY:HA2	10	0.14
(1,2713)	1:A:148:GLY:HA2	1:A:147:LEU:HB2	4	0.14
(1,2713)	1:A:160:GLY:HA3	1:A:114:ALA:HB2	4	0.14
(1,2713)	1:A:160:GLY:HA3	1:A:114:ALA:HB1	4	0.14
(1,2713)	1:A:160:GLY:HA3	1:A:114:ALA:HB3	4	0.14
(1,2709)	1:A:148:GLY:HA2	1:A:146:VAL:HB	4	0.14
(1,2709)	1:A:148:GLY:HA2	1:A:147:LEU:HB3	4	0.14
(1,2707)	1:A:148:GLY:HA3	1:A:147:LEU:HD22	6	0.14
(1,2707)	1:A:148:GLY:HA3	1:A:147:LEU:HD21	6	0.14
(1,2707)	1:A:148:GLY:HA3	1:A:147:LEU:HD23	6	0.14
(1,2707)	1:A:148:GLY:HA3	1:A:149:VAL:HG22	6	0.14
(1,2707)	1:A:148:GLY:HA3	1:A:149:VAL:HG21	6	0.14
(1,2707)	1:A:148:GLY:HA3	1:A:149:VAL:HG23	6	0.14
(1,2690)	1:A:94:ALA:HA	1:A:134:LYS:HB3	4	0.14
(1,2690)	1:A:94:ALA:HA	1:A:95:PRO:HG2	4	0.14
(1,2656)	1:A:107:ALA:HA	1:A:85:PHE:HZ	2	0.14
(1,2656)	1:A:156:PHE:H	1:A:155:GLN:HA	2	0.14
(1,264)	1:A:136:ARG:HA	1:A:137:GLY:HA2	2	0.14
(1,2602)	1:A:126:GLU:H	1:A:149:VAL:HG22	1	0.14
(1,2602)	1:A:126:GLU:H	1:A:149:VAL:HG21	1	0.14
(1,2602)	1:A:126:GLU:H	1:A:149:VAL:HG23	1	0.14
(1,2602)	1:A:151:SER:H	1:A:149:VAL:HG22	1	0.14
(1,2602)	1:A:151:SER:H	1:A:149:VAL:HG21	1	0.14
(1,2602)	1:A:151:SER:H	1:A:149:VAL:HG23	1	0.14
(1,2595)	1:A:75:THR:HG21	1:A:13:HIS:HB2	2	0.14
(1,2595)	1:A:75:THR:HG22	1:A:13:HIS:HB2	2	0.14
(1,2595)	1:A:75:THR:HG23	1:A:13:HIS:HB2	2	0.14
(1,2595)	1:A:75:THR:HG21	1:A:13:HIS:HB3	2	0.14
(1,2595)	1:A:75:THR:HG22	1:A:13:HIS:HB3	2	0.14
(1,2595)	1:A:75:THR:HG23	1:A:13:HIS:HB3	2	0.14
(1,2595)	1:A:75:THR:HG21	1:A:48:HIS:HB3	2	0.14
(1,2595)	1:A:75:THR:HG22	1:A:48:HIS:HB3	2	0.14
(1,2595)	1:A:75:THR:HG23	1:A:48:HIS:HB3	2	0.14
(1,2587)	1:A:55:SER:HA	1:A:56:LYS:HB2	6	0.14
(1,2587)	1:A:55:SER:HA	1:A:57:MET:HG2	6	0.14
(1,2587)	1:A:55:SER:HA	1:A:57:MET:HG3	6	0.14
(1,2556)	1:A:71:THR:HG21	1:A:16:ASN:HB2	10	0.14
(1,2556)	1:A:71:THR:HG22	1:A:16:ASN:HB2	10	0.14
(1,2556)	1:A:71:THR:HG23	1:A:16:ASN:HB2	10	0.14
(1,2556)	1:A:71:THR:HG21	1:A:54:ASP:HB2	10	0.14
(1,2556)	1:A:71:THR:HG21	1:A:54:ASP:HB3	10	0.14

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2556)	1:A:71:THR:HG22	1:A:54:ASP:HB2	10	0.14
(1,2556)	1:A:71:THR:HG22	1:A:54:ASP:HB3	10	0.14
(1,2556)	1:A:71:THR:HG23	1:A:54:ASP:HB2	10	0.14
(1,2556)	1:A:71:THR:HG23	1:A:54:ASP:HB3	10	0.14
(1,2544)	1:A:154:LYS:HA	1:A:120:GLU:HA	7	0.14
(1,2544)	1:A:154:LYS:HA	1:A:121:ILE:HA	7	0.14
(1,2532)	1:A:59:HIS:HD2	1:A:27:PRO:HG2	3	0.14
(1,2532)	1:A:59:HIS:HD2	1:A:57:MET:HB3	3	0.14
(1,2532)	1:A:59:HIS:HD2	1:A:27:PRO:HG2	7	0.14
(1,2532)	1:A:59:HIS:HD2	1:A:57:MET:HB3	7	0.14
(1,2488)	1:A:68:TYR:HD1	1:A:20:ARG:HB2	7	0.14
(1,2488)	1:A:68:TYR:HD1	1:A:20:ARG:HB3	7	0.14
(1,2488)	1:A:68:TYR:HD2	1:A:20:ARG:HB2	7	0.14
(1,2488)	1:A:68:TYR:HD2	1:A:20:ARG:HB3	7	0.14
(1,2488)	1:A:142:LYS:HB3	1:A:91:TYR:HD1	7	0.14
(1,2488)	1:A:142:LYS:HB3	1:A:91:TYR:HD2	7	0.14
(1,2390)	1:A:145:GLY:H	1:A:89:VAL:HG12	2	0.14
(1,2390)	1:A:145:GLY:H	1:A:89:VAL:HG11	2	0.14
(1,2390)	1:A:145:GLY:H	1:A:89:VAL:HG13	2	0.14
(1,2252)	1:A:113:CYS:H	1:A:122:PHE:HB2	2	0.14
(1,2198)	1:A:48:HIS:H	1:A:46:CYS:HB2	8	0.14
(1,2180)	1:A:108:ASP:H	1:A:108:ASP:HB3	2	0.14
(1,199)	1:A:73:GLY:H	1:A:71:THR:HG21	2	0.14
(1,199)	1:A:73:GLY:H	1:A:71:THR:HG22	2	0.14
(1,199)	1:A:73:GLY:H	1:A:71:THR:HG23	2	0.14
(1,199)	1:A:73:GLY:H	1:A:71:THR:HG21	4	0.14
(1,199)	1:A:73:GLY:H	1:A:71:THR:HG22	4	0.14
(1,199)	1:A:73:GLY:H	1:A:71:THR:HG23	4	0.14
(1,197)	1:A:99:THR:H	1:A:99:THR:HG21	1	0.14
(1,197)	1:A:99:THR:H	1:A:99:THR:HG22	1	0.14
(1,197)	1:A:99:THR:H	1:A:99:THR:HG23	1	0.14
(1,197)	1:A:99:THR:H	1:A:99:THR:HG21	4	0.14
(1,197)	1:A:99:THR:H	1:A:99:THR:HG22	4	0.14
(1,197)	1:A:99:THR:H	1:A:99:THR:HG23	4	0.14
(1,197)	1:A:99:THR:H	1:A:99:THR:HG21	5	0.14
(1,197)	1:A:99:THR:H	1:A:99:THR:HG22	5	0.14
(1,197)	1:A:99:THR:H	1:A:99:THR:HG23	5	0.14
(1,197)	1:A:99:THR:H	1:A:99:THR:HG21	8	0.14
(1,197)	1:A:99:THR:H	1:A:99:THR:HG22	8	0.14
(1,197)	1:A:99:THR:H	1:A:99:THR:HG23	8	0.14
(1,197)	1:A:99:THR:H	1:A:99:THR:HG21	10	0.14
(1,197)	1:A:99:THR:H	1:A:99:THR:HG22	10	0.14

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,197)	1:A:99:THR:H	1:A:99:THR:HG23	10	0.14
(1,1841)	1:A:107:ALA:H	1:A:11:CYS:HA	5	0.14
(1,1841)	1:A:107:ALA:H	1:A:11:CYS:HA	8	0.14
(1,184)	1:A:67:LEU:HD22	1:A:19:SER:HB3	1	0.14
(1,184)	1:A:67:LEU:HD21	1:A:19:SER:HB3	1	0.14
(1,184)	1:A:67:LEU:HD23	1:A:19:SER:HB3	1	0.14
(1,1782)	1:A:52:ASN:H	1:A:57:MET:HB3	10	0.14
(1,1722)	1:A:74:LYS:H	1:A:74:LYS:HB3	10	0.14
(1,1693)	1:A:20:ARG:HG2	1:A:19:SER:HA	4	0.14
(1,1693)	1:A:20:ARG:HG2	1:A:19:SER:HA	9	0.14
(1,167)	1:A:150:THR:HG21	1:A:85:PHE:HB2	7	0.14
(1,167)	1:A:150:THR:HG22	1:A:85:PHE:HB2	7	0.14
(1,167)	1:A:150:THR:HG23	1:A:85:PHE:HB2	7	0.14
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:123:THR:HG21	7	0.14
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:123:THR:HG22	7	0.14
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:123:THR:HG23	7	0.14
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:123:THR:HG21	7	0.14
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:123:THR:HG22	7	0.14
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:123:THR:HG23	7	0.14
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:123:THR:HG21	7	0.14
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:123:THR:HG22	7	0.14
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:123:THR:HG23	7	0.14
(1,1547)	1:A:61:LYS:H	1:A:61:LYS:HG2	9	0.14
(1,1507)	1:A:122:PHE:H	1:A:121:ILE:HG12	4	0.14
(1,1507)	1:A:122:PHE:H	1:A:121:ILE:HG12	6	0.14
(1,1492)	1:A:74:LYS:H	1:A:70:LEU:HG	3	0.14
(1,1421)	1:A:108:ASP:HA	1:A:65:PRO:HG2	9	0.14
(1,14)	1:A:126:GLU:HG3	1:A:124:TYR:HD1	2	0.14
(1,14)	1:A:126:GLU:HG3	1:A:124:TYR:HD2	2	0.14
(1,14)	1:A:126:GLU:HG3	1:A:124:TYR:HD1	5	0.14
(1,14)	1:A:126:GLU:HG3	1:A:124:TYR:HD2	5	0.14
(1,1304)	1:A:6:LYS:HD3	1:A:56:LYS:HB2	4	0.14
(1,1298)	1:A:48:HIS:HB3	1:A:65:PRO:HG2	8	0.14
(1,1296)	1:A:56:LYS:HA	1:A:6:LYS:HD2	8	0.14
(1,1253)	1:A:67:LEU:HD22	1:A:65:PRO:HB2	2	0.14
(1,1253)	1:A:67:LEU:HD21	1:A:65:PRO:HB2	2	0.14
(1,1253)	1:A:67:LEU:HD23	1:A:65:PRO:HB2	2	0.14
(1,1251)	1:A:65:PRO:HB2	1:A:75:THR:HG21	1	0.14
(1,1251)	1:A:65:PRO:HB2	1:A:75:THR:HG22	1	0.14
(1,1251)	1:A:65:PRO:HB2	1:A:75:THR:HG23	1	0.14
(1,1245)	1:A:146:VAL:HB	1:A:123:THR:HG21	3	0.14
(1,1245)	1:A:146:VAL:HB	1:A:123:THR:HG22	3	0.14

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1245)	1:A:146:VAL:HB	1:A:123:THR:HG23	3	0.14
(1,1245)	1:A:146:VAL:HB	1:A:123:THR:HG21	4	0.14
(1,1245)	1:A:146:VAL:HB	1:A:123:THR:HG22	4	0.14
(1,1245)	1:A:146:VAL:HB	1:A:123:THR:HG23	4	0.14
(1,1245)	1:A:146:VAL:HB	1:A:123:THR:HG21	6	0.14
(1,1245)	1:A:146:VAL:HB	1:A:123:THR:HG22	6	0.14
(1,1245)	1:A:146:VAL:HB	1:A:123:THR:HG23	6	0.14
(1,1236)	1:A:78:ARG:HB3	1:A:78:ARG:HD3	1	0.14
(1,1236)	1:A:78:ARG:HB3	1:A:78:ARG:HD3	7	0.14
(1,1213)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:57:MET:HG2	4	0.14
(1,1213)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:57:MET:HG3	4	0.14
(1,1159)	1:A:29:PRO:HB3	1:A:57:MET:HA	6	0.14
(1,1159)	1:A:29:PRO:HB3	1:A:57:MET:HA	7	0.14
(1,1116)	1:A:29:PRO:HB2	1:A:57:MET:HA	4	0.14
(1,1095)	1:A:89:VAL:HB	1:A:149:VAL:HG22	1	0.14
(1,1095)	1:A:89:VAL:HB	1:A:149:VAL:HG21	1	0.14
(1,1095)	1:A:89:VAL:HB	1:A:149:VAL:HG23	1	0.14
(1,1067)	1:A:132:THR:HB	1:A:100:ALA:HB2	8	0.14
(1,1067)	1:A:132:THR:HB	1:A:100:ALA:HB1	8	0.14
(1,1067)	1:A:132:THR:HB	1:A:100:ALA:HB3	8	0.14
(1,953)	1:A:7:LEU:H	1:A:34:GLU:HG2	1	0.13
(1,953)	1:A:7:LEU:H	1:A:34:GLU:HG2	2	0.13
(1,953)	1:A:7:LEU:H	1:A:34:GLU:HG2	3	0.13
(1,953)	1:A:7:LEU:H	1:A:34:GLU:HG2	4	0.13
(1,953)	1:A:7:LEU:H	1:A:34:GLU:HG2	5	0.13
(1,953)	1:A:7:LEU:H	1:A:34:GLU:HG2	9	0.13
(1,938)	1:A:16:ASN:HD22	1:A:16:ASN:HB2	9	0.13
(1,906)	1:A:24:ILE:HB	1:A:62:GLU:HG2	5	0.13
(1,832)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:51:TYR:HA	2	0.13
(1,832)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:51:TYR:HA	5	0.13
(1,832)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:51:TYR:HA	10	0.13
(1,773)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:65:PRO:HA	1	0.13
(1,773)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:65:PRO:HA	2	0.13
(1,773)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:65:PRO:HA	3	0.13
(1,773)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:65:PRO:HA	9	0.13
(1,680)	1:A:20:ARG:H	1:A:20:ARG:HD3	4	0.13
(1,595)	1:A:70:LEU:HB2	1:A:18:GLY:HA2	1	0.13
(1,595)	1:A:70:LEU:HB2	1:A:18:GLY:HA2	4	0.13
(1,595)	1:A:70:LEU:HB2	1:A:18:GLY:HA2	6	0.13
(1,534)	1:A:4:PRO:HD3	1:A:32:SER:HB3	5	0.13
(1,427)	1:A:36:CYS:HA	1:A:31:VAL:HG22	3	0.13
(1,427)	1:A:36:CYS:HA	1:A:31:VAL:HG21	3	0.13

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,427)	1:A:36:CYS:HA	1:A:31:VAL:HG23	3	0.13
(1,415)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:66:ASP:HB2	9	0.13
(1,415)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:66:ASP:HB2	9	0.13
(1,415)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:66:ASP:HB2	9	0.13
(1,404)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:9:LEU:HD12	10	0.13
(1,404)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:9:LEU:HD11	10	0.13
(1,404)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:9:LEU:HD13	10	0.13
(1,404)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:9:LEU:HD12	10	0.13
(1,404)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:9:LEU:HD11	10	0.13
(1,404)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:9:LEU:HD13	10	0.13
(1,404)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:9:LEU:HD12	10	0.13
(1,404)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:9:LEU:HD11	10	0.13
(1,404)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:9:LEU:HD13	10	0.13
(1,388)	1:A:112:ALA:HB2	1:A:65:PRO:HD3	9	0.13
(1,388)	1:A:112:ALA:HB1	1:A:65:PRO:HD3	9	0.13
(1,388)	1:A:112:ALA:HB3	1:A:65:PRO:HD3	9	0.13
(1,354)	1:A:129:GLN:HA	1:A:102:VAL:HG22	4	0.13
(1,354)	1:A:129:GLN:HA	1:A:102:VAL:HG21	4	0.13
(1,354)	1:A:129:GLN:HA	1:A:102:VAL:HG23	4	0.13
(1,354)	1:A:129:GLN:HA	1:A:102:VAL:HG12	4	0.13
(1,354)	1:A:129:GLN:HA	1:A:102:VAL:HG11	4	0.13
(1,354)	1:A:129:GLN:HA	1:A:102:VAL:HG13	4	0.13
(1,3522)	1:A:105:GLN:HE21	1:A:105:GLN:HB3	6	0.13
(1,3522)	1:A:105:GLN:HE21	1:A:105:GLN:HG3	6	0.13
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:6:LYS:HD2	7	0.13
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:56:LYS:HD2	7	0.13
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:56:LYS:HD3	7	0.13
(1,3494)	1:A:55:SER:H	1:A:57:MET:HB2	7	0.13
(1,3461)	1:A:110:GLN:HE22	1:A:110:GLN:HA	7	0.13
(1,3461)	1:A:110:GLN:HE22	1:A:157:CYS:HB3	7	0.13
(1,3461)	1:A:155:GLN:HE22	1:A:154:LYS:HA	7	0.13
(1,3323)	1:A:116:ASP:H	1:A:98:MET:HG2	10	0.13
(1,3323)	1:A:116:ASP:H	1:A:117:PRO:HG2	10	0.13
(1,3323)	1:A:116:ASP:H	1:A:117:PRO:HG3	10	0.13
(1,3265)	1:A:12:VAL:H	1:A:9:LEU:HB2	7	0.13
(1,3265)	1:A:12:VAL:H	1:A:105:GLN:HG2	7	0.13
(1,3226)	1:A:85:PHE:H	1:A:82:ARG:HG3	1	0.13
(1,3226)	1:A:85:PHE:H	1:A:150:THR:HG21	1	0.13
(1,3226)	1:A:85:PHE:H	1:A:150:THR:HG22	1	0.13
(1,3226)	1:A:85:PHE:H	1:A:150:THR:HG23	1	0.13
(1,3201)	1:A:52:ASN:H	1:A:53:ASP:HB3	1	0.13
(1,3201)	1:A:52:ASN:H	1:A:54:ASP:HB2	1	0.13

