Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

Jun 6, 2023 – 05:48 pm BST

PDB ID	:	1E9T
BMRB ID	:	5771
Title	:	High resolution solution structure of human intestinal trefoil factor
Authors	:	Lemercinier, X.; Muskett, F.; Cheeseman, B.; McIntosh, P.; Carr, M.
Deposited on	:	2000-10-26

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

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

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

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

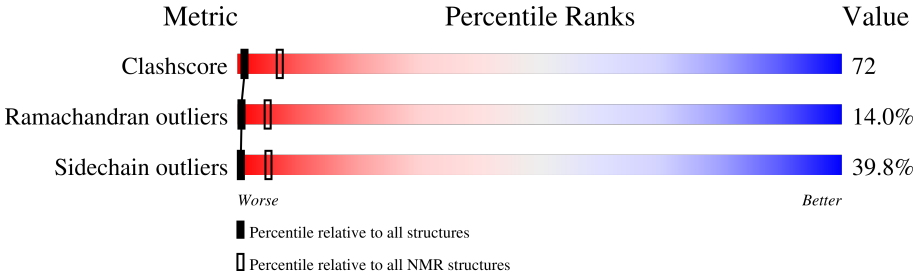
MolProbity	:	4.02b-467
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
wwPDB-RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
wwPDB-ShiftChecker	:	v1.2
BMRB Restraints Analysis	:	v1.2
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal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

1 Overall quality at a glance (i)

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

The overall completeness of chemical shifts assignment is 50%.

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



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

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	59	10% 46% 19% 25%

2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 85 models. Model 1 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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:10-A:53 (44)	0.20	1

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 7 clusters and 3 single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	1, 6, 7, 9, 10, 14, 16, 18, 19, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 30, 32, 33, 34, 35, 37, 42, 44, 45, 47, 49, 50, 53, 54, 59, 60, 64, 65, 72, 73
2	36, 43, 46, 48, 51, 52, 55, 63, 67, 68, 69, 70, 74, 75, 76, 78, 84, 85
3	2, 3, 4, 5, 8, 11, 12, 13, 15, 31, 38, 39, 41, 62
4	20, 29, 40, 57, 61, 71
5	56, 58, 66, 80
6	17, 28
7	79, 82
Single-model clusters	77; 81; 83

3 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 878 atoms, of which 421 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called INTESTINAL TREFOIL FACTOR.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	59	878	285	421	79	86	7	0

4 Residue-property plots (i)

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

These plots are provided for all protein, RNA, DNA and oligosaccharide chains in the entry. The first graphic is the same as shown in the summary in section 1 of this report. The second graphic shows the sequence where residues are colour-coded according to the number of geometric quality criteria for which they contain at least one outlier: green = 0, yellow = 1, orange = 2 and red = 3 or more. Stretches of 2 or more consecutive residues without any outliers are shown as green connectors. Residues which are classified as ill-defined in the NMR ensemble, are shown in cyan with an underline colour-coded according to the previous scheme. Residues which were present in the experimental sample, but not modelled in the final structure are shown in grey.

• Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 10% 46% 19% 25%

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 (medoid)

• Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 7% 46% 19% • 25%

4.2.2 Score per residue for model 2

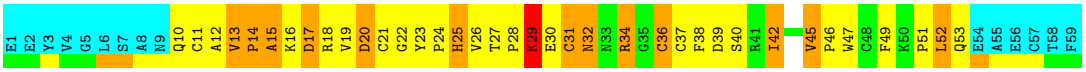
• Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 14% 39% 22% 25%

4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

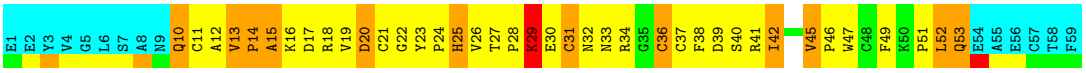
Chain A: 12% 39% 22% • 25%



4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 8% 44% 20% • 25%



4.2.5 Score per residue for model 5

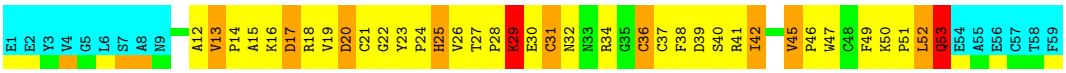
- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 10% 39% 25% 25%