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3201)	1:A:52:ASN:H	1:A:54:ASP:HB3	1	0.13
(1,3201)	1:A:52:ASN:H	1:A:58:CYS:HB2	1	0.13
(1,3184)	1:A:76:ALA:H	1:A:74:LYS:HA	4	0.13
(1,3184)	1:A:76:ALA:H	1:A:48:HIS:HA	4	0.13
(1,3184)	1:A:76:ALA:H	1:A:74:LYS:HA	9	0.13
(1,3184)	1:A:76:ALA:H	1:A:48:HIS:HA	9	0.13
(1,3149)	1:A:40:CYS:HB3	1:A:60:VAL:HG12	10	0.13
(1,3149)	1:A:40:CYS:HB3	1:A:60:VAL:HG11	10	0.13
(1,3149)	1:A:40:CYS:HB3	1:A:60:VAL:HG13	10	0.13
(1,3149)	1:A:46:CYS:HB2	1:A:60:VAL:HG12	10	0.13
(1,3149)	1:A:46:CYS:HB2	1:A:60:VAL:HG11	10	0.13
(1,3149)	1:A:46:CYS:HB2	1:A:60:VAL:HG13	10	0.13
(1,3146)	1:A:156:PHE:HA	1:A:159:GLU:HG2	3	0.13
(1,3146)	1:A:156:PHE:HA	1:A:159:GLU:HG3	3	0.13
(1,3092)	1:A:11:CYS:H	1:A:76:ALA:HB2	4	0.13
(1,3092)	1:A:11:CYS:H	1:A:76:ALA:HB1	4	0.13
(1,3092)	1:A:11:CYS:H	1:A:76:ALA:HB3	4	0.13
(1,3092)	1:A:49:PHE:H	1:A:76:ALA:HB2	4	0.13
(1,3092)	1:A:49:PHE:H	1:A:76:ALA:HB1	4	0.13
(1,3092)	1:A:49:PHE:H	1:A:76:ALA:HB3	4	0.13
(1,3051)	1:A:65:PRO:HG2	1:A:66:ASP:HB2	8	0.13
(1,3051)	1:A:108:ASP:HB2	1:A:65:PRO:HG2	8	0.13
(1,3044)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:87:GLN:HB2	2	0.13
(1,3044)	1:A:146:VAL:HB	1:A:88:HIS:HB2	2	0.13
(1,3044)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:147:LEU:HG	2	0.13
(1,3036)	1:A:55:SER:HB3	1:A:52:ASN:HB2	1	0.13
(1,3036)	1:A:55:SER:HB3	1:A:57:MET:HG2	1	0.13
(1,3036)	1:A:55:SER:HB3	1:A:57:MET:HG3	1	0.13
(1,3036)	1:A:55:SER:HB3	1:A:52:ASN:HB2	2	0.13
(1,3036)	1:A:55:SER:HB3	1:A:57:MET:HG2	2	0.13
(1,3036)	1:A:55:SER:HB3	1:A:57:MET:HG3	2	0.13
(1,3036)	1:A:55:SER:HB3	1:A:52:ASN:HB2	3	0.13
(1,3036)	1:A:55:SER:HB3	1:A:57:MET:HG2	3	0.13
(1,3036)	1:A:55:SER:HB3	1:A:57:MET:HG3	3	0.13
(1,3036)	1:A:55:SER:HB3	1:A:52:ASN:HB2	6	0.13
(1,3036)	1:A:55:SER:HB3	1:A:57:MET:HG2	6	0.13
(1,3036)	1:A:55:SER:HB3	1:A:57:MET:HG3	6	0.13
(1,2998)	1:A:87:GLN:H	1:A:87:GLN:HB3	2	0.13
(1,2998)	1:A:32:SER:H	1:A:35:GLN:HB2	2	0.13
(1,2992)	1:A:49:PHE:H	1:A:48:HIS:HB3	3	0.13
(1,2992)	1:A:16:ASN:H	1:A:13:HIS:HB3	3	0.13
(1,2971)	1:A:159:GLU:HB2	1:A:155:GLN:HA	8	0.13

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2971)	1:A:159:GLU:HB2	1:A:156:PHE:HA	8	0.13
(1,2967)	1:A:159:GLU:HB3	1:A:156:PHE:HD1	5	0.13
(1,2967)	1:A:159:GLU:HB3	1:A:156:PHE:HD2	5	0.13
(1,2967)	1:A:159:GLU:H	1:A:159:GLU:HB3	5	0.13
(1,2907)	1:A:89:VAL:HB	1:A:151:SER:HB2	4	0.13
(1,2907)	1:A:110:GLN:HG2	1:A:77:SER:HB2	4	0.13
(1,2907)	1:A:84:CYS:HB3	1:A:154:LYS:HB3	4	0.13
(1,2907)	1:A:153:PRO:HD3	1:A:154:LYS:HB3	4	0.13
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG22	8	0.13
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG21	8	0.13
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG23	8	0.13
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG12	8	0.13
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG11	8	0.13
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG13	8	0.13
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:33:LEU:HD22	8	0.13
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:33:LEU:HD21	8	0.13
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:33:LEU:HD23	8	0.13
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG22	10	0.13
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG21	10	0.13
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG23	10	0.13
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG12	10	0.13
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG11	10	0.13
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG13	10	0.13
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:33:LEU:HD22	10	0.13
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:33:LEU:HD21	10	0.13
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:33:LEU:HD23	10	0.13
(1,2892)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HE2	7	0.13
(1,2892)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HE3	7	0.13
(1,2892)	1:A:80:CYS:HB2	1:A:11:CYS:HB2	7	0.13
(1,2892)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HE2	9	0.13
(1,2892)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HE3	9	0.13
(1,2892)	1:A:80:CYS:HB2	1:A:11:CYS:HB2	9	0.13
(1,2850)	1:A:101:MET:HB3	1:A:99:THR:HG21	1	0.13
(1,2850)	1:A:101:MET:HB3	1:A:99:THR:HG22	1	0.13
(1,2850)	1:A:101:MET:HB3	1:A:99:THR:HG23	1	0.13
(1,2850)	1:A:100:ALA:HB2	1:A:101:MET:HB3	1	0.13
(1,2850)	1:A:100:ALA:HB1	1:A:101:MET:HB3	1	0.13
(1,2850)	1:A:100:ALA:HB3	1:A:101:MET:HB3	1	0.13
(1,2850)	1:A:101:MET:HB3	1:A:99:THR:HG21	4	0.13
(1,2850)	1:A:101:MET:HB3	1:A:99:THR:HG22	4	0.13
(1,2850)	1:A:101:MET:HB3	1:A:99:THR:HG23	4	0.13
(1,2850)	1:A:100:ALA:HB2	1:A:101:MET:HB3	4	0.13

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2850)	1:A:100:ALA:HB1	1:A:101:MET:HB3	4	0.13
(1,2850)	1:A:100:ALA:HB3	1:A:101:MET:HB3	4	0.13
(1,2850)	1:A:101:MET:HB3	1:A:99:THR:HG21	6	0.13
(1,2850)	1:A:101:MET:HB3	1:A:99:THR:HG22	6	0.13
(1,2850)	1:A:101:MET:HB3	1:A:99:THR:HG23	6	0.13
(1,2850)	1:A:100:ALA:HB2	1:A:101:MET:HB3	6	0.13
(1,2850)	1:A:100:ALA:HB1	1:A:101:MET:HB3	6	0.13
(1,2850)	1:A:100:ALA:HB3	1:A:101:MET:HB3	6	0.13
(1,2839)	1:A:30:ASP:HB3	1:A:29:PRO:HB2	1	0.13
(1,2839)	1:A:30:ASP:HB3	1:A:29:PRO:HG2	1	0.13
(1,2839)	1:A:30:ASP:HB3	1:A:29:PRO:HG3	1	0.13
(1,2825)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:57:MET:HB2	1	0.13
(1,2825)	1:A:107:ALA:HB2	1:A:108:ASP:HB2	1	0.13
(1,2825)	1:A:107:ALA:HB1	1:A:108:ASP:HB2	1	0.13
(1,2825)	1:A:107:ALA:HB3	1:A:108:ASP:HB2	1	0.13
(1,2824)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:44:ASP:HB2	8	0.13
(1,2824)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:44:ASP:HB2	8	0.13
(1,2824)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:44:ASP:HB2	8	0.13
(1,2824)	1:A:149:VAL:HG12	1:A:125:ASN:HB2	8	0.13
(1,2824)	1:A:149:VAL:HG11	1:A:125:ASN:HB2	8	0.13
(1,2824)	1:A:149:VAL:HG13	1:A:125:ASN:HB2	8	0.13
(1,2811)	1:A:128:ASP:HB2	1:A:130:LYS:HG2	3	0.13
(1,2811)	1:A:128:ASP:HB2	1:A:130:LYS:HG3	3	0.13
(1,2753)	1:A:136:ARG:HA	1:A:136:ARG:HD2	5	0.13
(1,2753)	1:A:136:ARG:HA	1:A:136:ARG:HD3	5	0.13
(1,2713)	1:A:148:GLY:HA2	1:A:147:LEU:HB2	2	0.13
(1,2713)	1:A:160:GLY:HA3	1:A:114:ALA:HB2	2	0.13
(1,2713)	1:A:160:GLY:HA3	1:A:114:ALA:HB1	2	0.13
(1,2713)	1:A:160:GLY:HA3	1:A:114:ALA:HB3	2	0.13
(1,2709)	1:A:148:GLY:HA2	1:A:146:VAL:HB	6	0.13
(1,2709)	1:A:148:GLY:HA2	1:A:147:LEU:HB3	6	0.13
(1,2709)	1:A:148:GLY:HA2	1:A:146:VAL:HB	9	0.13
(1,2709)	1:A:148:GLY:HA2	1:A:147:LEU:HB3	9	0.13
(1,2690)	1:A:94:ALA:HA	1:A:134:LYS:HB3	10	0.13
(1,2690)	1:A:94:ALA:HA	1:A:95:PRO:HG2	10	0.13
(1,269)	1:A:75:THR:HG21	1:A:77:SER:H	1	0.13
(1,269)	1:A:75:THR:HG22	1:A:77:SER:H	1	0.13
(1,269)	1:A:75:THR:HG23	1:A:77:SER:H	1	0.13
(1,269)	1:A:75:THR:HG21	1:A:77:SER:H	2	0.13
(1,269)	1:A:75:THR:HG22	1:A:77:SER:H	2	0.13
(1,269)	1:A:75:THR:HG23	1:A:77:SER:H	2	0.13
(1,269)	1:A:75:THR:HG21	1:A:77:SER:H	5	0.13

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,269)	1:A:75:THR:HG22	1:A:77:SER:H	5	0.13
(1,269)	1:A:75:THR:HG23	1:A:77:SER:H	5	0.13
(1,269)	1:A:75:THR:HG21	1:A:77:SER:H	10	0.13
(1,269)	1:A:75:THR:HG22	1:A:77:SER:H	10	0.13
(1,269)	1:A:75:THR:HG23	1:A:77:SER:H	10	0.13
(1,264)	1:A:136:ARG:HA	1:A:137:GLY:HA2	4	0.13
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG12	1:A:134:LYS:HB2	3	0.13
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG11	1:A:134:LYS:HB2	3	0.13
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG13	1:A:134:LYS:HB2	3	0.13
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG12	1:A:134:LYS:HG3	3	0.13
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG11	1:A:134:LYS:HG3	3	0.13
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG13	1:A:134:LYS:HG3	3	0.13
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG12	1:A:134:LYS:HB2	7	0.13
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG11	1:A:134:LYS:HB2	7	0.13
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG13	1:A:134:LYS:HB2	7	0.13
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG12	1:A:134:LYS:HG3	7	0.13
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG11	1:A:134:LYS:HG3	7	0.13
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG13	1:A:134:LYS:HG3	7	0.13
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD22	1:A:17:LYS:HE3	4	0.13
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD21	1:A:17:LYS:HE3	4	0.13
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD23	1:A:17:LYS:HE3	4	0.13
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD22	1:A:48:HIS:HB2	4	0.13
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD21	1:A:48:HIS:HB2	4	0.13
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD23	1:A:48:HIS:HB2	4	0.13
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD22	1:A:68:TYR:HB2	4	0.13
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD21	1:A:68:TYR:HB2	4	0.13
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD23	1:A:68:TYR:HB2	4	0.13
(1,2544)	1:A:154:LYS:HA	1:A:120:GLU:HA	2	0.13
(1,2544)	1:A:154:LYS:HA	1:A:121:ILE:HA	2	0.13
(1,2529)	1:A:116:ASP:HA	1:A:64:LYS:HG2	3	0.13
(1,2529)	1:A:115:ALA:HB2	1:A:116:ASP:HA	3	0.13
(1,2529)	1:A:115:ALA:HB1	1:A:116:ASP:HA	3	0.13
(1,2529)	1:A:115:ALA:HB3	1:A:116:ASP:HA	3	0.13
(1,2486)	1:A:68:TYR:HD1	1:A:68:TYR:HA	2	0.13
(1,2486)	1:A:68:TYR:HD2	1:A:68:TYR:HA	2	0.13
(1,2486)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:123:THR:HA	2	0.13
(1,2486)	1:A:91:TYR:HD2	1:A:123:THR:HA	2	0.13
(1,2486)	1:A:68:TYR:HD1	1:A:68:TYR:HA	10	0.13
(1,2486)	1:A:68:TYR:HD2	1:A:68:TYR:HA	10	0.13
(1,2486)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:123:THR:HA	10	0.13
(1,2486)	1:A:91:TYR:HD2	1:A:123:THR:HA	10	0.13
(1,246)	1:A:119:CYS:HA	1:A:116:ASP:HB3	4	0.13

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,246)	1:A:119:CYS:HA	1:A:116:ASP:HB3	8	0.13
(1,2410)	1:A:31:VAL:H	1:A:6:LYS:H	7	0.13
(1,2410)	1:A:31:VAL:H	1:A:6:LYS:H	9	0.13
(1,2410)	1:A:31:VAL:H	1:A:6:LYS:H	10	0.13
(1,2403)	1:A:19:SER:H	1:A:19:SER:HB2	3	0.13
(1,2198)	1:A:48:HIS:H	1:A:46:CYS:HB2	6	0.13
(1,2091)	1:A:56:LYS:H	1:A:56:LYS:HB3	7	0.13
(1,2059)	1:A:150:THR:H	1:A:149:VAL:HG12	8	0.13
(1,2059)	1:A:150:THR:H	1:A:149:VAL:HG11	8	0.13
(1,2059)	1:A:150:THR:H	1:A:149:VAL:HG13	8	0.13
(1,199)	1:A:73:GLY:H	1:A:71:THR:HG21	5	0.13
(1,199)	1:A:73:GLY:H	1:A:71:THR:HG22	5	0.13
(1,199)	1:A:73:GLY:H	1:A:71:THR:HG23	5	0.13
(1,197)	1:A:99:THR:H	1:A:99:THR:HG21	2	0.13
(1,197)	1:A:99:THR:H	1:A:99:THR:HG22	2	0.13
(1,197)	1:A:99:THR:H	1:A:99:THR:HG23	2	0.13
(1,197)	1:A:99:THR:H	1:A:99:THR:HG21	3	0.13
(1,197)	1:A:99:THR:H	1:A:99:THR:HG22	3	0.13
(1,197)	1:A:99:THR:H	1:A:99:THR:HG23	3	0.13
(1,197)	1:A:99:THR:H	1:A:99:THR:HG21	6	0.13
(1,197)	1:A:99:THR:H	1:A:99:THR:HG22	6	0.13
(1,197)	1:A:99:THR:H	1:A:99:THR:HG23	6	0.13
(1,197)	1:A:99:THR:H	1:A:99:THR:HG21	7	0.13
(1,197)	1:A:99:THR:H	1:A:99:THR:HG22	7	0.13
(1,197)	1:A:99:THR:H	1:A:99:THR:HG23	7	0.13
(1,1799)	1:A:120:GLU:H	1:A:120:GLU:HG3	9	0.13
(1,179)	1:A:68:TYR:H	1:A:67:LEU:HD22	5	0.13
(1,179)	1:A:68:TYR:H	1:A:67:LEU:HD21	5	0.13
(1,179)	1:A:68:TYR:H	1:A:67:LEU:HD23	5	0.13
(1,178)	1:A:67:LEU:H	1:A:67:LEU:HD22	3	0.13
(1,178)	1:A:67:LEU:H	1:A:67:LEU:HD21	3	0.13
(1,178)	1:A:67:LEU:H	1:A:67:LEU:HD23	3	0.13
(1,178)	1:A:67:LEU:H	1:A:67:LEU:HD22	10	0.13
(1,178)	1:A:67:LEU:H	1:A:67:LEU:HD21	10	0.13
(1,178)	1:A:67:LEU:H	1:A:67:LEU:HD23	10	0.13
(1,1724)	1:A:63:GLY:H	1:A:48:HIS:H	8	0.13
(1,1724)	1:A:63:GLY:H	1:A:48:HIS:H	9	0.13
(1,1722)	1:A:74:LYS:H	1:A:74:LYS:HB3	3	0.13
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:123:THR:HG21	5	0.13
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:123:THR:HG22	5	0.13
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:123:THR:HG23	5	0.13
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:123:THR:HG21	5	0.13

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:123:THR:HG22	5	0.13
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:123:THR:HG23	5	0.13
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:123:THR:HG21	5	0.13
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:123:THR:HG22	5	0.13
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:123:THR:HG23	5	0.13
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:123:THR:HG21	6	0.13
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:123:THR:HG22	6	0.13
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:123:THR:HG23	6	0.13
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:123:THR:HG21	6	0.13
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:123:THR:HG22	6	0.13
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:123:THR:HG23	6	0.13
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:123:THR:HG21	6	0.13
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:123:THR:HG22	6	0.13
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:123:THR:HG23	6	0.13
(1,1658)	1:A:39:GLN:HB3	1:A:60:VAL:HG12	4	0.13
(1,1658)	1:A:39:GLN:HB3	1:A:60:VAL:HG11	4	0.13
(1,1658)	1:A:39:GLN:HB3	1:A:60:VAL:HG13	4	0.13
(1,1605)	1:A:33:LEU:HD22	1:A:74:LYS:HB3	8	0.13
(1,1605)	1:A:33:LEU:HD21	1:A:74:LYS:HB3	8	0.13
(1,1605)	1:A:33:LEU:HD23	1:A:74:LYS:HB3	8	0.13
(1,1547)	1:A:61:LYS:H	1:A:61:LYS:HG2	7	0.13
(1,1544)	1:A:12:VAL:HB	1:A:76:ALA:HB2	4	0.13
(1,1544)	1:A:12:VAL:HB	1:A:76:ALA:HB1	4	0.13
(1,1544)	1:A:12:VAL:HB	1:A:76:ALA:HB3	4	0.13
(1,1531)	1:A:61:LYS:HG3	1:A:62:GLU:H	5	0.13
(1,134)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:59:HIS:HD2	5	0.13
(1,1328)	1:A:105:GLN:HE22	1:A:105:GLN:HG3	6	0.13
(1,1304)	1:A:6:LYS:HD3	1:A:56:LYS:HB2	9	0.13
(1,1296)	1:A:56:LYS:HA	1:A:6:LYS:HD2	2	0.13
(1,1296)	1:A:56:LYS:HA	1:A:6:LYS:HD2	3	0.13
(1,1253)	1:A:67:LEU:HD22	1:A:65:PRO:HB2	7	0.13
(1,1253)	1:A:67:LEU:HD21	1:A:65:PRO:HB2	7	0.13
(1,1253)	1:A:67:LEU:HD23	1:A:65:PRO:HB2	7	0.13
(1,1236)	1:A:78:ARG:HB3	1:A:78:ARG:HD3	2	0.13
(1,1215)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:28:VAL:HG22	5	0.13
(1,1215)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:28:VAL:HG21	5	0.13
(1,1215)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:28:VAL:HG23	5	0.13
(1,1215)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:28:VAL:HG12	5	0.13
(1,1215)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:28:VAL:HG11	5	0.13
(1,1215)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:28:VAL:HG13	5	0.13
(1,1116)	1:A:29:PRO:HB2	1:A:57:MET:HA	1	0.13
(1,1116)	1:A:29:PRO:HB2	1:A:57:MET:HA	5	0.13

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1116)	1:A:29:PRO:HB2	1:A:57:MET:HA	8	0.13
(1,1116)	1:A:29:PRO:HB2	1:A:57:MET:HA	9	0.13
(1,108)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:58:CYS:HA	3	0.13
(1,108)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:58:CYS:HA	3	0.13
(1,108)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:58:CYS:HA	3	0.13
(1,964)	1:A:67:LEU:HD22	1:A:17:LYS:HB2	8	0.12
(1,964)	1:A:67:LEU:HD21	1:A:17:LYS:HB2	8	0.12
(1,964)	1:A:67:LEU:HD23	1:A:17:LYS:HB2	8	0.12
(1,953)	1:A:7:LEU:H	1:A:34:GLU:HG2	7	0.12
(1,953)	1:A:7:LEU:H	1:A:34:GLU:HG2	10	0.12
(1,938)	1:A:16:ASN:HD22	1:A:16:ASN:HB2	2	0.12
(1,932)	1:A:16:ASN:HD22	1:A:16:ASN:HB3	8	0.12
(1,914)	1:A:125:ASN:H	1:A:130:LYS:HB2	4	0.12
(1,894)	1:A:102:VAL:H	1:A:101:MET:HB2	4	0.12
(1,888)	1:A:101:MET:HB3	1:A:102:VAL:H	10	0.12
(1,832)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:51:TYR:HA	9	0.12
(1,758)	1:A:64:LYS:H	1:A:64:LYS:HE2	2	0.12
(1,758)	1:A:64:LYS:H	1:A:64:LYS:HE3	2	0.12
(1,755)	1:A:113:CYS:HB3	1:A:112:ALA:HB2	8	0.12
(1,755)	1:A:113:CYS:HB3	1:A:112:ALA:HB1	8	0.12
(1,755)	1:A:113:CYS:HB3	1:A:112:ALA:HB3	8	0.12
(1,733)	1:A:132:THR:H	1:A:131:CYS:HB2	6	0.12
(1,729)	1:A:17:LYS:HE2	1:A:67:LEU:HD22	2	0.12
(1,729)	1:A:17:LYS:HE2	1:A:67:LEU:HD21	2	0.12
(1,729)	1:A:17:LYS:HE2	1:A:67:LEU:HD23	2	0.12
(1,69)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:85:PHE:HZ	9	0.12
(1,625)	1:A:44:ASP:HA	1:A:45:GLY:HA2	7	0.12
(1,625)	1:A:44:ASP:HA	1:A:45:GLY:HA2	9	0.12
(1,555)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:70:LEU:HB3	2	0.12
(1,555)	1:A:73:GLY:HA2	1:A:70:LEU:HB3	3	0.12
(1,495)	1:A:94:ALA:HB2	1:A:134:LYS:HA	10	0.12
(1,495)	1:A:94:ALA:HB1	1:A:134:LYS:HA	10	0.12
(1,495)	1:A:94:ALA:HB3	1:A:134:LYS:HA	10	0.12
(1,456)	1:A:38:ALA:HB2	1:A:35:GLN:HG2	4	0.12
(1,456)	1:A:38:ALA:HB2	1:A:35:GLN:HG3	4	0.12
(1,456)	1:A:38:ALA:HB1	1:A:35:GLN:HG2	4	0.12
(1,456)	1:A:38:ALA:HB1	1:A:35:GLN:HG3	4	0.12
(1,456)	1:A:38:ALA:HB3	1:A:35:GLN:HG2	4	0.12
(1,456)	1:A:38:ALA:HB3	1:A:35:GLN:HG3	4	0.12
(1,427)	1:A:36:CYS:HA	1:A:31:VAL:HG22	5	0.12
(1,427)	1:A:36:CYS:HA	1:A:31:VAL:HG21	5	0.12
(1,427)	1:A:36:CYS:HA	1:A:31:VAL:HG23	5	0.12

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,427)	1:A:36:CYS:HA	1:A:31:VAL:HG22	6	0.12
(1,427)	1:A:36:CYS:HA	1:A:31:VAL:HG21	6	0.12
(1,427)	1:A:36:CYS:HA	1:A:31:VAL:HG23	6	0.12
(1,427)	1:A:36:CYS:HA	1:A:31:VAL:HG22	7	0.12
(1,427)	1:A:36:CYS:HA	1:A:31:VAL:HG21	7	0.12
(1,427)	1:A:36:CYS:HA	1:A:31:VAL:HG23	7	0.12
(1,427)	1:A:36:CYS:HA	1:A:31:VAL:HG22	8	0.12
(1,427)	1:A:36:CYS:HA	1:A:31:VAL:HG21	8	0.12
(1,427)	1:A:36:CYS:HA	1:A:31:VAL:HG23	8	0.12
(1,404)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:9:LEU:HD12	5	0.12
(1,404)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:9:LEU:HD11	5	0.12
(1,404)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:9:LEU:HD13	5	0.12
(1,404)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:9:LEU:HD12	5	0.12
(1,404)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:9:LEU:HD11	5	0.12
(1,404)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:9:LEU:HD13	5	0.12
(1,404)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:9:LEU:HD12	5	0.12
(1,404)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:9:LEU:HD11	5	0.12
(1,404)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:9:LEU:HD13	5	0.12
(1,404)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:9:LEU:HD12	8	0.12
(1,404)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:9:LEU:HD11	8	0.12
(1,404)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:9:LEU:HD13	8	0.12
(1,404)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:9:LEU:HD12	8	0.12
(1,404)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:9:LEU:HD11	8	0.12
(1,404)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:9:LEU:HD13	8	0.12
(1,404)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:9:LEU:HD12	8	0.12
(1,404)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:9:LEU:HD11	8	0.12
(1,404)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:9:LEU:HD13	8	0.12
(1,404)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:9:LEU:HD12	9	0.12
(1,404)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:9:LEU:HD11	9	0.12
(1,404)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:9:LEU:HD13	9	0.12
(1,404)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:9:LEU:HD12	9	0.12
(1,404)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:9:LEU:HD11	9	0.12
(1,404)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:9:LEU:HD13	9	0.12
(1,404)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:9:LEU:HD12	9	0.12
(1,404)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:9:LEU:HD11	9	0.12
(1,404)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:9:LEU:HD13	9	0.12
(1,371)	1:A:6:LYS:H	1:A:5:ALA:HB2	1	0.12
(1,371)	1:A:6:LYS:H	1:A:5:ALA:HB1	1	0.12
(1,371)	1:A:6:LYS:H	1:A:5:ALA:HB3	1	0.12
(1,3507)	1:A:35:GLN:HE21	1:A:4:PRO:HG2	8	0.12
(1,3507)	1:A:35:GLN:HE21	1:A:4:PRO:HG3	8	0.12
(1,3507)	1:A:35:GLN:HE21	1:A:35:GLN:HB2	8	0.12

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3493)	1:A:55:SER:H	1:A:53:ASP:HB2	2	0.12
(1,3493)	1:A:129:GLN:HE21	1:A:125:ASN:HB2	2	0.12
(1,3493)	1:A:129:GLN:HE21	1:A:128:ASP:HB3	2	0.12
(1,3457)	1:A:125:ASN:HD22	1:A:126:GLU:H	4	0.12
(1,3457)	1:A:127:HIS:H	1:A:125:ASN:HD22	4	0.12
(1,3411)	1:A:115:ALA:H	1:A:65:PRO:HD2	2	0.12
(1,3411)	1:A:115:ALA:H	1:A:113:CYS:HB3	2	0.12
(1,3411)	1:A:115:ALA:H	1:A:65:PRO:HD2	3	0.12
(1,3411)	1:A:115:ALA:H	1:A:113:CYS:HB3	3	0.12
(1,3411)	1:A:115:ALA:H	1:A:65:PRO:HD2	9	0.12
(1,3411)	1:A:115:ALA:H	1:A:113:CYS:HB3	9	0.12
(1,3355)	1:A:146:VAL:H	1:A:145:GLY:HA3	8	0.12
(1,3355)	1:A:64:LYS:H	1:A:112:ALA:HA	8	0.12
(1,3355)	1:A:146:VAL:H	1:A:145:GLY:HA3	9	0.12
(1,3355)	1:A:64:LYS:H	1:A:112:ALA:HA	9	0.12
(1,328)	1:A:100:ALA:HB2	1:A:101:MET:HA	2	0.12
(1,328)	1:A:100:ALA:HB1	1:A:101:MET:HA	2	0.12
(1,328)	1:A:100:ALA:HB3	1:A:101:MET:HA	2	0.12
(1,3226)	1:A:85:PHE:H	1:A:82:ARG:HG3	2	0.12
(1,3226)	1:A:85:PHE:H	1:A:150:THR:HG21	2	0.12
(1,3226)	1:A:85:PHE:H	1:A:150:THR:HG22	2	0.12
(1,3226)	1:A:85:PHE:H	1:A:150:THR:HG23	2	0.12
(1,3226)	1:A:85:PHE:H	1:A:82:ARG:HG3	5	0.12
(1,3226)	1:A:85:PHE:H	1:A:150:THR:HG21	5	0.12
(1,3226)	1:A:85:PHE:H	1:A:150:THR:HG22	5	0.12
(1,3226)	1:A:85:PHE:H	1:A:150:THR:HG23	5	0.12
(1,3226)	1:A:85:PHE:H	1:A:82:ARG:HG3	8	0.12
(1,3226)	1:A:85:PHE:H	1:A:150:THR:HG21	8	0.12
(1,3226)	1:A:85:PHE:H	1:A:150:THR:HG22	8	0.12
(1,3226)	1:A:85:PHE:H	1:A:150:THR:HG23	8	0.12
(1,3226)	1:A:85:PHE:H	1:A:82:ARG:HG3	9	0.12
(1,3226)	1:A:85:PHE:H	1:A:150:THR:HG21	9	0.12
(1,3226)	1:A:85:PHE:H	1:A:150:THR:HG22	9	0.12
(1,3226)	1:A:85:PHE:H	1:A:150:THR:HG23	9	0.12
(1,3201)	1:A:52:ASN:H	1:A:53:ASP:HB3	2	0.12
(1,3201)	1:A:52:ASN:H	1:A:54:ASP:HB2	2	0.12
(1,3201)	1:A:52:ASN:H	1:A:54:ASP:HB3	2	0.12
(1,3201)	1:A:52:ASN:H	1:A:58:CYS:HB2	2	0.12
(1,3201)	1:A:52:ASN:H	1:A:53:ASP:HB3	8	0.12
(1,3201)	1:A:52:ASN:H	1:A:54:ASP:HB2	8	0.12
(1,3201)	1:A:52:ASN:H	1:A:54:ASP:HB3	8	0.12
(1,3201)	1:A:52:ASN:H	1:A:58:CYS:HB2	8	0.12

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3170)	1:A:51:TYR:H	1:A:19:SER:H	4	0.12
(1,3170)	1:A:51:TYR:H	1:A:49:PHE:HE1	4	0.12
(1,3170)	1:A:51:TYR:H	1:A:49:PHE:HE2	4	0.12
(1,3146)	1:A:156:PHE:HA	1:A:159:GLU:HG2	1	0.12
(1,3146)	1:A:156:PHE:HA	1:A:159:GLU:HG3	1	0.12
(1,3121)	1:A:33:LEU:HD22	1:A:32:SER:H	6	0.12
(1,3121)	1:A:33:LEU:HD21	1:A:32:SER:H	6	0.12
(1,3121)	1:A:33:LEU:HD23	1:A:32:SER:H	6	0.12
(1,3121)	1:A:34:GLU:H	1:A:33:LEU:HD22	6	0.12
(1,3121)	1:A:34:GLU:H	1:A:33:LEU:HD21	6	0.12
(1,3121)	1:A:34:GLU:H	1:A:33:LEU:HD23	6	0.12
(1,3119)	1:A:6:LYS:HG2	1:A:53:ASP:H	6	0.12
(1,3119)	1:A:6:LYS:HG3	1:A:53:ASP:H	6	0.12
(1,3092)	1:A:11:CYS:H	1:A:76:ALA:HB2	3	0.12
(1,3092)	1:A:11:CYS:H	1:A:76:ALA:HB1	3	0.12
(1,3092)	1:A:11:CYS:H	1:A:76:ALA:HB3	3	0.12
(1,3092)	1:A:49:PHE:H	1:A:76:ALA:HB2	3	0.12
(1,3092)	1:A:49:PHE:H	1:A:76:ALA:HB1	3	0.12
(1,3092)	1:A:49:PHE:H	1:A:76:ALA:HB3	3	0.12
(1,3055)	1:A:144:ARG:HG2	1:A:144:ARG:H	7	0.12
(1,3055)	1:A:144:ARG:HG3	1:A:144:ARG:H	7	0.12
(1,3055)	1:A:18:GLY:H	1:A:17:LYS:HD3	7	0.12
(1,3051)	1:A:65:PRO:HG2	1:A:66:ASP:HB2	7	0.12
(1,3051)	1:A:108:ASP:HB2	1:A:65:PRO:HG2	7	0.12
(1,3051)	1:A:65:PRO:HG2	1:A:66:ASP:HB2	9	0.12
(1,3051)	1:A:108:ASP:HB2	1:A:65:PRO:HG2	9	0.12
(1,3044)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:87:GLN:HB2	5	0.12
(1,3044)	1:A:146:VAL:HB	1:A:88:HIS:HB2	5	0.12
(1,3044)	1:A:88:HIS:HB2	1:A:147:LEU:HG	5	0.12
(1,3041)	1:A:118:SER:HB2	1:A:117:PRO:HG2	5	0.12
(1,3041)	1:A:118:SER:HB2	1:A:117:PRO:HG3	5	0.12
(1,3041)	1:A:118:SER:HB3	1:A:117:PRO:HG2	5	0.12
(1,3041)	1:A:118:SER:HB3	1:A:117:PRO:HG3	5	0.12
(1,3036)	1:A:55:SER:HB3	1:A:52:ASN:HB2	8	0.12
(1,3036)	1:A:55:SER:HB3	1:A:57:MET:HG2	8	0.12
(1,3036)	1:A:55:SER:HB3	1:A:57:MET:HG3	8	0.12
(1,3036)	1:A:55:SER:HB3	1:A:52:ASN:HB2	9	0.12
(1,3036)	1:A:55:SER:HB3	1:A:57:MET:HG2	9	0.12
(1,3036)	1:A:55:SER:HB3	1:A:57:MET:HG3	9	0.12
(1,3032)	1:A:27:PRO:HG2	1:A:28:VAL:H	3	0.12
(1,3032)	1:A:27:PRO:HG2	1:A:58:CYS:H	3	0.12
(1,3008)	1:A:64:LYS:HD3	1:A:116:ASP:HA	7	0.12

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3008)	1:A:105:GLN:HG2	1:A:11:CYS:HA	7	0.12
(1,3008)	1:A:130:LYS:HD2	1:A:130:LYS:HA	7	0.12
(1,3008)	1:A:130:LYS:HD3	1:A:130:LYS:HA	7	0.12
(1,3004)	1:A:56:LYS:H	1:A:6:LYS:HD2	7	0.12
(1,3004)	1:A:56:LYS:H	1:A:56:LYS:HD2	7	0.12
(1,3004)	1:A:56:LYS:H	1:A:56:LYS:HD3	7	0.12
(1,2983)	1:A:61:LYS:HD3	1:A:21:ALA:HA	1	0.12
(1,2983)	1:A:61:LYS:HD3	1:A:23:THR:HA	1	0.12
(1,2983)	1:A:61:LYS:HD3	1:A:21:ALA:HA	5	0.12
(1,2983)	1:A:61:LYS:HD3	1:A:23:THR:HA	5	0.12
(1,2983)	1:A:61:LYS:HD3	1:A:21:ALA:HA	9	0.12
(1,2983)	1:A:61:LYS:HD3	1:A:23:THR:HA	9	0.12
(1,2983)	1:A:61:LYS:HD3	1:A:21:ALA:HA	10	0.12
(1,2983)	1:A:61:LYS:HD3	1:A:23:THR:HA	10	0.12
(1,2974)	1:A:25:GLY:HA2	1:A:26:GLU:HB2	6	0.12
(1,2974)	1:A:25:GLY:HA3	1:A:26:GLU:HB2	6	0.12
(1,2974)	1:A:98:MET:HG2	1:A:113:CYS:HA	6	0.12
(1,2974)	1:A:98:MET:HG2	1:A:119:CYS:HB3	6	0.12
(1,2967)	1:A:159:GLU:HB3	1:A:156:PHE:HD1	3	0.12
(1,2967)	1:A:159:GLU:HB3	1:A:156:PHE:HD2	3	0.12
(1,2967)	1:A:159:GLU:H	1:A:159:GLU:HB3	3	0.12
(1,2965)	1:A:65:PRO:HB2	1:A:48:HIS:HB2	6	0.12
(1,2965)	1:A:65:PRO:HD3	1:A:65:PRO:HB2	6	0.12
(1,2945)	1:A:102:VAL:HB	1:A:17:LYS:HD2	2	0.12
(1,2945)	1:A:102:VAL:HB	1:A:130:LYS:HG2	2	0.12
(1,2945)	1:A:102:VAL:HB	1:A:130:LYS:HG3	2	0.12
(1,2945)	1:A:102:VAL:HB	1:A:17:LYS:HD2	6	0.12
(1,2945)	1:A:102:VAL:HB	1:A:130:LYS:HG2	6	0.12
(1,2945)	1:A:102:VAL:HB	1:A:130:LYS:HG3	6	0.12
(1,2938)	1:A:57:MET:HG2	1:A:50:THR:HG21	8	0.12
(1,2938)	1:A:57:MET:HG2	1:A:50:THR:HG22	8	0.12
(1,2938)	1:A:57:MET:HG2	1:A:50:THR:HG23	8	0.12
(1,2938)	1:A:57:MET:HG3	1:A:50:THR:HG21	8	0.12
(1,2938)	1:A:57:MET:HG3	1:A:50:THR:HG22	8	0.12
(1,2938)	1:A:57:MET:HG3	1:A:50:THR:HG23	8	0.12
(1,2938)	1:A:101:MET:HG2	1:A:103:THR:HG21	8	0.12
(1,2938)	1:A:101:MET:HG2	1:A:103:THR:HG22	8	0.12
(1,2938)	1:A:101:MET:HG2	1:A:103:THR:HG23	8	0.12
(1,2928)	1:A:39:GLN:HG2	1:A:36:CYS:HA	6	0.12
(1,2928)	1:A:39:GLN:HG3	1:A:27:PRO:HA	6	0.12
(1,2928)	1:A:39:GLN:HG3	1:A:36:CYS:HA	6	0.12
(1,2903)	1:A:28:VAL:HB	1:A:31:VAL:HA	1	0.12

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2903)	1:A:28:VAL:HB	1:A:57:MET:HA	1	0.12
(1,2903)	1:A:28:VAL:HB	1:A:31:VAL:HA	3	0.12
(1,2903)	1:A:28:VAL:HB	1:A:57:MET:HA	3	0.12
(1,2903)	1:A:28:VAL:HB	1:A:31:VAL:HA	7	0.12
(1,2903)	1:A:28:VAL:HB	1:A:57:MET:HA	7	0.12
(1,2892)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HE2	3	0.12
(1,2892)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HE3	3	0.12
(1,2892)	1:A:80:CYS:HB2	1:A:11:CYS:HB2	3	0.12
(1,2859)	1:A:16:ASN:HB2	1:A:17:LYS:HG3	2	0.12
(1,2859)	1:A:71:THR:HG21	1:A:16:ASN:HB2	2	0.12
(1,2859)	1:A:71:THR:HG22	1:A:16:ASN:HB2	2	0.12
(1,2859)	1:A:71:THR:HG23	1:A:16:ASN:HB2	2	0.12
(1,2839)	1:A:30:ASP:HB3	1:A:29:PRO:HB2	5	0.12
(1,2839)	1:A:30:ASP:HB3	1:A:29:PRO:HG2	5	0.12
(1,2839)	1:A:30:ASP:HB3	1:A:29:PRO:HG3	5	0.12
(1,2839)	1:A:30:ASP:HB3	1:A:29:PRO:HB2	10	0.12
(1,2839)	1:A:30:ASP:HB3	1:A:29:PRO:HG2	10	0.12
(1,2839)	1:A:30:ASP:HB3	1:A:29:PRO:HG3	10	0.12
(1,2825)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:57:MET:HB2	3	0.12
(1,2825)	1:A:107:ALA:HB2	1:A:108:ASP:HB2	3	0.12
(1,2825)	1:A:107:ALA:HB1	1:A:108:ASP:HB2	3	0.12
(1,2825)	1:A:107:ALA:HB3	1:A:108:ASP:HB2	3	0.12
(1,2824)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:44:ASP:HB2	9	0.12
(1,2824)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:44:ASP:HB2	9	0.12
(1,2824)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:44:ASP:HB2	9	0.12
(1,2824)	1:A:149:VAL:HG12	1:A:125:ASN:HB2	9	0.12
(1,2824)	1:A:149:VAL:HG11	1:A:125:ASN:HB2	9	0.12
(1,2824)	1:A:149:VAL:HG13	1:A:125:ASN:HB2	9	0.12
(1,2811)	1:A:128:ASP:HB2	1:A:130:LYS:HG2	7	0.12
(1,2811)	1:A:128:ASP:HB2	1:A:130:LYS:HG3	7	0.12
(1,2784)	1:A:101:MET:H	1:A:130:LYS:HE2	1	0.12
(1,2784)	1:A:130:LYS:HE3	1:A:125:ASN:H	1	0.12
(1,2784)	1:A:101:MET:H	1:A:131:CYS:HB3	1	0.12
(1,2784)	1:A:101:MET:H	1:A:130:LYS:HE2	8	0.12
(1,2784)	1:A:130:LYS:HE3	1:A:125:ASN:H	8	0.12
(1,2784)	1:A:101:MET:H	1:A:131:CYS:HB3	8	0.12
(1,2716)	1:A:160:GLY:HA2	1:A:156:PHE:HD1	5	0.12
(1,2716)	1:A:160:GLY:HA2	1:A:156:PHE:HD2	5	0.12
(1,2716)	1:A:159:GLU:H	1:A:160:GLY:HA2	5	0.12
(1,2709)	1:A:148:GLY:HA2	1:A:146:VAL:HB	7	0.12
(1,2709)	1:A:148:GLY:HA2	1:A:147:LEU:HB3	7	0.12
(1,2707)	1:A:148:GLY:HA3	1:A:147:LEU:HD22	4	0.12