4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

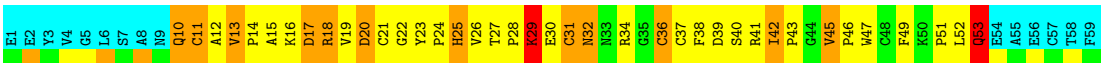
Chain A: 12% 44% 15% • 25%



4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 8% 42% 20% • 25%



4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 12% 42% 20% 25%

4.2.9 Score per residue for model 9

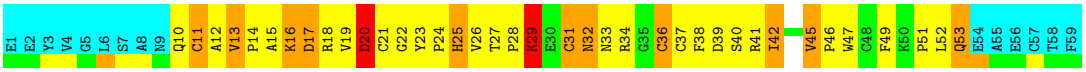
- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 8% 47% 17% • 25%

4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 10% 42% 19% • 25%



4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 10% 42% 22% 25%

4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 14% 37% 22% • 25%

4.2.13 Score per residue for model 13

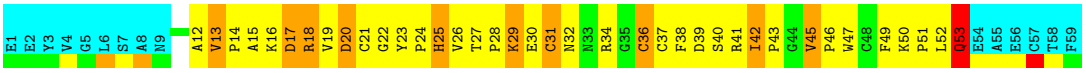
- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 12% 41% 20% • 25%

4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 10% 46% 17% • 25%



4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 14% 36% 25% 25%

4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 12% 46% 17% 25%

4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 14% 32% 25% • 25%

4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 7% 46% 20% • 25%

4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 10% 46% 17% • 25%

4.2.20 Score per residue for model 20

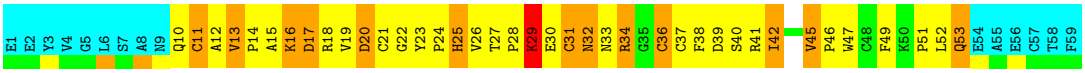
- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 10% 41% 22% • 25%

4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

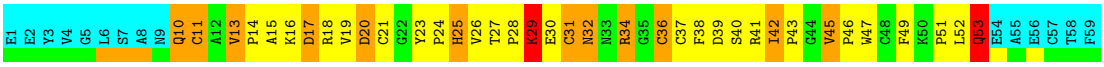
Chain A: 8% 42% 22% • 25%



4.2.22 Score per residue for model 22

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

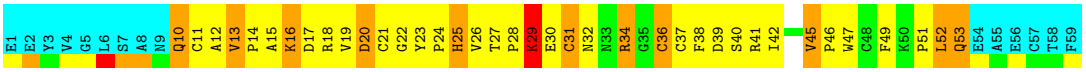
Chain A: 12% 39% 20% • 25%



4.2.23 Score per residue for model 23

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 10% 44% 19% • 25%



4.2.24 Score per residue for model 24

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 7% 44% 22% • 25%

4.2.25 Score per residue for model 25

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 8% 44% 19% • 25%

4.2.26 Score per residue for model 26

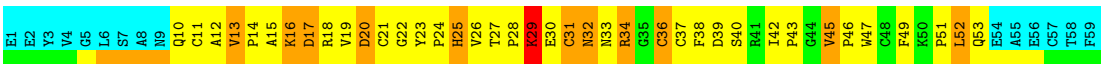
- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 8% 42% 22% • 25%