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2707)	1:A:148:GLY:HA3	1:A:147:LEU:HD21	4	0.12
(1,2707)	1:A:148:GLY:HA3	1:A:147:LEU:HD23	4	0.12
(1,2707)	1:A:148:GLY:HA3	1:A:149:VAL:HG22	4	0.12
(1,2707)	1:A:148:GLY:HA3	1:A:149:VAL:HG21	4	0.12
(1,2707)	1:A:148:GLY:HA3	1:A:149:VAL:HG23	4	0.12
(1,2690)	1:A:94:ALA:HA	1:A:134:LYS:HB3	1	0.12
(1,2690)	1:A:94:ALA:HA	1:A:95:PRO:HG2	1	0.12
(1,2690)	1:A:94:ALA:HA	1:A:134:LYS:HB3	9	0.12
(1,2690)	1:A:94:ALA:HA	1:A:95:PRO:HG2	9	0.12
(1,269)	1:A:75:THR:HG21	1:A:77:SER:H	4	0.12
(1,269)	1:A:75:THR:HG22	1:A:77:SER:H	4	0.12
(1,269)	1:A:75:THR:HG23	1:A:77:SER:H	4	0.12
(1,269)	1:A:75:THR:HG21	1:A:77:SER:H	7	0.12
(1,269)	1:A:75:THR:HG22	1:A:77:SER:H	7	0.12
(1,269)	1:A:75:THR:HG23	1:A:77:SER:H	7	0.12
(1,2645)	1:A:155:GLN:HA	1:A:155:GLN:HG2	1	0.12
(1,2645)	1:A:155:GLN:HA	1:A:155:GLN:HG3	1	0.12
(1,2629)	1:A:107:ALA:HB2	1:A:110:GLN:H	1	0.12
(1,2629)	1:A:107:ALA:HB1	1:A:110:GLN:H	1	0.12
(1,2629)	1:A:107:ALA:HB3	1:A:110:GLN:H	1	0.12
(1,2629)	1:A:111:ALA:HB2	1:A:110:GLN:H	1	0.12
(1,2629)	1:A:111:ALA:HB1	1:A:110:GLN:H	1	0.12
(1,2629)	1:A:111:ALA:HB3	1:A:110:GLN:H	1	0.12
(1,2629)	1:A:107:ALA:HB2	1:A:110:GLN:H	4	0.12
(1,2629)	1:A:107:ALA:HB1	1:A:110:GLN:H	4	0.12
(1,2629)	1:A:107:ALA:HB3	1:A:110:GLN:H	4	0.12
(1,2629)	1:A:111:ALA:HB2	1:A:110:GLN:H	4	0.12
(1,2629)	1:A:111:ALA:HB1	1:A:110:GLN:H	4	0.12
(1,2629)	1:A:111:ALA:HB3	1:A:110:GLN:H	4	0.12
(1,2629)	1:A:107:ALA:HB2	1:A:110:GLN:H	5	0.12
(1,2629)	1:A:107:ALA:HB1	1:A:110:GLN:H	5	0.12
(1,2629)	1:A:107:ALA:HB3	1:A:110:GLN:H	5	0.12
(1,2629)	1:A:111:ALA:HB2	1:A:110:GLN:H	5	0.12
(1,2629)	1:A:111:ALA:HB1	1:A:110:GLN:H	5	0.12
(1,2629)	1:A:111:ALA:HB3	1:A:110:GLN:H	5	0.12
(1,2629)	1:A:107:ALA:HB2	1:A:110:GLN:H	7	0.12
(1,2629)	1:A:107:ALA:HB1	1:A:110:GLN:H	7	0.12
(1,2629)	1:A:107:ALA:HB3	1:A:110:GLN:H	7	0.12
(1,2629)	1:A:111:ALA:HB2	1:A:110:GLN:H	7	0.12
(1,2629)	1:A:111:ALA:HB1	1:A:110:GLN:H	7	0.12
(1,2629)	1:A:111:ALA:HB3	1:A:110:GLN:H	7	0.12
(1,2629)	1:A:107:ALA:HB2	1:A:110:GLN:H	8	0.12

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2629)	1:A:107:ALA:HB1	1:A:110:GLN:H	8	0.12
(1,2629)	1:A:107:ALA:HB3	1:A:110:GLN:H	8	0.12
(1,2629)	1:A:111:ALA:HB2	1:A:110:GLN:H	8	0.12
(1,2629)	1:A:111:ALA:HB1	1:A:110:GLN:H	8	0.12
(1,2629)	1:A:111:ALA:HB3	1:A:110:GLN:H	8	0.12
(1,2629)	1:A:107:ALA:HB2	1:A:110:GLN:H	9	0.12
(1,2629)	1:A:107:ALA:HB1	1:A:110:GLN:H	9	0.12
(1,2629)	1:A:107:ALA:HB3	1:A:110:GLN:H	9	0.12
(1,2629)	1:A:111:ALA:HB2	1:A:110:GLN:H	9	0.12
(1,2629)	1:A:111:ALA:HB1	1:A:110:GLN:H	9	0.12
(1,2629)	1:A:111:ALA:HB3	1:A:110:GLN:H	9	0.12
(1,2629)	1:A:107:ALA:HB2	1:A:110:GLN:H	10	0.12
(1,2629)	1:A:107:ALA:HB1	1:A:110:GLN:H	10	0.12
(1,2629)	1:A:107:ALA:HB3	1:A:110:GLN:H	10	0.12
(1,2629)	1:A:111:ALA:HB2	1:A:110:GLN:H	10	0.12
(1,2629)	1:A:111:ALA:HB1	1:A:110:GLN:H	10	0.12
(1,2629)	1:A:111:ALA:HB3	1:A:110:GLN:H	10	0.12
(1,2595)	1:A:75:THR:HG21	1:A:13:HIS:HB2	9	0.12
(1,2595)	1:A:75:THR:HG22	1:A:13:HIS:HB2	9	0.12
(1,2595)	1:A:75:THR:HG23	1:A:13:HIS:HB2	9	0.12
(1,2595)	1:A:75:THR:HG21	1:A:13:HIS:HB3	9	0.12
(1,2595)	1:A:75:THR:HG22	1:A:13:HIS:HB3	9	0.12
(1,2595)	1:A:75:THR:HG23	1:A:13:HIS:HB3	9	0.12
(1,2595)	1:A:75:THR:HG21	1:A:48:HIS:HB3	9	0.12
(1,2595)	1:A:75:THR:HG22	1:A:48:HIS:HB3	9	0.12
(1,2595)	1:A:75:THR:HG23	1:A:48:HIS:HB3	9	0.12
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG12	1:A:134:LYS:HB2	4	0.12
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG11	1:A:134:LYS:HB2	4	0.12
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG13	1:A:134:LYS:HB2	4	0.12
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG12	1:A:134:LYS:HG3	4	0.12
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG11	1:A:134:LYS:HG3	4	0.12
(1,2585)	1:A:97:VAL:HG13	1:A:134:LYS:HG3	4	0.12
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD22	1:A:17:LYS:HE3	2	0.12
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD21	1:A:17:LYS:HE3	2	0.12
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD23	1:A:17:LYS:HE3	2	0.12
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD22	1:A:48:HIS:HB2	2	0.12
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD21	1:A:48:HIS:HB2	2	0.12
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD23	1:A:48:HIS:HB2	2	0.12
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD22	1:A:68:TYR:HB2	2	0.12
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD21	1:A:68:TYR:HB2	2	0.12
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD23	1:A:68:TYR:HB2	2	0.12
(1,2530)	1:A:13:HIS:HD2	1:A:67:LEU:HG	1	0.12

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2530)	1:A:88:HIS:HD2	1:A:87:GLN:HB2	1	0.12
(1,2530)	1:A:88:HIS:HD2	1:A:147:LEU:HB3	1	0.12
(1,2530)	1:A:88:HIS:HD2	1:A:147:LEU:HG	1	0.12
(1,2529)	1:A:116:ASP:HA	1:A:64:LYS:HG2	8	0.12
(1,2529)	1:A:115:ALA:HB2	1:A:116:ASP:HA	8	0.12
(1,2529)	1:A:115:ALA:HB1	1:A:116:ASP:HA	8	0.12
(1,2529)	1:A:115:ALA:HB3	1:A:116:ASP:HA	8	0.12
(1,2486)	1:A:68:TYR:HD1	1:A:68:TYR:HA	1	0.12
(1,2486)	1:A:68:TYR:HD2	1:A:68:TYR:HA	1	0.12
(1,2486)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:123:THR:HA	1	0.12
(1,2486)	1:A:91:TYR:HD2	1:A:123:THR:HA	1	0.12
(1,2486)	1:A:68:TYR:HD1	1:A:68:TYR:HA	7	0.12
(1,2486)	1:A:68:TYR:HD2	1:A:68:TYR:HA	7	0.12
(1,2486)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:123:THR:HA	7	0.12
(1,2486)	1:A:91:TYR:HD2	1:A:123:THR:HA	7	0.12
(1,246)	1:A:119:CYS:HA	1:A:116:ASP:HB3	3	0.12
(1,2410)	1:A:31:VAL:H	1:A:6:LYS:H	4	0.12
(1,2410)	1:A:31:VAL:H	1:A:6:LYS:H	5	0.12
(1,2410)	1:A:31:VAL:H	1:A:6:LYS:H	8	0.12
(1,2403)	1:A:19:SER:H	1:A:19:SER:HB2	8	0.12
(1,2403)	1:A:19:SER:H	1:A:19:SER:HB2	10	0.12
(1,2390)	1:A:145:GLY:H	1:A:89:VAL:HG12	7	0.12
(1,2390)	1:A:145:GLY:H	1:A:89:VAL:HG11	7	0.12
(1,2390)	1:A:145:GLY:H	1:A:89:VAL:HG13	7	0.12
(1,2333)	1:A:57:MET:H	1:A:56:LYS:HG3	6	0.12
(1,2311)	1:A:112:ALA:H	1:A:65:PRO:HD2	5	0.12
(1,2233)	1:A:98:MET:H	1:A:96:ASP:HA	10	0.12
(1,2198)	1:A:48:HIS:H	1:A:46:CYS:HB2	2	0.12
(1,2005)	1:A:15:ASP:H	1:A:16:ASN:H	4	0.12
(1,199)	1:A:73:GLY:H	1:A:71:THR:HG21	3	0.12
(1,199)	1:A:73:GLY:H	1:A:71:THR:HG22	3	0.12
(1,199)	1:A:73:GLY:H	1:A:71:THR:HG23	3	0.12
(1,1782)	1:A:52:ASN:H	1:A:57:MET:HB3	6	0.12
(1,178)	1:A:67:LEU:H	1:A:67:LEU:HD22	4	0.12
(1,178)	1:A:67:LEU:H	1:A:67:LEU:HD21	4	0.12
(1,178)	1:A:67:LEU:H	1:A:67:LEU:HD23	4	0.12
(1,1724)	1:A:63:GLY:H	1:A:48:HIS:H	1	0.12
(1,1724)	1:A:63:GLY:H	1:A:48:HIS:H	3	0.12
(1,1722)	1:A:74:LYS:H	1:A:74:LYS:HB3	2	0.12
(1,1722)	1:A:74:LYS:H	1:A:74:LYS:HB3	4	0.12
(1,1722)	1:A:74:LYS:H	1:A:74:LYS:HB3	5	0.12
(1,1722)	1:A:74:LYS:H	1:A:74:LYS:HB3	6	0.12

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1722)	1:A:74:LYS:H	1:A:74:LYS:HB3	7	0.12
(1,1722)	1:A:74:LYS:H	1:A:74:LYS:HB3	8	0.12
(1,1693)	1:A:20:ARG:HG2	1:A:19:SER:HA	10	0.12
(1,1658)	1:A:39:GLN:HB3	1:A:60:VAL:HG12	8	0.12
(1,1658)	1:A:39:GLN:HB3	1:A:60:VAL:HG11	8	0.12
(1,1658)	1:A:39:GLN:HB3	1:A:60:VAL:HG13	8	0.12
(1,1637)	1:A:106:SER:HA	1:A:103:THR:HG21	7	0.12
(1,1637)	1:A:106:SER:HA	1:A:103:THR:HG22	7	0.12
(1,1637)	1:A:106:SER:HA	1:A:103:THR:HG23	7	0.12
(1,1626)	1:A:130:LYS:HE2	1:A:132:THR:HG21	6	0.12
(1,1626)	1:A:130:LYS:HE2	1:A:132:THR:HG22	6	0.12
(1,1626)	1:A:130:LYS:HE2	1:A:132:THR:HG23	6	0.12
(1,1547)	1:A:61:LYS:H	1:A:61:LYS:HG2	2	0.12
(1,1547)	1:A:61:LYS:H	1:A:61:LYS:HG2	10	0.12
(1,1541)	1:A:76:ALA:HB2	1:A:51:TYR:HE1	3	0.12
(1,1541)	1:A:76:ALA:HB2	1:A:51:TYR:HE2	3	0.12
(1,1541)	1:A:76:ALA:HB1	1:A:51:TYR:HE1	3	0.12
(1,1541)	1:A:76:ALA:HB1	1:A:51:TYR:HE2	3	0.12
(1,1541)	1:A:76:ALA:HB3	1:A:51:TYR:HE1	3	0.12
(1,1541)	1:A:76:ALA:HB3	1:A:51:TYR:HE2	3	0.12
(1,1531)	1:A:61:LYS:HG3	1:A:62:GLU:H	1	0.12
(1,1531)	1:A:61:LYS:HG3	1:A:62:GLU:H	2	0.12
(1,1492)	1:A:74:LYS:H	1:A:70:LEU:HG	2	0.12
(1,14)	1:A:126:GLU:HG3	1:A:124:TYR:HD1	9	0.12
(1,14)	1:A:126:GLU:HG3	1:A:124:TYR:HD2	9	0.12
(1,134)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:59:HIS:HD2	2	0.12
(1,1328)	1:A:105:GLN:HE22	1:A:105:GLN:HG3	1	0.12
(1,1328)	1:A:105:GLN:HE22	1:A:105:GLN:HG3	2	0.12
(1,1328)	1:A:105:GLN:HE22	1:A:105:GLN:HG3	3	0.12
(1,1328)	1:A:105:GLN:HE22	1:A:105:GLN:HG3	7	0.12
(1,1328)	1:A:105:GLN:HE22	1:A:105:GLN:HG3	8	0.12
(1,1306)	1:A:87:GLN:HB2	1:A:87:GLN:HA	2	0.12
(1,1306)	1:A:87:GLN:HB2	1:A:87:GLN:HA	3	0.12
(1,1306)	1:A:87:GLN:HB2	1:A:87:GLN:HA	4	0.12
(1,1306)	1:A:87:GLN:HB2	1:A:87:GLN:HA	5	0.12
(1,1306)	1:A:87:GLN:HB2	1:A:87:GLN:HA	6	0.12
(1,1306)	1:A:87:GLN:HB2	1:A:87:GLN:HA	7	0.12
(1,1306)	1:A:87:GLN:HB2	1:A:87:GLN:HA	8	0.12
(1,1306)	1:A:87:GLN:HB2	1:A:87:GLN:HA	9	0.12
(1,1306)	1:A:87:GLN:HB2	1:A:87:GLN:HA	10	0.12
(1,1304)	1:A:6:LYS:HD3	1:A:56:LYS:HB2	3	0.12
(1,1223)	1:A:86:GLU:HB3	1:A:89:VAL:HG22	1	0.12

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1223)	1:A:86:GLU:HB3	1:A:89:VAL:HG21	1	0.12
(1,1223)	1:A:86:GLU:HB3	1:A:89:VAL:HG23	1	0.12
(1,1179)	1:A:64:LYS:HB2	1:A:112:ALA:HA	2	0.12
(1,1179)	1:A:64:LYS:HB3	1:A:112:ALA:HA	2	0.12
(1,1179)	1:A:64:LYS:HB2	1:A:112:ALA:HA	7	0.12
(1,1179)	1:A:64:LYS:HB3	1:A:112:ALA:HA	7	0.12
(1,1159)	1:A:29:PRO:HB3	1:A:57:MET:HA	1	0.12
(1,1159)	1:A:29:PRO:HB3	1:A:57:MET:HA	5	0.12
(1,1116)	1:A:29:PRO:HB2	1:A:57:MET:HA	6	0.12
(1,1116)	1:A:29:PRO:HB2	1:A:57:MET:HA	7	0.12
(1,1114)	1:A:87:GLN:H	1:A:87:GLN:HG2	1	0.12
(1,108)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:58:CYS:HA	5	0.12
(1,108)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:58:CYS:HA	5	0.12
(1,108)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:58:CYS:HA	5	0.12
(1,1059)	1:A:32:SER:H	1:A:35:GLN:HG2	10	0.12
(1,1059)	1:A:32:SER:H	1:A:35:GLN:HG3	10	0.12
(1,894)	1:A:102:VAL:H	1:A:101:MET:HB2	2	0.11
(1,888)	1:A:101:MET:HB3	1:A:102:VAL:H	8	0.11
(1,830)	1:A:57:MET:H	1:A:52:ASN:HB2	3	0.11
(1,830)	1:A:57:MET:H	1:A:52:ASN:HB2	9	0.11
(1,828)	1:A:55:SER:H	1:A:52:ASN:HB2	2	0.11
(1,758)	1:A:64:LYS:H	1:A:64:LYS:HE2	3	0.11
(1,758)	1:A:64:LYS:H	1:A:64:LYS:HE3	3	0.11
(1,755)	1:A:113:CYS:HB3	1:A:112:ALA:HB2	3	0.11
(1,755)	1:A:113:CYS:HB3	1:A:112:ALA:HB1	3	0.11
(1,755)	1:A:113:CYS:HB3	1:A:112:ALA:HB3	3	0.11
(1,729)	1:A:17:LYS:HE2	1:A:67:LEU:HD22	3	0.11
(1,729)	1:A:17:LYS:HE2	1:A:67:LEU:HD21	3	0.11
(1,729)	1:A:17:LYS:HE2	1:A:67:LEU:HD23	3	0.11
(1,688)	1:A:133:PHE:HB2	1:A:98:MET:HG3	8	0.11
(1,625)	1:A:44:ASP:HA	1:A:45:GLY:HA2	2	0.11
(1,625)	1:A:44:ASP:HA	1:A:45:GLY:HA2	4	0.11
(1,595)	1:A:70:LEU:HB2	1:A:18:GLY:HA2	5	0.11
(1,595)	1:A:70:LEU:HB2	1:A:18:GLY:HA2	7	0.11
(1,523)	1:A:63:GLY:H	1:A:24:ILE:HD12	2	0.11
(1,523)	1:A:63:GLY:H	1:A:24:ILE:HD11	2	0.11
(1,523)	1:A:63:GLY:H	1:A:24:ILE:HD13	2	0.11
(1,519)	1:A:118:SER:H	1:A:117:PRO:HD3	5	0.11
(1,487)	1:A:24:ILE:HG22	1:A:43:VAL:HB	4	0.11
(1,487)	1:A:24:ILE:HG21	1:A:43:VAL:HB	4	0.11
(1,487)	1:A:24:ILE:HG23	1:A:43:VAL:HB	4	0.11
(1,471)	1:A:112:ALA:H	1:A:109:CYS:HA	9	0.11

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,456)	1:A:38:ALA:HB2	1:A:35:GLN:HG2	9	0.11
(1,456)	1:A:38:ALA:HB2	1:A:35:GLN:HG3	9	0.11
(1,456)	1:A:38:ALA:HB1	1:A:35:GLN:HG2	9	0.11
(1,456)	1:A:38:ALA:HB1	1:A:35:GLN:HG3	9	0.11
(1,456)	1:A:38:ALA:HB3	1:A:35:GLN:HG2	9	0.11
(1,456)	1:A:38:ALA:HB3	1:A:35:GLN:HG3	9	0.11
(1,427)	1:A:36:CYS:HA	1:A:31:VAL:HG22	2	0.11
(1,427)	1:A:36:CYS:HA	1:A:31:VAL:HG21	2	0.11
(1,427)	1:A:36:CYS:HA	1:A:31:VAL:HG23	2	0.11
(1,427)	1:A:36:CYS:HA	1:A:31:VAL:HG22	9	0.11
(1,427)	1:A:36:CYS:HA	1:A:31:VAL:HG21	9	0.11
(1,427)	1:A:36:CYS:HA	1:A:31:VAL:HG23	9	0.11
(1,407)	1:A:142:LYS:H	1:A:140:ALA:HB2	2	0.11
(1,407)	1:A:142:LYS:H	1:A:140:ALA:HB1	2	0.11
(1,407)	1:A:142:LYS:H	1:A:140:ALA:HB3	2	0.11
(1,407)	1:A:142:LYS:H	1:A:140:ALA:HB2	9	0.11
(1,407)	1:A:142:LYS:H	1:A:140:ALA:HB1	9	0.11
(1,407)	1:A:142:LYS:H	1:A:140:ALA:HB3	9	0.11
(1,404)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:9:LEU:HD12	3	0.11
(1,404)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:9:LEU:HD11	3	0.11
(1,404)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:9:LEU:HD13	3	0.11
(1,404)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:9:LEU:HD12	3	0.11
(1,404)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:9:LEU:HD11	3	0.11
(1,404)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:9:LEU:HD13	3	0.11
(1,404)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:9:LEU:HD12	3	0.11
(1,404)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:9:LEU:HD11	3	0.11
(1,404)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:9:LEU:HD13	3	0.11
(1,404)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:9:LEU:HD12	4	0.11
(1,404)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:9:LEU:HD11	4	0.11
(1,404)	1:A:37:ALA:HB2	1:A:9:LEU:HD13	4	0.11
(1,404)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:9:LEU:HD12	4	0.11
(1,404)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:9:LEU:HD11	4	0.11
(1,404)	1:A:37:ALA:HB1	1:A:9:LEU:HD13	4	0.11
(1,404)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:9:LEU:HD12	4	0.11
(1,404)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:9:LEU:HD11	4	0.11
(1,404)	1:A:37:ALA:HB3	1:A:9:LEU:HD13	4	0.11
(1,383)	1:A:36:CYS:HA	1:A:58:CYS:HB3	1	0.11
(1,354)	1:A:129:GLN:HA	1:A:102:VAL:HG22	7	0.11
(1,354)	1:A:129:GLN:HA	1:A:102:VAL:HG21	7	0.11
(1,354)	1:A:129:GLN:HA	1:A:102:VAL:HG23	7	0.11
(1,354)	1:A:129:GLN:HA	1:A:102:VAL:HG12	7	0.11
(1,354)	1:A:129:GLN:HA	1:A:102:VAL:HG11	7	0.11

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,354)	1:A:129:GLN:HA	1:A:102:VAL:HG13	7	0.11
(1,354)	1:A:129:GLN:HA	1:A:102:VAL:HG22	9	0.11
(1,354)	1:A:129:GLN:HA	1:A:102:VAL:HG21	9	0.11
(1,354)	1:A:129:GLN:HA	1:A:102:VAL:HG23	9	0.11
(1,354)	1:A:129:GLN:HA	1:A:102:VAL:HG12	9	0.11
(1,354)	1:A:129:GLN:HA	1:A:102:VAL:HG11	9	0.11
(1,354)	1:A:129:GLN:HA	1:A:102:VAL:HG13	9	0.11
(1,3423)	1:A:54:ASP:H	1:A:52:ASN:HB2	7	0.11
(1,3423)	1:A:54:ASP:H	1:A:74:LYS:HB3	7	0.11
(1,3302)	1:A:142:LYS:H	1:A:141:PHE:HD1	7	0.11
(1,3302)	1:A:142:LYS:H	1:A:141:PHE:HD2	7	0.11
(1,3302)	1:A:142:LYS:H	1:A:140:ALA:H	7	0.11
(1,3302)	1:A:142:LYS:H	1:A:141:PHE:HD1	8	0.11
(1,3302)	1:A:142:LYS:H	1:A:141:PHE:HD2	8	0.11
(1,3302)	1:A:142:LYS:H	1:A:140:ALA:H	8	0.11
(1,328)	1:A:100:ALA:HB2	1:A:101:MET:HA	4	0.11
(1,328)	1:A:100:ALA:HB1	1:A:101:MET:HA	4	0.11
(1,328)	1:A:100:ALA:HB3	1:A:101:MET:HA	4	0.11
(1,328)	1:A:100:ALA:HB2	1:A:101:MET:HA	5	0.11
(1,328)	1:A:100:ALA:HB1	1:A:101:MET:HA	5	0.11
(1,328)	1:A:100:ALA:HB3	1:A:101:MET:HA	5	0.11
(1,3226)	1:A:85:PHE:H	1:A:82:ARG:HG3	3	0.11
(1,3226)	1:A:85:PHE:H	1:A:150:THR:HG21	3	0.11
(1,3226)	1:A:85:PHE:H	1:A:150:THR:HG22	3	0.11
(1,3226)	1:A:85:PHE:H	1:A:150:THR:HG23	3	0.11
(1,3201)	1:A:52:ASN:H	1:A:53:ASP:HB3	5	0.11
(1,3201)	1:A:52:ASN:H	1:A:54:ASP:HB2	5	0.11
(1,3201)	1:A:52:ASN:H	1:A:54:ASP:HB3	5	0.11
(1,3201)	1:A:52:ASN:H	1:A:58:CYS:HB2	5	0.11
(1,3191)	1:A:102:VAL:H	1:A:99:THR:HG21	9	0.11
(1,3191)	1:A:102:VAL:H	1:A:99:THR:HG22	9	0.11
(1,3191)	1:A:102:VAL:H	1:A:99:THR:HG23	9	0.11
(1,3191)	1:A:102:VAL:H	1:A:100:ALA:HB2	9	0.11
(1,3191)	1:A:102:VAL:H	1:A:100:ALA:HB1	9	0.11
(1,3191)	1:A:102:VAL:H	1:A:100:ALA:HB3	9	0.11
(1,3139)	1:A:9:LEU:HB2	1:A:12:VAL:HG12	1	0.11
(1,3139)	1:A:9:LEU:HB2	1:A:12:VAL:HG11	1	0.11
(1,3139)	1:A:9:LEU:HB2	1:A:12:VAL:HG13	1	0.11
(1,3139)	1:A:12:VAL:HG12	1:A:33:LEU:HB3	1	0.11
(1,3139)	1:A:12:VAL:HG11	1:A:33:LEU:HB3	1	0.11
(1,3139)	1:A:12:VAL:HG13	1:A:33:LEU:HB3	1	0.11
(1,3139)	1:A:9:LEU:HB2	1:A:12:VAL:HG12	3	0.11

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3139)	1:A:9:LEU:HB2	1:A:12:VAL:HG11	3	0.11
(1,3139)	1:A:9:LEU:HB2	1:A:12:VAL:HG13	3	0.11
(1,3139)	1:A:12:VAL:HG12	1:A:33:LEU:HB3	3	0.11
(1,3139)	1:A:12:VAL:HG11	1:A:33:LEU:HB3	3	0.11
(1,3139)	1:A:12:VAL:HG13	1:A:33:LEU:HB3	3	0.11
(1,3133)	1:A:23:THR:HG21	1:A:61:LYS:HA	4	0.11
(1,3133)	1:A:23:THR:HG22	1:A:61:LYS:HA	4	0.11
(1,3133)	1:A:23:THR:HG23	1:A:61:LYS:HA	4	0.11
(1,3133)	1:A:123:THR:HG21	1:A:150:THR:HA	4	0.11
(1,3133)	1:A:123:THR:HG22	1:A:150:THR:HA	4	0.11
(1,3133)	1:A:123:THR:HG23	1:A:150:THR:HA	4	0.11
(1,3133)	1:A:23:THR:HG21	1:A:61:LYS:HA	7	0.11
(1,3133)	1:A:23:THR:HG22	1:A:61:LYS:HA	7	0.11
(1,3133)	1:A:23:THR:HG23	1:A:61:LYS:HA	7	0.11
(1,3133)	1:A:123:THR:HG21	1:A:150:THR:HA	7	0.11
(1,3133)	1:A:123:THR:HG22	1:A:150:THR:HA	7	0.11
(1,3133)	1:A:123:THR:HG23	1:A:150:THR:HA	7	0.11
(1,3133)	1:A:23:THR:HG21	1:A:61:LYS:HA	9	0.11
(1,3133)	1:A:23:THR:HG22	1:A:61:LYS:HA	9	0.11
(1,3133)	1:A:23:THR:HG23	1:A:61:LYS:HA	9	0.11
(1,3133)	1:A:123:THR:HG21	1:A:150:THR:HA	9	0.11
(1,3133)	1:A:123:THR:HG22	1:A:150:THR:HA	9	0.11
(1,3133)	1:A:123:THR:HG23	1:A:150:THR:HA	9	0.11
(1,3133)	1:A:23:THR:HG21	1:A:61:LYS:HA	10	0.11
(1,3133)	1:A:23:THR:HG22	1:A:61:LYS:HA	10	0.11
(1,3133)	1:A:23:THR:HG23	1:A:61:LYS:HA	10	0.11
(1,3133)	1:A:123:THR:HG21	1:A:150:THR:HA	10	0.11
(1,3133)	1:A:123:THR:HG22	1:A:150:THR:HA	10	0.11
(1,3133)	1:A:123:THR:HG23	1:A:150:THR:HA	10	0.11
(1,3121)	1:A:33:LEU:HD22	1:A:32:SER:H	2	0.11
(1,3121)	1:A:33:LEU:HD21	1:A:32:SER:H	2	0.11
(1,3121)	1:A:33:LEU:HD23	1:A:32:SER:H	2	0.11
(1,3121)	1:A:34:GLU:H	1:A:33:LEU:HD22	2	0.11
(1,3121)	1:A:34:GLU:H	1:A:33:LEU:HD21	2	0.11
(1,3121)	1:A:34:GLU:H	1:A:33:LEU:HD23	2	0.11
(1,3121)	1:A:33:LEU:HD22	1:A:32:SER:H	3	0.11
(1,3121)	1:A:33:LEU:HD21	1:A:32:SER:H	3	0.11
(1,3121)	1:A:33:LEU:HD23	1:A:32:SER:H	3	0.11
(1,3121)	1:A:34:GLU:H	1:A:33:LEU:HD22	3	0.11
(1,3121)	1:A:34:GLU:H	1:A:33:LEU:HD21	3	0.11
(1,3121)	1:A:34:GLU:H	1:A:33:LEU:HD23	3	0.11
(1,3121)	1:A:33:LEU:HD22	1:A:32:SER:H	5	0.11

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3121)	1:A:33:LEU:HD21	1:A:32:SER:H	5	0.11
(1,3121)	1:A:33:LEU:HD23	1:A:32:SER:H	5	0.11
(1,3121)	1:A:34:GLU:H	1:A:33:LEU:HD22	5	0.11
(1,3121)	1:A:34:GLU:H	1:A:33:LEU:HD21	5	0.11
(1,3121)	1:A:34:GLU:H	1:A:33:LEU:HD23	5	0.11
(1,3121)	1:A:33:LEU:HD22	1:A:32:SER:H	8	0.11
(1,3121)	1:A:33:LEU:HD21	1:A:32:SER:H	8	0.11
(1,3121)	1:A:33:LEU:HD23	1:A:32:SER:H	8	0.11
(1,3121)	1:A:34:GLU:H	1:A:33:LEU:HD22	8	0.11
(1,3121)	1:A:34:GLU:H	1:A:33:LEU:HD21	8	0.11
(1,3121)	1:A:34:GLU:H	1:A:33:LEU:HD23	8	0.11
(1,3095)	1:A:13:HIS:HB2	1:A:76:ALA:HB2	5	0.11
(1,3095)	1:A:13:HIS:HB2	1:A:76:ALA:HB1	5	0.11
(1,3095)	1:A:13:HIS:HB2	1:A:76:ALA:HB3	5	0.11
(1,3095)	1:A:13:HIS:HB3	1:A:76:ALA:HB2	5	0.11
(1,3095)	1:A:13:HIS:HB3	1:A:76:ALA:HB1	5	0.11
(1,3095)	1:A:13:HIS:HB3	1:A:76:ALA:HB3	5	0.11
(1,3095)	1:A:13:HIS:HB2	1:A:76:ALA:HB2	7	0.11
(1,3095)	1:A:13:HIS:HB2	1:A:76:ALA:HB1	7	0.11
(1,3095)	1:A:13:HIS:HB2	1:A:76:ALA:HB3	7	0.11
(1,3095)	1:A:13:HIS:HB3	1:A:76:ALA:HB2	7	0.11
(1,3095)	1:A:13:HIS:HB3	1:A:76:ALA:HB1	7	0.11
(1,3095)	1:A:13:HIS:HB3	1:A:76:ALA:HB3	7	0.11
(1,3073)	1:A:6:LYS:HB2	1:A:33:LEU:HD12	3	0.11
(1,3073)	1:A:6:LYS:HB2	1:A:33:LEU:HD11	3	0.11
(1,3073)	1:A:6:LYS:HB2	1:A:33:LEU:HD13	3	0.11
(1,3073)	1:A:6:LYS:HB3	1:A:33:LEU:HD12	3	0.11
(1,3073)	1:A:6:LYS:HB3	1:A:33:LEU:HD11	3	0.11
(1,3073)	1:A:6:LYS:HB3	1:A:33:LEU:HD13	3	0.11
(1,3073)	1:A:33:LEU:HD12	1:A:9:LEU:HB3	3	0.11
(1,3073)	1:A:33:LEU:HD11	1:A:9:LEU:HB3	3	0.11
(1,3073)	1:A:33:LEU:HD13	1:A:9:LEU:HB3	3	0.11
(1,3051)	1:A:65:PRO:HG2	1:A:66:ASP:HB2	3	0.11
(1,3051)	1:A:108:ASP:HB2	1:A:65:PRO:HG2	3	0.11
(1,3032)	1:A:27:PRO:HG2	1:A:28:VAL:H	4	0.11
(1,3032)	1:A:27:PRO:HG2	1:A:58:CYS:H	4	0.11
(1,3032)	1:A:27:PRO:HG2	1:A:28:VAL:H	6	0.11
(1,3032)	1:A:27:PRO:HG2	1:A:58:CYS:H	6	0.11
(1,2983)	1:A:61:LYS:HD3	1:A:21:ALA:HA	6	0.11
(1,2983)	1:A:61:LYS:HD3	1:A:23:THR:HA	6	0.11
(1,2983)	1:A:61:LYS:HD3	1:A:21:ALA:HA	7	0.11
(1,2983)	1:A:61:LYS:HD3	1:A:23:THR:HA	7	0.11

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2952)	1:A:60:VAL:HB	1:A:46:CYS:HA	5	0.11
(1,2952)	1:A:101:MET:HG3	1:A:103:THR:HA	5	0.11
(1,2938)	1:A:57:MET:HG2	1:A:50:THR:HG21	5	0.11
(1,2938)	1:A:57:MET:HG2	1:A:50:THR:HG22	5	0.11
(1,2938)	1:A:57:MET:HG2	1:A:50:THR:HG23	5	0.11
(1,2938)	1:A:57:MET:HG3	1:A:50:THR:HG21	5	0.11
(1,2938)	1:A:57:MET:HG3	1:A:50:THR:HG22	5	0.11
(1,2938)	1:A:57:MET:HG3	1:A:50:THR:HG23	5	0.11
(1,2938)	1:A:101:MET:HG2	1:A:103:THR:HG21	5	0.11
(1,2938)	1:A:101:MET:HG2	1:A:103:THR:HG22	5	0.11
(1,2938)	1:A:101:MET:HG2	1:A:103:THR:HG23	5	0.11
(1,2928)	1:A:39:GLN:HG2	1:A:36:CYS:HA	3	0.11
(1,2928)	1:A:39:GLN:HG3	1:A:27:PRO:HA	3	0.11
(1,2928)	1:A:39:GLN:HG3	1:A:36:CYS:HA	3	0.11
(1,2908)	1:A:142:LYS:HB2	1:A:139:SER:HB3	10	0.11
(1,2908)	1:A:154:LYS:HB3	1:A:160:GLY:HA3	10	0.11
(1,2908)	1:A:110:GLN:HG2	1:A:79:SER:HB2	10	0.11
(1,2903)	1:A:28:VAL:HB	1:A:31:VAL:HA	10	0.11
(1,2903)	1:A:28:VAL:HB	1:A:57:MET:HA	10	0.11
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG22	9	0.11
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG21	9	0.11
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG23	9	0.11
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG12	9	0.11
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG11	9	0.11
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:28:VAL:HG13	9	0.11
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:33:LEU:HD22	9	0.11
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:33:LEU:HD21	9	0.11
(1,2898)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:33:LEU:HD23	9	0.11
(1,2892)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HE2	2	0.11
(1,2892)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:6:LYS:HE3	2	0.11
(1,2892)	1:A:80:CYS:HB2	1:A:11:CYS:HB2	2	0.11
(1,2863)	1:A:7:LEU:HB3	1:A:34:GLU:HG2	5	0.11
(1,2863)	1:A:34:GLU:HG2	1:A:9:LEU:HB2	5	0.11
(1,2858)	1:A:16:ASN:HB3	1:A:17:LYS:HG3	4	0.11
(1,2858)	1:A:16:ASN:HB3	1:A:71:THR:HG21	4	0.11
(1,2858)	1:A:16:ASN:HB3	1:A:71:THR:HG22	4	0.11
(1,2858)	1:A:16:ASN:HB3	1:A:71:THR:HG23	4	0.11
(1,2850)	1:A:101:MET:HB3	1:A:99:THR:HG21	5	0.11
(1,2850)	1:A:101:MET:HB3	1:A:99:THR:HG22	5	0.11
(1,2850)	1:A:101:MET:HB3	1:A:99:THR:HG23	5	0.11
(1,2850)	1:A:100:ALA:HB2	1:A:101:MET:HB3	5	0.11
(1,2850)	1:A:100:ALA:HB1	1:A:101:MET:HB3	5	0.11