4.2.27 Score per residue for model 27

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

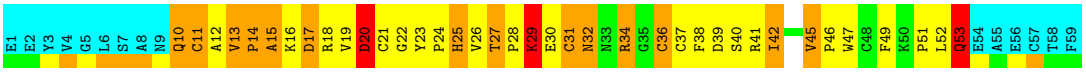
Chain A: 8% 46% 19% • 25%



4.2.28 Score per residue for model 28

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 10% 36% 24% 5% 25%



4.2.29 Score per residue for model 29

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 8% 42% 22% • 25%

4.2.30 Score per residue for model 30

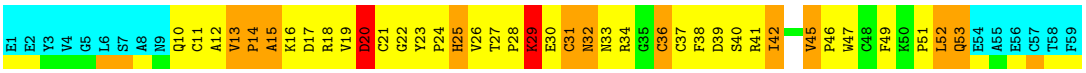
- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 10% 39% 24% • 25%

4.2.31 Score per residue for model 31

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

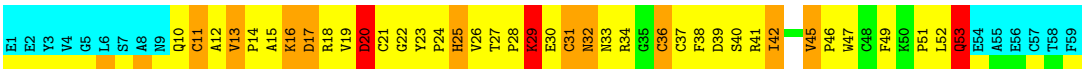
Chain A: 8% 44% 19% • 25%



4.2.32 Score per residue for model 32

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

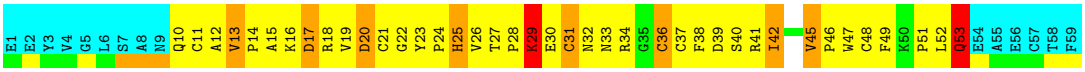
Chain A: 8% 44% 17% 5% 25%



4.2.33 Score per residue for model 33

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 7% 51% 14% • 25%



4.2.34 Score per residue for model 34

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 5% 47% 22% 25%

4.2.35 Score per residue for model 35

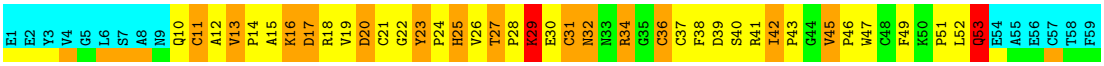
- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 7% 47% 19% • 25%

4.2.36 Score per residue for model 36

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 8% 39% 24% • 25%



4.2.37 Score per residue for model 37

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 10% 46% 17% • 25%

4.2.38 Score per residue for model 38

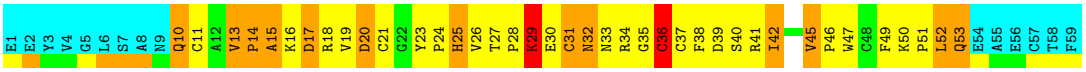
- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 12% 39% 22% • 25%

4.2.39 Score per residue for model 39

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 8% 41% 22% • 25%



4.2.40 Score per residue for model 40

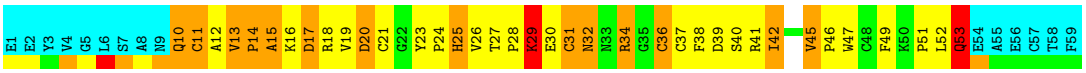
- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 8% 46% 17% • 25%

4.2.41 Score per residue for model 41

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 12% 36% 24% • 25%



4.2.42 Score per residue for model 42

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 5% 53% 15% • 25%

4.2.43 Score per residue for model 43

• Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 12% 41% 19% • 25%

4.2.44 Score per residue for model 44

• Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 10% 47% 14% • 25%

4.2.45 Score per residue for model 45

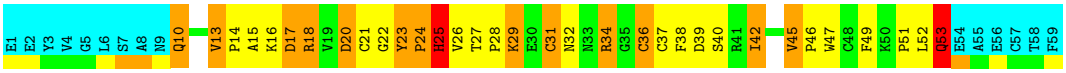
• Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 10% 44% 20% 25%

4.2.46 Score per residue for model 46

• Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

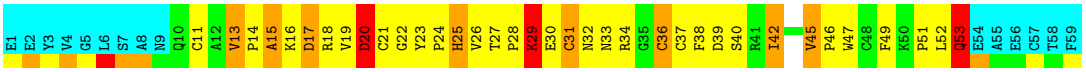
Chain A: 19% 31% 22% • 25%



4.2.47 Score per residue for model 47

• Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 14% 42% 14% 5% 25%



4.2.48 Score per residue for model 48

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 12% 39% 22% • 25%

4.2.49 Score per residue for model 49

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 7% 49% 15% • 25%

4.2.50 Score per residue for model 50

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 7% 46% 19% • 25%

4.2.51 Score per residue for model 51

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 14% 32% 29% 25%

4.2.52 Score per residue for model 52

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 10% 39% 24% • 25%

4.2.53 Score per residue for model 53

• Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 8% 44% 19% • 25%

4.2.54 Score per residue for model 54

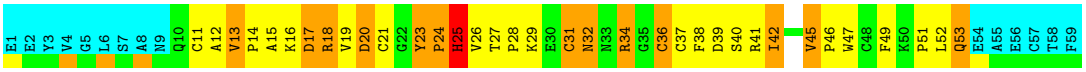
• Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 7% 51% 17% 25%

4.2.55 Score per residue for model 55

• Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

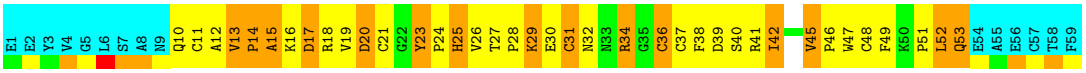
Chain A: 15% 36% 22% • 25%



4.2.56 Score per residue for model 56

• Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 10% 39% 25% 25%



4.2.57 Score per residue for model 57

• Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 8% 42% 24% 25%

4.2.58 Score per residue for model 58

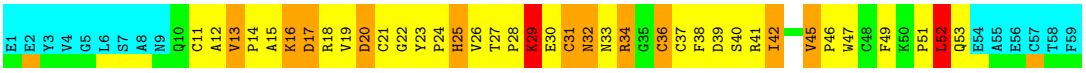
• Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 12% 34% 29% 25%

4.2.59 Score per residue for model 59

• Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 10% 42% 19% • 25%



4.2.60 Score per residue for model 60

• Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 10% 42% 19% • 25%

4.2.61 Score per residue for model 61

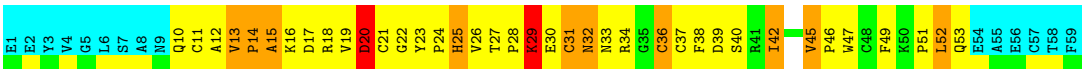
• Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 8% 46% 20% 25%

4.2.62 Score per residue for model 62

• Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

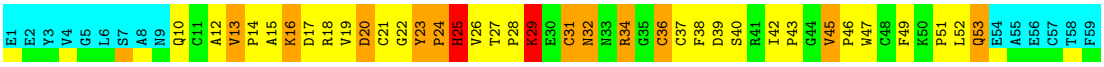
Chain A: 10% 44% 17% • 25%



4.2.63 Score per residue for model 63

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

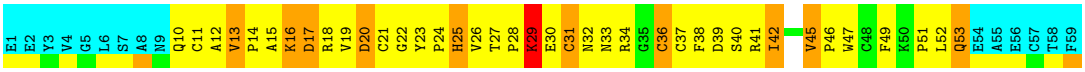
Chain A: 14% 39% 19% • 25%



4.2.64 Score per residue for model 64

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 8% 47% 17% • 25%



4.2.65 Score per residue for model 65

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 7% 47% 17% • 25%

4.2.66 Score per residue for model 66

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 10% 36% 29% 25%

4.2.67 Score per residue for model 67

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 8% 41% 22% • 25%

4.2.68 Score per residue for model 68

• Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 12% 36% 25% • 25%

4.2.69 Score per residue for model 69

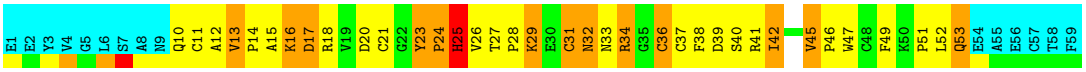
• Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 14% 32% 29% 25%