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2850)	1:A:100:ALA:HB3	1:A:101:MET:HB3	5	0.11
(1,2839)	1:A:30:ASP:HB3	1:A:29:PRO:HB2	3	0.11
(1,2839)	1:A:30:ASP:HB3	1:A:29:PRO:HG2	3	0.11
(1,2839)	1:A:30:ASP:HB3	1:A:29:PRO:HG3	3	0.11
(1,2839)	1:A:30:ASP:HB3	1:A:29:PRO:HB2	9	0.11
(1,2839)	1:A:30:ASP:HB3	1:A:29:PRO:HG2	9	0.11
(1,2839)	1:A:30:ASP:HB3	1:A:29:PRO:HG3	9	0.11
(1,2824)	1:A:43:VAL:HG22	1:A:44:ASP:HB2	6	0.11
(1,2824)	1:A:43:VAL:HG21	1:A:44:ASP:HB2	6	0.11
(1,2824)	1:A:43:VAL:HG23	1:A:44:ASP:HB2	6	0.11
(1,2824)	1:A:149:VAL:HG12	1:A:125:ASN:HB2	6	0.11
(1,2824)	1:A:149:VAL:HG11	1:A:125:ASN:HB2	6	0.11
(1,2824)	1:A:149:VAL:HG13	1:A:125:ASN:HB2	6	0.11
(1,2818)	1:A:54:ASP:HB2	1:A:72:GLY:HA2	1	0.11
(1,2818)	1:A:54:ASP:HB3	1:A:72:GLY:HA2	1	0.11
(1,2818)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:54:ASP:HB2	1	0.11
(1,2818)	1:A:73:GLY:HA3	1:A:54:ASP:HB3	1	0.11
(1,2786)	1:A:6:LYS:HE2	1:A:6:LYS:HG3	1	0.11
(1,2786)	1:A:6:LYS:HE3	1:A:6:LYS:HG3	1	0.11
(1,2786)	1:A:41:LYS:HE2	1:A:41:LYS:HG2	1	0.11
(1,2786)	1:A:41:LYS:HE3	1:A:41:LYS:HG2	1	0.11
(1,2786)	1:A:56:LYS:HE2	1:A:56:LYS:HG2	1	0.11
(1,2786)	1:A:56:LYS:HE3	1:A:56:LYS:HG2	1	0.11
(1,2709)	1:A:148:GLY:HA2	1:A:146:VAL:HB	1	0.11
(1,2709)	1:A:148:GLY:HA2	1:A:147:LEU:HB3	1	0.11
(1,2709)	1:A:148:GLY:HA2	1:A:146:VAL:HB	2	0.11
(1,2709)	1:A:148:GLY:HA2	1:A:147:LEU:HB3	2	0.11
(1,2707)	1:A:148:GLY:HA3	1:A:147:LEU:HD22	7	0.11
(1,2707)	1:A:148:GLY:HA3	1:A:147:LEU:HD21	7	0.11
(1,2707)	1:A:148:GLY:HA3	1:A:147:LEU:HD23	7	0.11
(1,2707)	1:A:148:GLY:HA3	1:A:149:VAL:HG22	7	0.11
(1,2707)	1:A:148:GLY:HA3	1:A:149:VAL:HG21	7	0.11
(1,2707)	1:A:148:GLY:HA3	1:A:149:VAL:HG23	7	0.11
(1,269)	1:A:75:THR:HG21	1:A:77:SER:H	6	0.11
(1,269)	1:A:75:THR:HG22	1:A:77:SER:H	6	0.11
(1,269)	1:A:75:THR:HG23	1:A:77:SER:H	6	0.11
(1,269)	1:A:75:THR:HG21	1:A:77:SER:H	8	0.11
(1,269)	1:A:75:THR:HG22	1:A:77:SER:H	8	0.11
(1,269)	1:A:75:THR:HG23	1:A:77:SER:H	8	0.11
(1,2655)	1:A:97:VAL:HG22	1:A:134:LYS:HB2	10	0.11
(1,2655)	1:A:97:VAL:HG21	1:A:134:LYS:HB2	10	0.11
(1,2655)	1:A:97:VAL:HG23	1:A:134:LYS:HB2	10	0.11

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2655)	1:A:97:VAL:HG22	1:A:134:LYS:HG3	10	0.11
(1,2655)	1:A:97:VAL:HG21	1:A:134:LYS:HG3	10	0.11
(1,2655)	1:A:97:VAL:HG23	1:A:134:LYS:HG3	10	0.11
(1,264)	1:A:136:ARG:HA	1:A:137:GLY:HA2	1	0.11
(1,264)	1:A:136:ARG:HA	1:A:137:GLY:HA2	6	0.11
(1,2587)	1:A:55:SER:HA	1:A:56:LYS:HB2	1	0.11
(1,2587)	1:A:55:SER:HA	1:A:57:MET:HG2	1	0.11
(1,2587)	1:A:55:SER:HA	1:A:57:MET:HG3	1	0.11
(1,2587)	1:A:55:SER:HA	1:A:56:LYS:HB2	8	0.11
(1,2587)	1:A:55:SER:HA	1:A:57:MET:HG2	8	0.11
(1,2587)	1:A:55:SER:HA	1:A:57:MET:HG3	8	0.11
(1,2586)	1:A:55:SER:HA	1:A:52:ASN:HB3	7	0.11
(1,2586)	1:A:55:SER:HA	1:A:56:LYS:HE3	7	0.11
(1,2586)	1:A:55:SER:HA	1:A:52:ASN:HB3	10	0.11
(1,2586)	1:A:55:SER:HA	1:A:56:LYS:HE3	10	0.11
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD22	1:A:17:LYS:HE3	9	0.11
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD21	1:A:17:LYS:HE3	9	0.11
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD23	1:A:17:LYS:HE3	9	0.11
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD22	1:A:48:HIS:HB2	9	0.11
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD21	1:A:48:HIS:HB2	9	0.11
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD23	1:A:48:HIS:HB2	9	0.11
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD22	1:A:68:TYR:HB2	9	0.11
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD21	1:A:68:TYR:HB2	9	0.11
(1,2549)	1:A:67:LEU:HD23	1:A:68:TYR:HB2	9	0.11
(1,2548)	1:A:31:VAL:HG12	1:A:30:ASP:HA	1	0.11
(1,2548)	1:A:31:VAL:HG11	1:A:30:ASP:HA	1	0.11
(1,2548)	1:A:31:VAL:HG13	1:A:30:ASP:HA	1	0.11
(1,2548)	1:A:31:VAL:HG12	1:A:32:SER:HB3	1	0.11
(1,2548)	1:A:31:VAL:HG11	1:A:32:SER:HB3	1	0.11
(1,2548)	1:A:31:VAL:HG13	1:A:32:SER:HB3	1	0.11
(1,2542)	1:A:92:GLU:HA	1:A:134:LYS:HB2	5	0.11
(1,2542)	1:A:92:GLU:HA	1:A:134:LYS:HG3	5	0.11
(1,2488)	1:A:68:TYR:HD1	1:A:20:ARG:HB2	8	0.11
(1,2488)	1:A:68:TYR:HD1	1:A:20:ARG:HB3	8	0.11
(1,2488)	1:A:68:TYR:HD2	1:A:20:ARG:HB2	8	0.11
(1,2488)	1:A:68:TYR:HD2	1:A:20:ARG:HB3	8	0.11
(1,2488)	1:A:142:LYS:HB3	1:A:91:TYR:HD1	8	0.11
(1,2488)	1:A:142:LYS:HB3	1:A:91:TYR:HD2	8	0.11
(1,2486)	1:A:68:TYR:HD1	1:A:68:TYR:HA	8	0.11
(1,2486)	1:A:68:TYR:HD2	1:A:68:TYR:HA	8	0.11
(1,2486)	1:A:91:TYR:HD1	1:A:123:THR:HA	8	0.11
(1,2486)	1:A:91:TYR:HD2	1:A:123:THR:HA	8	0.11

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,246)	1:A:119:CYS:HA	1:A:116:ASP:HB3	1	0.11
(1,246)	1:A:119:CYS:HA	1:A:116:ASP:HB3	6	0.11
(1,240)	1:A:28:VAL:HG22	1:A:29:PRO:HD2	4	0.11
(1,240)	1:A:28:VAL:HG21	1:A:29:PRO:HD2	4	0.11
(1,240)	1:A:28:VAL:HG23	1:A:29:PRO:HD2	4	0.11
(1,240)	1:A:28:VAL:HG12	1:A:29:PRO:HD2	4	0.11
(1,240)	1:A:28:VAL:HG11	1:A:29:PRO:HD2	4	0.11
(1,240)	1:A:28:VAL:HG13	1:A:29:PRO:HD2	4	0.11
(1,2390)	1:A:145:GLY:H	1:A:89:VAL:HG12	6	0.11
(1,2390)	1:A:145:GLY:H	1:A:89:VAL:HG11	6	0.11
(1,2390)	1:A:145:GLY:H	1:A:89:VAL:HG13	6	0.11
(1,2252)	1:A:113:CYS:H	1:A:122:PHE:HB2	5	0.11
(1,2198)	1:A:48:HIS:H	1:A:46:CYS:HB2	3	0.11
(1,2198)	1:A:48:HIS:H	1:A:46:CYS:HB2	7	0.11
(1,2198)	1:A:48:HIS:H	1:A:46:CYS:HB2	10	0.11
(1,2091)	1:A:56:LYS:H	1:A:56:LYS:HB3	3	0.11
(1,2085)	1:A:102:VAL:H	1:A:101:MET:H	8	0.11
(1,199)	1:A:73:GLY:H	1:A:71:THR:HG21	7	0.11
(1,199)	1:A:73:GLY:H	1:A:71:THR:HG22	7	0.11
(1,199)	1:A:73:GLY:H	1:A:71:THR:HG23	7	0.11
(1,199)	1:A:73:GLY:H	1:A:71:THR:HG21	8	0.11
(1,199)	1:A:73:GLY:H	1:A:71:THR:HG22	8	0.11
(1,199)	1:A:73:GLY:H	1:A:71:THR:HG23	8	0.11
(1,1977)	1:A:151:SER:H	1:A:151:SER:HB2	8	0.11
(1,1901)	1:A:12:VAL:H	1:A:80:CYS:HB3	3	0.11
(1,1867)	1:A:66:ASP:H	1:A:65:PRO:HG2	10	0.11
(1,1799)	1:A:120:GLU:H	1:A:120:GLU:HG3	7	0.11
(1,1782)	1:A:52:ASN:H	1:A:57:MET:HB3	3	0.11
(1,1782)	1:A:52:ASN:H	1:A:57:MET:HB3	8	0.11
(1,1724)	1:A:63:GLY:H	1:A:48:HIS:H	2	0.11
(1,1724)	1:A:63:GLY:H	1:A:48:HIS:H	6	0.11
(1,1724)	1:A:63:GLY:H	1:A:48:HIS:H	7	0.11
(1,1722)	1:A:74:LYS:H	1:A:74:LYS:HB3	1	0.11
(1,1693)	1:A:20:ARG:HG2	1:A:19:SER:HA	6	0.11
(1,1678)	1:A:70:LEU:HG	1:A:70:LEU:HA	2	0.11
(1,1678)	1:A:70:LEU:HG	1:A:70:LEU:HA	4	0.11
(1,1678)	1:A:70:LEU:HG	1:A:70:LEU:HA	8	0.11
(1,1678)	1:A:70:LEU:HG	1:A:70:LEU:HA	9	0.11
(1,1678)	1:A:70:LEU:HG	1:A:70:LEU:HA	10	0.11
(1,167)	1:A:150:THR:HG21	1:A:85:PHE:HB2	4	0.11
(1,167)	1:A:150:THR:HG22	1:A:85:PHE:HB2	4	0.11
(1,167)	1:A:150:THR:HG23	1:A:85:PHE:HB2	4	0.11

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:123:THR:HG21	3	0.11
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:123:THR:HG22	3	0.11
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:123:THR:HG23	3	0.11
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:123:THR:HG21	3	0.11
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:123:THR:HG22	3	0.11
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:123:THR:HG23	3	0.11
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:123:THR:HG21	3	0.11
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:123:THR:HG22	3	0.11
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:123:THR:HG23	3	0.11
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:123:THR:HG21	9	0.11
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:123:THR:HG22	9	0.11
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:123:THR:HG23	9	0.11
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:123:THR:HG21	9	0.11
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:123:THR:HG22	9	0.11
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:123:THR:HG23	9	0.11
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:123:THR:HG21	9	0.11
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:123:THR:HG22	9	0.11
(1,1664)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:123:THR:HG23	9	0.11
(1,1658)	1:A:39:GLN:HB3	1:A:60:VAL:HG12	5	0.11
(1,1658)	1:A:39:GLN:HB3	1:A:60:VAL:HG11	5	0.11
(1,1658)	1:A:39:GLN:HB3	1:A:60:VAL:HG13	5	0.11
(1,1642)	1:A:47:THR:HG21	1:A:111:ALA:HB2	8	0.11
(1,1642)	1:A:47:THR:HG21	1:A:111:ALA:HB1	8	0.11
(1,1642)	1:A:47:THR:HG21	1:A:111:ALA:HB3	8	0.11
(1,1642)	1:A:47:THR:HG22	1:A:111:ALA:HB2	8	0.11
(1,1642)	1:A:47:THR:HG22	1:A:111:ALA:HB1	8	0.11
(1,1642)	1:A:47:THR:HG22	1:A:111:ALA:HB3	8	0.11
(1,1642)	1:A:47:THR:HG23	1:A:111:ALA:HB2	8	0.11
(1,1642)	1:A:47:THR:HG23	1:A:111:ALA:HB1	8	0.11
(1,1642)	1:A:47:THR:HG23	1:A:111:ALA:HB3	8	0.11
(1,1637)	1:A:106:SER:HA	1:A:103:THR:HG21	1	0.11
(1,1637)	1:A:106:SER:HA	1:A:103:THR:HG22	1	0.11
(1,1637)	1:A:106:SER:HA	1:A:103:THR:HG23	1	0.11
(1,1573)	1:A:65:PRO:HD2	1:A:64:LYS:HG3	8	0.11
(1,1547)	1:A:61:LYS:H	1:A:61:LYS:HG2	5	0.11
(1,1547)	1:A:61:LYS:H	1:A:61:LYS:HG2	6	0.11
(1,1531)	1:A:61:LYS:HG3	1:A:62:GLU:H	6	0.11
(1,1531)	1:A:61:LYS:HG3	1:A:62:GLU:H	7	0.11
(1,1531)	1:A:61:LYS:HG3	1:A:62:GLU:H	8	0.11
(1,15)	1:A:50:THR:H	1:A:49:PHE:HD1	6	0.11
(1,15)	1:A:50:THR:H	1:A:49:PHE:HD2	6	0.11
(1,1476)	1:A:33:LEU:HD12	1:A:14:SER:HB2	7	0.11

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1476)	1:A:33:LEU:HD11	1:A:14:SER:HB2	7	0.11
(1,1476)	1:A:33:LEU:HD13	1:A:14:SER:HB2	7	0.11
(1,1422)	1:A:65:PRO:HG2	1:A:65:PRO:HA	5	0.11
(1,1422)	1:A:65:PRO:HG2	1:A:65:PRO:HA	9	0.11
(1,1380)	1:A:55:SER:H	1:A:55:SER:HB3	8	0.11
(1,137)	1:A:59:HIS:HD2	1:A:27:PRO:HB2	5	0.11
(1,134)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:59:HIS:HD2	3	0.11
(1,134)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:59:HIS:HD2	4	0.11
(1,134)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:59:HIS:HD2	6	0.11
(1,134)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:59:HIS:HD2	7	0.11
(1,134)	1:A:59:HIS:HB3	1:A:59:HIS:HD2	9	0.11
(1,1328)	1:A:105:GLN:HE22	1:A:105:GLN:HG3	9	0.11
(1,1325)	1:A:35:GLN:HB2	1:A:36:CYS:H	3	0.11
(1,1306)	1:A:87:GLN:HB2	1:A:87:GLN:HA	1	0.11
(1,1305)	1:A:88:HIS:H	1:A:87:GLN:HB2	6	0.11
(1,1298)	1:A:48:HIS:HB3	1:A:65:PRO:HG2	10	0.11
(1,1296)	1:A:56:LYS:HA	1:A:6:LYS:HD2	5	0.11
(1,1245)	1:A:146:VAL:HB	1:A:123:THR:HG21	5	0.11
(1,1245)	1:A:146:VAL:HB	1:A:123:THR:HG22	5	0.11
(1,1245)	1:A:146:VAL:HB	1:A:123:THR:HG23	5	0.11
(1,1245)	1:A:146:VAL:HB	1:A:123:THR:HG21	8	0.11
(1,1245)	1:A:146:VAL:HB	1:A:123:THR:HG22	8	0.11
(1,1245)	1:A:146:VAL:HB	1:A:123:THR:HG23	8	0.11
(1,1245)	1:A:146:VAL:HB	1:A:123:THR:HG21	9	0.11
(1,1245)	1:A:146:VAL:HB	1:A:123:THR:HG22	9	0.11
(1,1245)	1:A:146:VAL:HB	1:A:123:THR:HG23	9	0.11
(1,1223)	1:A:86:GLU:HB3	1:A:89:VAL:HG22	3	0.11
(1,1223)	1:A:86:GLU:HB3	1:A:89:VAL:HG21	3	0.11
(1,1223)	1:A:86:GLU:HB3	1:A:89:VAL:HG23	3	0.11
(1,1223)	1:A:86:GLU:HB3	1:A:89:VAL:HG22	10	0.11
(1,1223)	1:A:86:GLU:HB3	1:A:89:VAL:HG21	10	0.11
(1,1223)	1:A:86:GLU:HB3	1:A:89:VAL:HG23	10	0.11
(1,1215)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:28:VAL:HG22	7	0.11
(1,1215)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:28:VAL:HG21	7	0.11
(1,1215)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:28:VAL:HG23	7	0.11
(1,1215)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:28:VAL:HG12	7	0.11
(1,1215)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:28:VAL:HG11	7	0.11
(1,1215)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:28:VAL:HG13	7	0.11
(1,1213)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:57:MET:HG2	2	0.11
(1,1213)	1:A:27:PRO:HB2	1:A:57:MET:HG3	2	0.11
(1,1159)	1:A:29:PRO:HB3	1:A:57:MET:HA	8	0.11
(1,1130)	1:A:39:GLN:HE22	1:A:39:GLN:HG2	2	0.11

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1130)	1:A:39:GLN:HE22	1:A:39:GLN:HG2	9	0.11
(1,1116)	1:A:29:PRO:HB2	1:A:57:MET:HA	2	0.11
(1,1116)	1:A:29:PRO:HB2	1:A:57:MET:HA	10	0.11
(1,108)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:58:CYS:HA	2	0.11
(1,108)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:58:CYS:HA	2	0.11
(1,108)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:58:CYS:HA	2	0.11
(1,108)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:58:CYS:HA	8	0.11
(1,108)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:58:CYS:HA	8	0.11
(1,108)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:58:CYS:HA	8	0.11
(1,108)	1:A:31:VAL:HG22	1:A:58:CYS:HA	9	0.11
(1,108)	1:A:31:VAL:HG21	1:A:58:CYS:HA	9	0.11
(1,108)	1:A:31:VAL:HG23	1:A:58:CYS:HA	9	0.11
(1,1059)	1:A:32:SER:H	1:A:35:GLN:HG2	4	0.11
(1,1059)	1:A:32:SER:H	1:A:35:GLN:HG3	4	0.11
(1,1059)	1:A:32:SER:H	1:A:35:GLN:HG2	9	0.11
(1,1059)	1:A:32:SER:H	1:A:35:GLN:HG3	9	0.11
(1,1027)	1:A:75:THR:HB	1:A:18:GLY:HA3	4	0.11