4.2.70 Score per residue for model 70

• Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

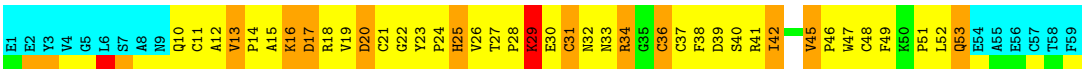
Chain A: 14% 37% 22% • 25%



4.2.71 Score per residue for model 71

• Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 7% 47% 19% • 25%



4.2.72 Score per residue for model 72

• Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 8% 42% 19% 5% 25%

4.2.73 Score per residue for model 73

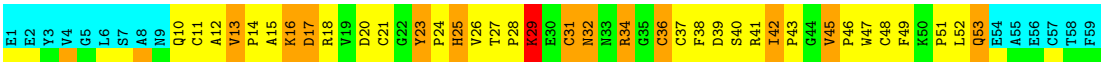
• Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 15% 36% 24% 25%

4.2.74 Score per residue for model 74

• Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 12% 41% 20% • 25%



4.2.75 Score per residue for model 75

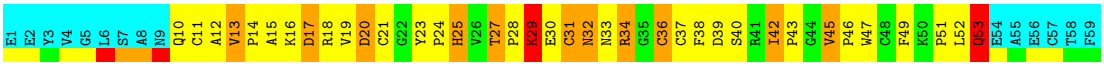
• Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 7% 46% 20% • 25%

4.2.76 Score per residue for model 76

• Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

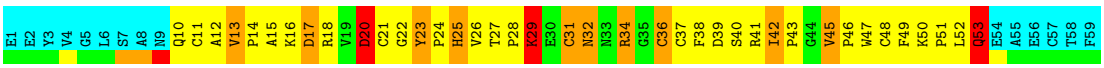
Chain A: 12% 41% 19% • 25%



4.2.77 Score per residue for model 77

• Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 8% 44% 17% 5% 25%



4.2.78 Score per residue for model 78

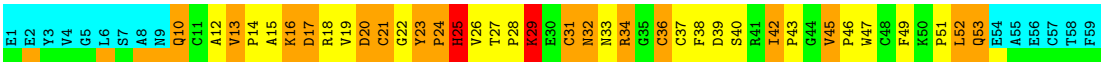
- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 10% 41% 22% • 25%

4.2.79 Score per residue for model 79

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

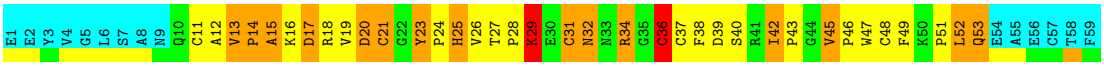
Chain A: 12% 32% 27% • 25%



4.2.80 Score per residue for model 80

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

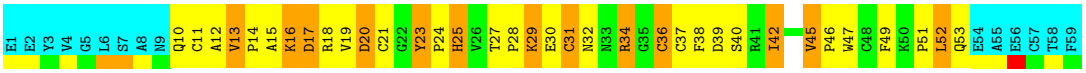
Chain A: 14% 32% 25% • 25%



4.2.81 Score per residue for model 81

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 15% 37% 22% 25%



4.2.82 Score per residue for model 82

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 12% 41% 19% • 25%

4.2.83 Score per residue for model 83

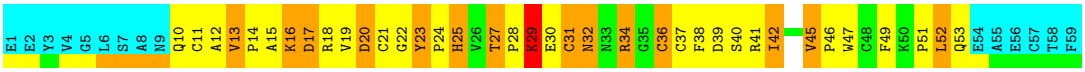
- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 7% 51% 14% • 25%

4.2.84 Score per residue for model 84

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

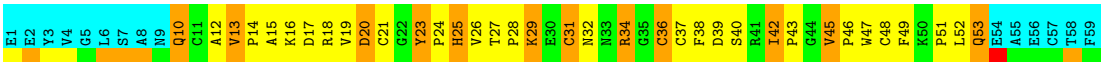
Chain A: 12% 37% 24% • 25%



4.2.85 Score per residue for model 85

- Molecule 1: INTESTINAL TREFOIL FACTOR

Chain A: 14% 41% 20% 25%



5 Refinement protocol and experimental data overview (i)

The models were refined using the following method: *SIMULATED ANNEALING COMBINED WITH TORSION ANGLE DYNAMICS*.

Of the 100 calculated structures, 85 were deposited, based on the following criterion: *CONSISTENCY WITH THE NMR STRUCTURAL DATA*.

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

Software name	Classification	Version
DYANA	refinement	
XEASY	structure solution	
DYANA	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	367
Number of shifts mapped to atoms	367
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	50%

6 Model quality (i)

6.1 Standard geometry (i)

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts (i)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	342	324	323	48±4
All	All	29070	27540	27455	4044

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 72.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:15:ALA:HB1	1:A:45:VAL:HG11	1.06	1.26	39	85
1:A:18:ARG:CZ	1:A:49:PHE:CE2	0.85	2.60	81	68
1:A:13:VAL:HG12	1:A:14:PRO:HD2	0.85	1.49	26	85
1:A:42:ILE:HD13	1:A:45:VAL:CG1	0.74	2.13	58	67
1:A:18:ARG:NH1	1:A:49:PHE:CZ	0.74	2.54	11	39
1:A:25:HIS:O	1:A:25:HIS:CD2	0.73	2.41	56	84
1:A:52:LEU:C	1:A:52:LEU:HD23	0.73	2.03	44	75
1:A:25:HIS:O	1:A:25:HIS:CG	0.71	2.43	69	74
1:A:13:VAL:HG12	1:A:17:ASP:HB3	0.71	1.63	62	10
1:A:18:ARG:HD2	1:A:49:PHE:CD2	0.71	2.20	58	85
1:A:52:LEU:HD23	1:A:53:GLN:N	0.71	1.99	23	46
1:A:52:LEU:O	1:A:52:LEU:HD23	0.70	1.86	73	1
1:A:14:PRO:O	1:A:15:ALA:HB2	0.69	1.88	15	20
1:A:52:LEU:HD23	1:A:52:LEU:C	0.69	2.07	77	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:14:PRO:O	1:A:15:ALA:HB3	0.69	1.87	42	65
1:A:18:ARG:NH1	1:A:49:PHE:CE2	0.68	2.61	83	85
1:A:42:ILE:HD13	1:A:45:VAL:HG13	0.67	1.65	2	67
1:A:18:ARG:NH1	1:A:45:VAL:HG21	0.66	2.05	4	46
1:A:32:ASN:C	1:A:32:ASN:OD1	0.66	2.34	4	5
1:A:27:THR:O	1:A:31:CYS:HB3	0.64	1.93	66	79
1:A:38:PHE:CD1	1:A:39:ASP:N	0.64	2.65	82	3
1:A:18:ARG:NH1	1:A:49:PHE:CD2	0.63	2.66	49	28
1:A:25:HIS:CE1	1:A:30:GLU:CD	0.63	2.72	73	50
1:A:23:TYR:CZ	1:A:34:ARG:HG3	0.63	2.28	67	21
1:A:27:THR:O	1:A:38:PHE:CD2	0.63	2.52	82	3
1:A:28:PRO:HA	1:A:38:PHE:CD1	0.62	2.29	82	3
1:A:27:THR:O	1:A:38:PHE:CD1	0.62	2.52	71	73
1:A:28:PRO:HA	1:A:38:PHE:CD2	0.62	2.30	79	82