## 10 Dihedral-angle violation analysis [i](#)

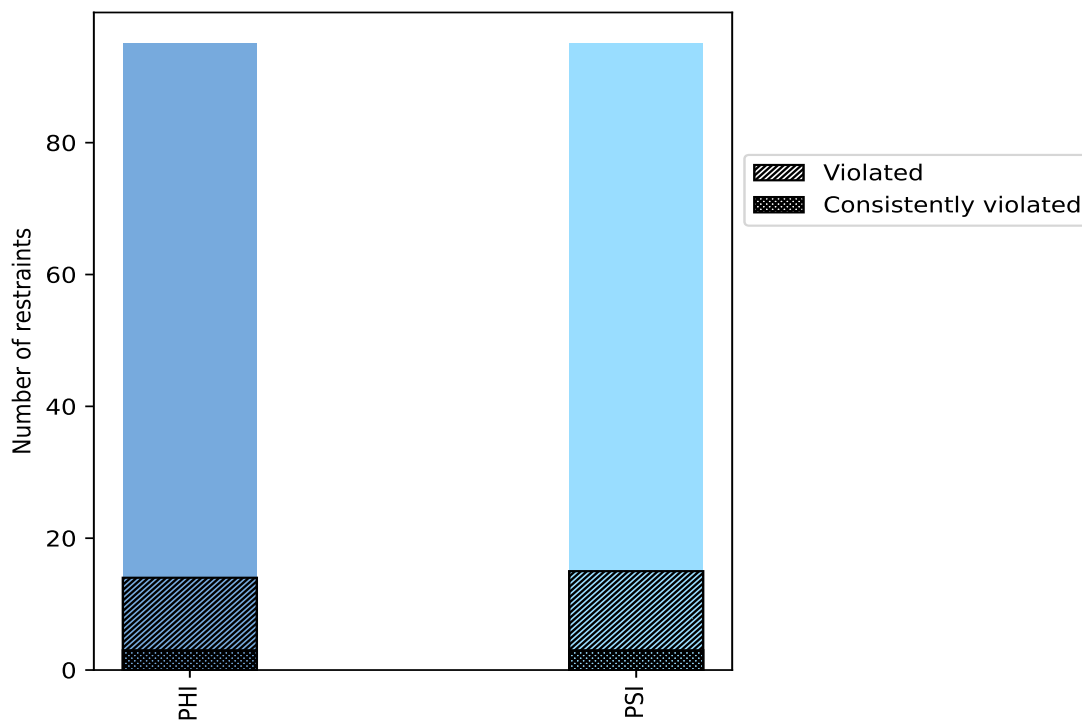
### 10.1 Summary of dihedral-angle violations [i](#)

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	% <sup>1</sup>	Violated <sup>3</sup>			Consistently Violated <sup>4</sup>		
			Count	% <sup>2</sup>	% <sup>1</sup>	Count	% <sup>2</sup>	% <sup>1</sup>
PHI	95	50.0	14	14.7	7.4	3	3.2	1.6
PSI	95	50.0	15	15.8	7.9	3	3.2	1.6
Total	190	100.0	29	15.3	15.3	6	3.2	3.2

<sup>1</sup> percentage calculated with respect to total number of dihedral-angle restraints, <sup>2</sup> percentage calculated with respect to number of restraints in a particular dihedral-angle type, <sup>3</sup> violated in at least one model, <sup>4</sup> 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

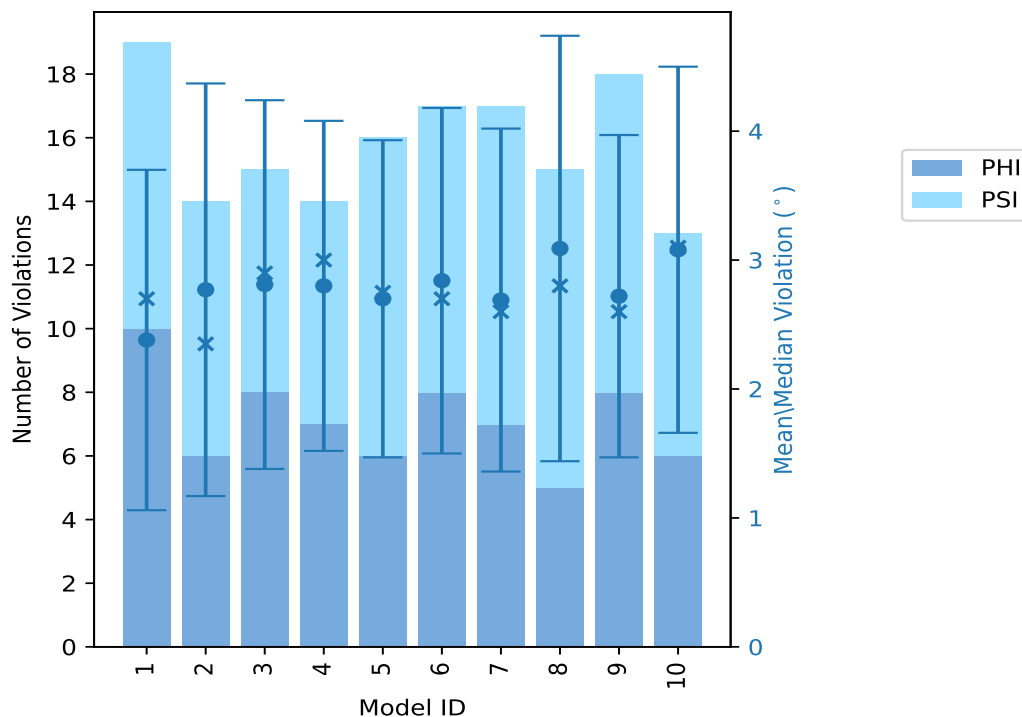


## 10.2 Dihedral-angle violation statistics for each model [i](#)

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 (°)
	PHI	PSI	Total				
1	10	9	19	2.38	6.4	1.32	2.7
2	6	8	14	2.77	6.4	1.6	2.35
3	8	7	15	2.81	6.8	1.43	2.9
4	7	7	14	2.8	6.1	1.28	3.0
5	6	10	16	2.7	5.9	1.23	2.75
6	8	9	17	2.84	6.6	1.34	2.7
7	7	10	17	2.69	6.7	1.33	2.6
8	5	10	15	3.09	8.0	1.65	2.8
9	8	10	18	2.72	5.9	1.25	2.6
10	6	7	13	3.08	6.6	1.42	3.1

### 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

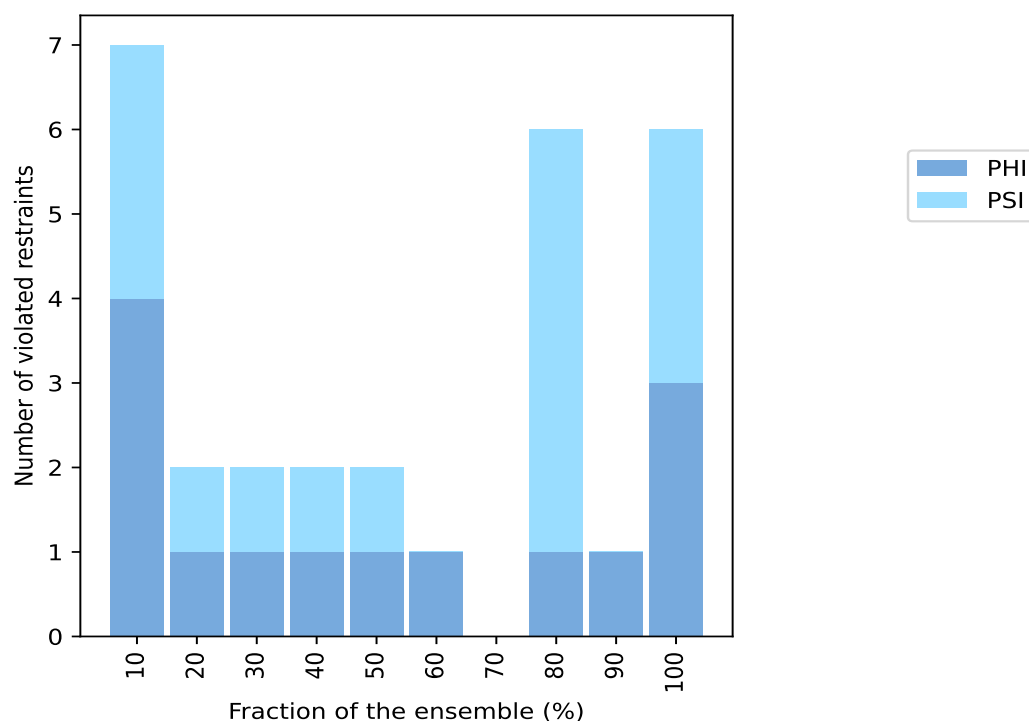
### 10.3 Dihedral-angle violation statistics for the ensemble [i](#)

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	
PHI	PSI	Total	Count <sup>1</sup>	%
4	3	7	1	10.0
1	1	2	2	20.0
1	1	2	3	30.0
1	1	2	4	40.0
1	1	2	5	50.0
1	0	1	6	60.0
0	0	0	7	70.0
1	5	6	8	80.0
1	0	1	9	90.0
3	3	6	10	100.0

<sup>1</sup> Number of models with violations

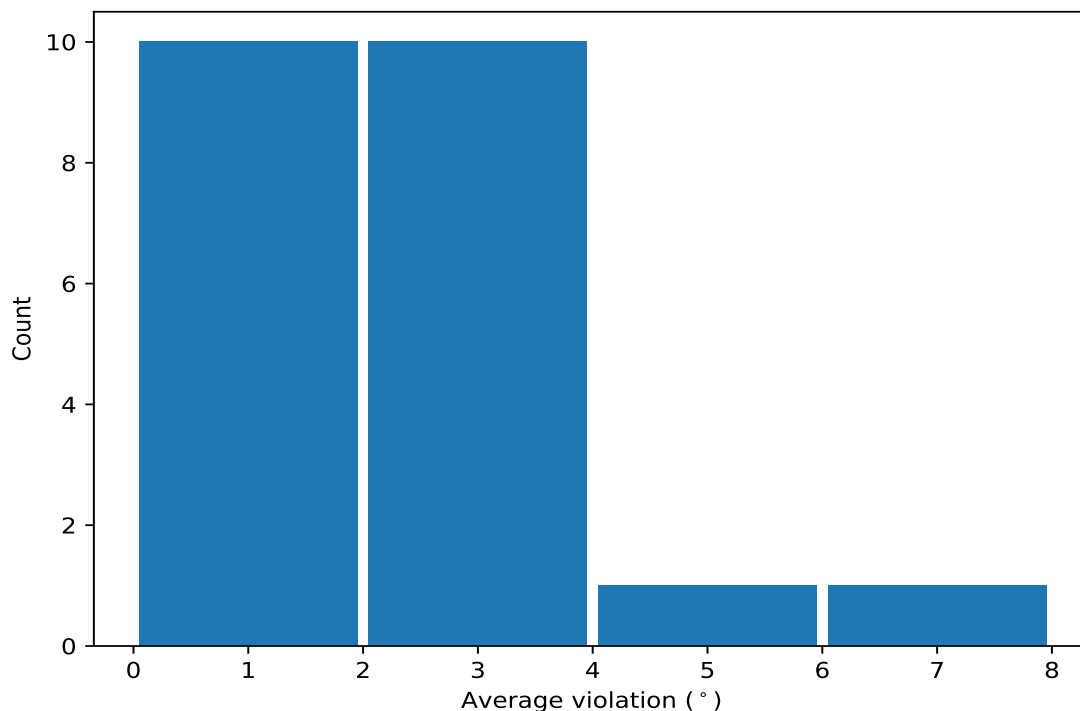
#### 10.3.1 Bar graph : Dihedral-angle Violation statistics for the ensemble [i](#)



## 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 <sup>1</sup>	Mean	SD <sup>2</sup>	Median
(1,133)	1:A:62:GLU:N	1:A:62:GLU:CA	1:A:62:GLU:C	1:A:63:GLY:N	10	6.54	0.57	6.5
(1,38)	1:A:61:LYS:C	1:A:62:GLU:N	1:A:62:GLU:CA	1:A:62:GLU:C	10	4.05	0.4	4.0
(1,149)	1:A:91:TYR:N	1:A:91:TYR:CA	1:A:91:TYR:C	1:A:92:GLU:N	10	3.81	0.72	3.85
(1,26)	1:A:45:GLY:C	1:A:46:CYS:N	1:A:46:CYS:CA	1:A:46:CYS:C	10	3.43	0.47	3.6
(1,39)	1:A:62:GLU:C	1:A:63:GLY:N	1:A:63:GLY:CA	1:A:63:GLY:C	10	3.43	0.48	3.4
(1,139)	1:A:74:LYS:N	1:A:74:LYS:CA	1:A:74:LYS:C	1:A:75:THR:N	10	2.69	0.51	2.7
(1,93)	1:A:150:THR:C	1:A:151:SER:N	1:A:151:SER:CA	1:A:151:SER:C	9	2.96	0.71	3.1
(1,176)	1:A:133:PHE:N	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:C	1:A:134:LYS:N	8	3.05	0.44	2.95
(1,5)	1:A:11:CYS:C	1:A:12:VAL:N	1:A:12:VAL:CA	1:A:12:VAL:C	8	2.62	0.7	2.65
(1,96)	1:A:5:ALA:N	1:A:5:ALA:CA	1:A:5:ALA:C	1:A:6:LYS:N	8	2.61	0.54	2.55
(1,103)	1:A:20:ARG:N	1:A:20:ARG:CA	1:A:20:ARG:C	1:A:21:ALA:N	8	2.39	0.38	2.3
(1,154)	1:A:101:MET:N	1:A:101:MET:CA	1:A:101:MET:C	1:A:102:VAL:N	8	1.46	0.26	1.5
(1,130)	1:A:59:HIS:N	1:A:59:HIS:CA	1:A:59:HIS:C	1:A:60:VAL:N	8	1.42	0.25	1.3

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

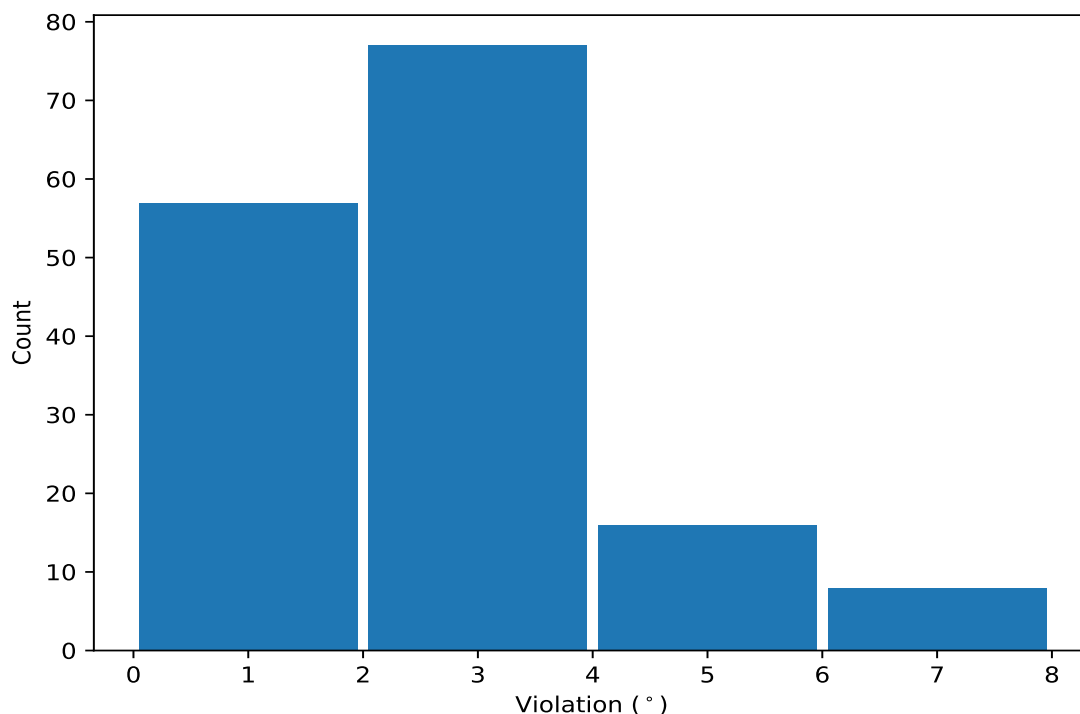
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models <sup>1</sup>	Mean	SD <sup>2</sup>	Median
(1,70)	1:A:118:SER:C	1:A:119:CYS:N	1:A:119:CYS:CA	1:A:119:CYS:C	6	1.58	0.22	1.65
(1,54)	1:A:90:SER:C	1:A:91:TYR:N	1:A:91:TYR:CA	1:A:91:TYR:C	5	1.58	0.2	1.6
(1,105)	1:A:23:THR:N	1:A:23:THR:CA	1:A:23:THR:C	1:A:24:ILE:N	5	1.54	0.2	1.5
(1,99)	1:A:11:CYS:N	1:A:11:CYS:CA	1:A:11:CYS:C	1:A:12:VAL:N	4	2.0	0.58	2.1
(1,28)	1:A:50:THR:C	1:A:51:TYR:N	1:A:51:TYR:CA	1:A:51:TYR:C	4	1.4	0.19	1.45
(1,76)	1:A:126:GLU:C	1:A:127:HIS:N	1:A:127:HIS:CA	1:A:127:HIS:C	3	1.8	0.67	1.6
(1,118)	1:A:42:ALA:N	1:A:42:ALA:CA	1:A:42:ALA:C	1:A:43:VAL:N	3	1.3	0.16	1.3
(1,162)	1:A:111:ALA:N	1:A:111:ALA:CA	1:A:111:ALA:C	1:A:112:ALA:N	2	1.75	0.35	1.75
(1,62)	1:A:104:SER:C	1:A:105:GLN:N	1:A:105:GLN:CA	1:A:105:GLN:C	2	1.2	0.1	1.2