1:A:23:TYR:CE1	1:A:34:ARG:CG	0.61	2.84	37	19
1:A:38:PHE:CD2	1:A:39:ASP:N	0.61	2.68	74	82
1:A:27:THR:C	1:A:38:PHE:CD2	0.61	2.75	75	3
1:A:53:GLN:NE2	1:A:53:GLN:H	0.60	1.94	71	2
1:A:23:TYR:CB	1:A:26:VAL:CG1	0.60	2.80	22	56
1:A:27:THR:C	1:A:38:PHE:CD1	0.60	2.75	71	81
1:A:18:ARG:NH1	1:A:45:VAL:CG2	0.60	2.65	59	46
1:A:14:PRO:O	1:A:15:ALA:CB	0.60	2.50	76	85
1:A:46:PRO:O	1:A:47:TRP:C	0.60	2.40	76	85
1:A:27:THR:O	1:A:38:PHE:CG	0.59	2.55	33	76
1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:NE	0.59	2.13	75	81
1:A:25:HIS:CE1	1:A:30:GLU:OE2	0.59	2.56	8	13
1:A:38:PHE:CG	1:A:39:ASP:N	0.58	2.71	74	85
1:A:39:ASP:O	1:A:47:TRP:CG	0.58	2.57	65	85
1:A:40:SER:HA	1:A:47:TRP:CE2	0.58	2.34	38	85
1:A:53:GLN:CG	1:A:53:GLN:O	0.56	2.53	71	2
1:A:27:THR:CA	1:A:38:PHE:CE2	0.56	2.88	75	1
1:A:18:ARG:HD2	1:A:49:PHE:CG	0.56	2.36	83	79
1:A:13:VAL:HG12	1:A:14:PRO:CD	0.56	2.26	58	18
1:A:27:THR:CA	1:A:38:PHE:CE1	0.56	2.89	39	75
1:A:16:LYS:CD	1:A:16:LYS:C	0.56	2.74	79	32
1:A:17:ASP:O	1:A:17:ASP:CG	0.55	2.44	23	10
1:A:52:LEU:HD23	1:A:52:LEU:O	0.55	2.01	56	3
1:A:23:TYR:HB2	1:A:26:VAL:CG1	0.55	2.31	11	56
1:A:52:LEU:C	1:A:52:LEU:CD2	0.55	2.75	44	69
1:A:23:TYR:CE1	1:A:34:ARG:HG2	0.55	2.36	50	16
1:A:21:CYS:CB	1:A:36:CYS:SG	0.54	2.95	80	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:27:THR:HA	1:A:38:PHE:CE1	0.54	2.38	51	66
1:A:23:TYR:CE2	1:A:25:HIS:CD2	0.54	2.96	83	7
1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:CG	0.53	2.33	82	85
1:A:23:TYR:CE2	1:A:34:ARG:HG3	0.53	2.38	79	12
1:A:51:PRO:O	1:A:52:LEU:C	0.53	2.47	62	85
1:A:23:TYR:CE1	1:A:34:ARG:CZ	0.53	2.92	75	1
1:A:32:ASN:N	1:A:32:ASN:OD1	0.53	2.42	83	1
1:A:23:TYR:CE1	1:A:34:ARG:HB3	0.52	2.39	71	7
1:A:27:THR:HA	1:A:38:PHE:CE2	0.52	2.40	75	1
1:A:13:VAL:CG1	1:A:17:ASP:OD2	0.52	2.58	62	1
1:A:31:CYS:SG	1:A:37:CYS:O	0.51	2.68	35	85
1:A:27:THR:OG1	1:A:30:GLU:CB	0.51	2.59	58	12
1:A:27:THR:HG1	1:A:30:GLU:H	0.51	1.46	58	4
1:A:29:LYS:O	1:A:32:ASN:OD1	0.51	2.29	50	30
1:A:25:HIS:CE1	1:A:30:GLU:OE1	0.51	2.64	53	5
1:A:32:ASN:OD1	1:A:38:PHE:CB	0.51	2.59	83	10
1:A:29:LYS:O	1:A:33:ASN:N	0.51	2.44	60	14