<sup>1</sup> Number of violated models, <sup>2</sup>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 (°)
(1,133)	1:A:62:GLU:N	1:A:62:GLU:CA	1:A:62:GLU:C	1:A:63:GLY:N	8	8.0
(1,133)	1:A:62:GLU:N	1:A:62:GLU:CA	1:A:62:GLU:C	1:A:63:GLY:N	3	6.8
(1,133)	1:A:62:GLU:N	1:A:62:GLU:CA	1:A:62:GLU:C	1:A:63:GLY:N	7	6.7
(1,133)	1:A:62:GLU:N	1:A:62:GLU:CA	1:A:62:GLU:C	1:A:63:GLY:N	6	6.6
(1,133)	1:A:62:GLU:N	1:A:62:GLU:CA	1:A:62:GLU:C	1:A:63:GLY:N	10	6.6
(1,133)	1:A:62:GLU:N	1:A:62:GLU:CA	1:A:62:GLU:C	1:A:63:GLY:N	1	6.4
(1,133)	1:A:62:GLU:N	1:A:62:GLU:CA	1:A:62:GLU:C	1:A:63:GLY:N	2	6.4
(1,133)	1:A:62:GLU:N	1:A:62:GLU:CA	1:A:62:GLU:C	1:A:63:GLY:N	4	6.1
(1,133)	1:A:62:GLU:N	1:A:62:GLU:CA	1:A:62:GLU:C	1:A:63:GLY:N	5	5.9
(1,133)	1:A:62:GLU:N	1:A:62:GLU:CA	1:A:62:GLU:C	1:A:63:GLY:N	9	5.9
(1,149)	1:A:91:TYR:N	1:A:91:TYR:CA	1:A:91:TYR:C	1:A:92:GLU:N	2	5.4
(1,38)	1:A:61:LYS:C	1:A:62:GLU:N	1:A:62:GLU:CA	1:A:62:GLU:C	5	4.7
(1,149)	1:A:91:TYR:N	1:A:91:TYR:CA	1:A:91:TYR:C	1:A:92:GLU:N	10	4.5
(1,38)	1:A:61:LYS:C	1:A:62:GLU:N	1:A:62:GLU:CA	1:A:62:GLU:C	6	4.4
(1,38)	1:A:61:LYS:C	1:A:62:GLU:N	1:A:62:GLU:CA	1:A:62:GLU:C	8	4.4
(1,38)	1:A:61:LYS:C	1:A:62:GLU:N	1:A:62:GLU:CA	1:A:62:GLU:C	9	4.4
(1,39)	1:A:62:GLU:C	1:A:63:GLY:N	1:A:63:GLY:CA	1:A:63:GLY:C	9	4.2
(1,39)	1:A:62:GLU:C	1:A:63:GLY:N	1:A:63:GLY:CA	1:A:63:GLY:C	2	4.0
(1,38)	1:A:61:LYS:C	1:A:62:GLU:N	1:A:62:GLU:CA	1:A:62:GLU:C	1	4.0
(1,38)	1:A:61:LYS:C	1:A:62:GLU:N	1:A:62:GLU:CA	1:A:62:GLU:C	7	4.0
(1,26)	1:A:45:GLY:C	1:A:46:CYS:N	1:A:46:CYS:CA	1:A:46:CYS:C	8	4.0
(1,26)	1:A:45:GLY:C	1:A:46:CYS:N	1:A:46:CYS:CA	1:A:46:CYS:C	10	4.0
(1,149)	1:A:91:TYR:N	1:A:91:TYR:CA	1:A:91:TYR:C	1:A:92:GLU:N	4	4.0
(1,149)	1:A:91:TYR:N	1:A:91:TYR:CA	1:A:91:TYR:C	1:A:92:GLU:N	8	4.0
(1,38)	1:A:61:LYS:C	1:A:62:GLU:N	1:A:62:GLU:CA	1:A:62:GLU:C	10	3.9
(1,149)	1:A:91:TYR:N	1:A:91:TYR:CA	1:A:91:TYR:C	1:A:92:GLU:N	6	3.9
(1,93)	1:A:150:THR:C	1:A:151:SER:N	1:A:151:SER:CA	1:A:151:SER:C	6	3.8
(1,39)	1:A:62:GLU:C	1:A:63:GLY:N	1:A:63:GLY:CA	1:A:63:GLY:C	3	3.8
(1,38)	1:A:61:LYS:C	1:A:62:GLU:N	1:A:62:GLU:CA	1:A:62:GLU:C	2	3.8
(1,149)	1:A:91:TYR:N	1:A:91:TYR:CA	1:A:91:TYR:C	1:A:92:GLU:N	3	3.8
(1,5)	1:A:11:CYS:C	1:A:12:VAL:N	1:A:12:VAL:CA	1:A:12:VAL:C	4	3.7
(1,39)	1:A:62:GLU:C	1:A:63:GLY:N	1:A:63:GLY:CA	1:A:63:GLY:C	7	3.7
(1,26)	1:A:45:GLY:C	1:A:46:CYS:N	1:A:46:CYS:CA	1:A:46:CYS:C	2	3.7
(1,26)	1:A:45:GLY:C	1:A:46:CYS:N	1:A:46:CYS:CA	1:A:46:CYS:C	6	3.7
(1,176)	1:A:133:PHE:N	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:C	1:A:134:LYS:N	3	3.7
(1,26)	1:A:45:GLY:C	1:A:46:CYS:N	1:A:46:CYS:CA	1:A:46:CYS:C	3	3.6
(1,26)	1:A:45:GLY:C	1:A:46:CYS:N	1:A:46:CYS:CA	1:A:46:CYS:C	9	3.6
(1,139)	1:A:74:LYS:N	1:A:74:LYS:CA	1:A:74:LYS:C	1:A:75:THR:N	5	3.6
(1,39)	1:A:62:GLU:C	1:A:63:GLY:N	1:A:63:GLY:CA	1:A:63:GLY:C	8	3.5
(1,38)	1:A:61:LYS:C	1:A:62:GLU:N	1:A:62:GLU:CA	1:A:62:GLU:C	4	3.5
(1,176)	1:A:133:PHE:N	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:C	1:A:134:LYS:N	9	3.5
(1,149)	1:A:91:TYR:N	1:A:91:TYR:CA	1:A:91:TYR:C	1:A:92:GLU:N	9	3.5
(1,96)	1:A:5:ALA:N	1:A:5:ALA:CA	1:A:5:ALA:C	1:A:6:LYS:N	7	3.4
(1,96)	1:A:5:ALA:N	1:A:5:ALA:CA	1:A:5:ALA:C	1:A:6:LYS:N	8	3.4
(1,5)	1:A:11:CYS:C	1:A:12:VAL:N	1:A:12:VAL:CA	1:A:12:VAL:C	10	3.4
(1,38)	1:A:61:LYS:C	1:A:62:GLU:N	1:A:62:GLU:CA	1:A:62:GLU:C	3	3.4
(1,176)	1:A:133:PHE:N	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:C	1:A:134:LYS:N	6	3.4
(1,93)	1:A:150:THR:C	1:A:151:SER:N	1:A:151:SER:CA	1:A:151:SER:C	8	3.3
(1,39)	1:A:62:GLU:C	1:A:63:GLY:N	1:A:63:GLY:CA	1:A:63:GLY:C	1	3.3
(1,39)	1:A:62:GLU:C	1:A:63:GLY:N	1:A:63:GLY:CA	1:A:63:GLY:C	10	3.3
(1,93)	1:A:150:THR:C	1:A:151:SER:N	1:A:151:SER:CA	1:A:151:SER:C	5	3.2
(1,93)	1:A:150:THR:C	1:A:151:SER:N	1:A:151:SER:CA	1:A:151:SER:C	9	3.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,26)	1:A:45:GLY:C	1:A:46:CYS:N	1:A:46:CYS:CA	1:A:46:CYS:C	4	3.2
(1,26)	1:A:45:GLY:C	1:A:46:CYS:N	1:A:46:CYS:CA	1:A:46:CYS:C	7	3.2
(1,93)	1:A:150:THR:C	1:A:151:SER:N	1:A:151:SER:CA	1:A:151:SER:C	3	3.1
(1,93)	1:A:150:THR:C	1:A:151:SER:N	1:A:151:SER:CA	1:A:151:SER:C	4	3.1
(1,93)	1:A:150:THR:C	1:A:151:SER:N	1:A:151:SER:CA	1:A:151:SER:C	7	3.1
(1,149)	1:A:91:TYR:N	1:A:91:TYR:CA	1:A:91:TYR:C	1:A:92:GLU:N	1	3.1
(1,149)	1:A:91:TYR:N	1:A:91:TYR:CA	1:A:91:TYR:C	1:A:92:GLU:N	7	3.1
(1,139)	1:A:74:LYS:N	1:A:74:LYS:CA	1:A:74:LYS:C	1:A:75:THR:N	10	3.1
(1,103)	1:A:20:ARG:N	1:A:20:ARG:CA	1:A:20:ARG:C	1:A:21:ALA:N	6	3.1
(1,39)	1:A:62:GLU:C	1:A:63:GLY:N	1:A:63:GLY:CA	1:A:63:GLY:C	4	3.0
(1,176)	1:A:133:PHE:N	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:C	1:A:134:LYS:N	4	3.0
(1,139)	1:A:74:LYS:N	1:A:74:LYS:CA	1:A:74:LYS:C	1:A:75:THR:N	1	3.0
(1,5)	1:A:11:CYS:C	1:A:12:VAL:N	1:A:12:VAL:CA	1:A:12:VAL:C	1	2.9
(1,176)	1:A:133:PHE:N	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:C	1:A:134:LYS:N	1	2.9
(1,176)	1:A:133:PHE:N	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:C	1:A:134:LYS:N	5	2.9
(1,139)	1:A:74:LYS:N	1:A:74:LYS:CA	1:A:74:LYS:C	1:A:75:THR:N	3	2.9
(1,96)	1:A:5:ALA:N	1:A:5:ALA:CA	1:A:5:ALA:C	1:A:6:LYS:N	5	2.8
(1,39)	1:A:62:GLU:C	1:A:63:GLY:N	1:A:63:GLY:CA	1:A:63:GLY:C	5	2.8
(1,26)	1:A:45:GLY:C	1:A:46:CYS:N	1:A:46:CYS:CA	1:A:46:CYS:C	1	2.8
(1,176)	1:A:133:PHE:N	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:C	1:A:134:LYS:N	8	2.8
(1,149)	1:A:91:TYR:N	1:A:91:TYR:CA	1:A:91:TYR:C	1:A:92:GLU:N	5	2.8
(1,99)	1:A:11:CYS:N	1:A:11:CYS:CA	1:A:11:CYS:C	1:A:12:VAL:N	10	2.7
(1,93)	1:A:150:THR:C	1:A:151:SER:N	1:A:151:SER:CA	1:A:151:SER:C	1	2.7
(1,76)	1:A:126:GLU:C	1:A:127:HIS:N	1:A:127:HIS:CA	1:A:127:HIS:C	6	2.7
(1,5)	1:A:11:CYS:C	1:A:12:VAL:N	1:A:12:VAL:CA	1:A:12:VAL:C	9	2.7
(1,39)	1:A:62:GLU:C	1:A:63:GLY:N	1:A:63:GLY:CA	1:A:63:GLY:C	6	2.7
(1,139)	1:A:74:LYS:N	1:A:74:LYS:CA	1:A:74:LYS:C	1:A:75:THR:N	7	2.7
(1,139)	1:A:74:LYS:N	1:A:74:LYS:CA	1:A:74:LYS:C	1:A:75:THR:N	8	2.7
(1,103)	1:A:20:ARG:N	1:A:20:ARG:CA	1:A:20:ARG:C	1:A:21:ALA:N	1	2.7
(1,103)	1:A:20:ARG:N	1:A:20:ARG:CA	1:A:20:ARG:C	1:A:21:ALA:N	5	2.7
(1,96)	1:A:5:ALA:N	1:A:5:ALA:CA	1:A:5:ALA:C	1:A:6:LYS:N	9	2.6
(1,5)	1:A:11:CYS:C	1:A:12:VAL:N	1:A:12:VAL:CA	1:A:12:VAL:C	7	2.6
(1,139)	1:A:74:LYS:N	1:A:74:LYS:CA	1:A:74:LYS:C	1:A:75:THR:N	9	2.6
(1,96)	1:A:5:ALA:N	1:A:5:ALA:CA	1:A:5:ALA:C	1:A:6:LYS:N	6	2.5
(1,26)	1:A:45:GLY:C	1:A:46:CYS:N	1:A:46:CYS:CA	1:A:46:CYS:C	5	2.5
(1,96)	1:A:5:ALA:N	1:A:5:ALA:CA	1:A:5:ALA:C	1:A:6:LYS:N	2	2.4
(1,5)	1:A:11:CYS:C	1:A:12:VAL:N	1:A:12:VAL:CA	1:A:12:VAL:C	8	2.4
(1,139)	1:A:74:LYS:N	1:A:74:LYS:CA	1:A:74:LYS:C	1:A:75:THR:N	2	2.4
(1,139)	1:A:74:LYS:N	1:A:74:LYS:CA	1:A:74:LYS:C	1:A:75:THR:N	6	2.3
(1,103)	1:A:20:ARG:N	1:A:20:ARG:CA	1:A:20:ARG:C	1:A:21:ALA:N	2	2.3
(1,103)	1:A:20:ARG:N	1:A:20:ARG:CA	1:A:20:ARG:C	1:A:21:ALA:N	10	2.3
(1,99)	1:A:11:CYS:N	1:A:11:CYS:CA	1:A:11:CYS:C	1:A:12:VAL:N	7	2.2
(1,176)	1:A:133:PHE:N	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:C	1:A:134:LYS:N	7	2.2
(1,162)	1:A:111:ALA:N	1:A:111:ALA:CA	1:A:111:ALA:C	1:A:112:ALA:N	5	2.1
(1,99)	1:A:11:CYS:N	1:A:11:CYS:CA	1:A:11:CYS:C	1:A:12:VAL:N	8	2.0
(1,96)	1:A:5:ALA:N	1:A:5:ALA:CA	1:A:5:ALA:C	1:A:6:LYS:N	10	2.0
(1,103)	1:A:20:ARG:N	1:A:20:ARG:CA	1:A:20:ARG:C	1:A:21:ALA:N	7	2.0
(1,103)	1:A:20:ARG:N	1:A:20:ARG:CA	1:A:20:ARG:C	1:A:21:ALA:N	8	2.0
(1,103)	1:A:20:ARG:N	1:A:20:ARG:CA	1:A:20:ARG:C	1:A:21:ALA:N	9	2.0
(1,5)	1:A:11:CYS:C	1:A:12:VAL:N	1:A:12:VAL:CA	1:A:12:VAL:C	2	1.9
(1,105)	1:A:23:THR:N	1:A:23:THR:CA	1:A:23:THR:C	1:A:24:ILE:N	1	1.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,96)	1:A:5:ALA:N	1:A:5:ALA:CA	1:A:5:ALA:C	1:A:6:LYS:N	3	1.8
(1,70)	1:A:118:SER:C	1:A:119:CYS:N	1:A:119:CYS:CA	1:A:119:CYS:C	2	1.8
(1,70)	1:A:118:SER:C	1:A:119:CYS:N	1:A:119:CYS:CA	1:A:119:CYS:C	9	1.8
(1,54)	1:A:90:SER:C	1:A:91:TYR:N	1:A:91:TYR:CA	1:A:91:TYR:C	4	1.8
(1,54)	1:A:90:SER:C	1:A:91:TYR:N	1:A:91:TYR:CA	1:A:91:TYR:C	10	1.8
(1,154)	1:A:101:MET:N	1:A:101:MET:CA	1:A:101:MET:C	1:A:102:VAL:N	3	1.8
(1,154)	1:A:101:MET:N	1:A:101:MET:CA	1:A:101:MET:C	1:A:102:VAL:N	4	1.8
(1,130)	1:A:59:HIS:N	1:A:59:HIS:CA	1:A:59:HIS:C	1:A:60:VAL:N	5	1.8
(1,130)	1:A:59:HIS:N	1:A:59:HIS:CA	1:A:59:HIS:C	1:A:60:VAL:N	6	1.8
(1,94)	1:A:151:SER:C	1:A:152:GLY:N	1:A:152:GLY:CA	1:A:152:GLY:C	9	1.7
(1,70)	1:A:118:SER:C	1:A:119:CYS:N	1:A:119:CYS:CA	1:A:119:CYS:C	3	1.7
(1,46)	1:A:75:THR:C	1:A:76:ALA:N	1:A:76:ALA:CA	1:A:76:ALA:C	9	1.7
(1,76)	1:A:126:GLU:C	1:A:127:HIS:N	1:A:127:HIS:CA	1:A:127:HIS:C	5	1.6
(1,70)	1:A:118:SER:C	1:A:119:CYS:N	1:A:119:CYS:CA	1:A:119:CYS:C	4	1.6
(1,54)	1:A:90:SER:C	1:A:91:TYR:N	1:A:91:TYR:CA	1:A:91:TYR:C	3	1.6
(1,28)	1:A:50:THR:C	1:A:51:TYR:N	1:A:51:TYR:CA	1:A:51:TYR:C	3	1.6
(1,154)	1:A:101:MET:N	1:A:101:MET:CA	1:A:101:MET:C	1:A:102:VAL:N	1	1.6
(1,154)	1:A:101:MET:N	1:A:101:MET:CA	1:A:101:MET:C	1:A:102:VAL:N	6	1.6
(1,139)	1:A:74:LYS:N	1:A:74:LYS:CA	1:A:74:LYS:C	1:A:75:THR:N	4	1.6
(1,130)	1:A:59:HIS:N	1:A:59:HIS:CA	1:A:59:HIS:C	1:A:60:VAL:N	7	1.6
(1,28)	1:A:50:THR:C	1:A:51:TYR:N	1:A:51:TYR:CA	1:A:51:TYR:C	6	1.5
(1,118)	1:A:42:ALA:N	1:A:42:ALA:CA	1:A:42:ALA:C	1:A:43:VAL:N	5	1.5
(1,105)	1:A:23:THR:N	1:A:23:THR:CA	1:A:23:THR:C	1:A:24:ILE:N	6	1.5
(1,105)	1:A:23:THR:N	1:A:23:THR:CA	1:A:23:THR:C	1:A:24:ILE:N	8	1.5
(1,105)	1:A:23:THR:N	1:A:23:THR:CA	1:A:23:THR:C	1:A:24:ILE:N	9	1.5
(1,70)	1:A:118:SER:C	1:A:119:CYS:N	1:A:119:CYS:CA	1:A:119:CYS:C	7	1.4
(1,54)	1:A:90:SER:C	1:A:91:TYR:N	1:A:91:TYR:CA	1:A:91:TYR:C	7	1.4
(1,5)	1:A:11:CYS:C	1:A:12:VAL:N	1:A:12:VAL:CA	1:A:12:VAL:C	6	1.4
(1,33)	1:A:56:LYS:C	1:A:57:MET:N	1:A:57:MET:CA	1:A:57:MET:C	6	1.4
(1,28)	1:A:50:THR:C	1:A:51:TYR:N	1:A:51:TYR:CA	1:A:51:TYR:C	10	1.4
(1,162)	1:A:111:ALA:N	1:A:111:ALA:CA	1:A:111:ALA:C	1:A:112:ALA:N	4	1.4
(1,156)	1:A:103:THR:N	1:A:103:THR:CA	1:A:103:THR:C	1:A:104:SER:N	4	1.4
(1,154)	1:A:101:MET:N	1:A:101:MET:CA	1:A:101:MET:C	1:A:102:VAL:N	9	1.4
(1,62)	1:A:104:SER:C	1:A:105:GLN:N	1:A:105:GLN:CA	1:A:105:GLN:C	3	1.3
(1,54)	1:A:90:SER:C	1:A:91:TYR:N	1:A:91:TYR:CA	1:A:91:TYR:C	1	1.3
(1,130)	1:A:59:HIS:N	1:A:59:HIS:CA	1:A:59:HIS:C	1:A:60:VAL:N	2	1.3
(1,130)	1:A:59:HIS:N	1:A:59:HIS:CA	1:A:59:HIS:C	1:A:60:VAL:N	3	1.3
(1,130)	1:A:59:HIS:N	1:A:59:HIS:CA	1:A:59:HIS:C	1:A:60:VAL:N	9	1.3
(1,118)	1:A:42:ALA:N	1:A:42:ALA:CA	1:A:42:ALA:C	1:A:43:VAL:N	9	1.3
(1,105)	1:A:23:THR:N	1:A:23:THR:CA	1:A:23:THR:C	1:A:24:ILE:N	7	1.3
(1,70)	1:A:118:SER:C	1:A:119:CYS:N	1:A:119:CYS:CA	1:A:119:CYS:C	1	1.2
(1,154)	1:A:101:MET:N	1:A:101:MET:CA	1:A:101:MET:C	1:A:102:VAL:N	2	1.2
(1,154)	1:A:101:MET:N	1:A:101:MET:CA	1:A:101:MET:C	1:A:102:VAL:N	5	1.2
(1,130)	1:A:59:HIS:N	1:A:59:HIS:CA	1:A:59:HIS:C	1:A:60:VAL:N	8	1.2
(1,99)	1:A:11:CYS:N	1:A:11:CYS:CA	1:A:11:CYS:C	1:A:12:VAL:N	2	1.1
(1,93)	1:A:150:THR:C	1:A:151:SER:N	1:A:151:SER:CA	1:A:151:SER:C	2	1.1
(1,76)	1:A:126:GLU:C	1:A:127:HIS:N	1:A:127:HIS:CA	1:A:127:HIS:C	1	1.1
(1,62)	1:A:104:SER:C	1:A:105:GLN:N	1:A:105:GLN:CA	1:A:105:GLN:C	1	1.1
(1,52)	1:A:88:HIS:C	1:A:89:VAL:N	1:A:89:VAL:CA	1:A:89:VAL:C	1	1.1
(1,28)	1:A:50:THR:C	1:A:51:TYR:N	1:A:51:TYR:CA	1:A:51:TYR:C	5	1.1
(1,188)	1:A:151:SER:N	1:A:151:SER:CA	1:A:151:SER:C	1:A:152:GLY:N	10	1.1

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

<b>Key</b>	<b>Atom-1</b>	<b>Atom-2</b>	<b>Atom-3</b>	<b>Atom-4</b>	<b>Model ID</b>	<b>Violation (°)</b>
(1,171)	1:A:127:HIS:N	1:A:127:HIS:CA	1:A:127:HIS:C	1:A:128:ASP:N	1	1.1
(1,154)	1:A:101:MET:N	1:A:101:MET:CA	1:A:101:MET:C	1:A:102:VAL:N	7	1.1
(1,130)	1:A:59:HIS:N	1:A:59:HIS:CA	1:A:59:HIS:C	1:A:60:VAL:N	1	1.1
(1,118)	1:A:42:ALA:N	1:A:42:ALA:CA	1:A:42:ALA:C	1:A:43:VAL:N	8	1.1