1:A:53:GLN:OE1	1:A:53:GLN:O	0.50	2.29	14	8
1:A:18:ARG:CD	1:A:49:PHE:CD2	0.50	2.93	45	37
1:A:34:ARG:O	1:A:34:ARG:CD	0.50	2.59	51	21
1:A:23:TYR:CD2	1:A:48:CYS:SG	0.50	3.05	61	8
1:A:21:CYS:SG	1:A:49:PHE:C	0.50	2.90	80	2
1:A:21:CYS:SG	1:A:49:PHE:CA	0.50	2.99	80	1
1:A:26:VAL:HG11	1:A:48:CYS:HB2	0.50	1.83	78	9
1:A:23:TYR:CE1	1:A:34:ARG:NH2	0.50	2.80	75	1
1:A:13:VAL:CG1	1:A:17:ASP:HB3	0.49	2.37	4	80
1:A:39:ASP:O	1:A:47:TRP:CB	0.49	2.60	65	28
1:A:42:ILE:HD13	1:A:45:VAL:CG2	0.49	2.37	38	19
1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:CH2	0.49	2.43	4	25
1:A:23:TYR:HB3	1:A:26:VAL:CG1	0.49	2.38	40	68
1:A:26:VAL:C	1:A:27:THR:CG2	0.49	2.80	73	47
1:A:29:LYS:N	1:A:32:ASN:HD22	0.49	2.05	47	9
1:A:23:TYR:CE2	1:A:34:ARG:HG2	0.49	2.42	83	7
1:A:30:GLU:CD	1:A:30:GLU:C	0.49	2.71	64	1
1:A:23:TYR:CZ	1:A:34:ARG:HG2	0.49	2.43	69	7
1:A:10:GLN:O	1:A:52:LEU:N	0.49	2.45	2	35
1:A:25:HIS:CE1	1:A:30:GLU:CG	0.49	2.95	54	4
1:A:25:HIS:CE1	1:A:30:GLU:HG2	0.49	2.42	54	2
1:A:39:ASP:CB	1:A:49:PHE:CE2	0.49	2.96	38	45
1:A:29:LYS:N	1:A:32:ASN:ND2	0.49	2.60	47	10
1:A:24:PRO:O	1:A:26:VAL:N	0.48	2.46	46	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:PRO:CA	1:A:38:PHE:CD2	0.48	2.97	34	66
1:A:29:LYS:O	1:A:33:ASN:CB	0.48	2.61	60	13
1:A:10:GLN:CD	1:A:10:GLN:N	0.47	2.66	49	1
1:A:19:VAL:HG12	1:A:19:VAL:O	0.47	2.09	33	1
1:A:19:VAL:O	1:A:20:ASP:O	0.47	2.32	82	80
1:A:25:HIS:NE2	1:A:30:GLU:OE2	0.47	2.47	64	1
1:A:52:LEU:HD23	1:A:53:GLN:C	0.47	2.29	60	30
1:A:30:GLU:OE1	1:A:31:CYS:N	0.47	2.48	64	1
1:A:42:ILE:CD1	1:A:45:VAL:HG22	0.47	2.40	13	14
1:A:32:ASN:ND2	1:A:32:ASN:C	0.47	2.69	79	12
1:A:23:TYR:CB	1:A:26:VAL:HG12	0.46	2.40	38	45
1:A:23:TYR:CE2	1:A:25:HIS:NE2	0.46	2.83	83	1
1:A:53:GLN:NE2	1:A:53:GLN:N	0.46	2.64	13	2
1:A:19:VAL:O	1:A:19:VAL:HG12	0.46	2.11	16	6
1:A:10:GLN:N	1:A:10:GLN:OE1	0.46	2.48	72	1
1:A:53:GLN:N	1:A:53:GLN:CD	0.46	2.68	71	2
1:A:23:TYR:OH	1:A:34:ARG:NE	0.46	2.48	74	2
1:A:13:VAL:CG1	1:A:17:ASP:CB	0.46	2.94	64	16
1:A:32:ASN:O	1:A:32:ASN:CG	0.45	2.54	52	25
1:A:51:PRO:O	1:A:53:GLN:N	0.45	2.50	73	1
1:A:18:ARG:NH2	1:A:39:ASP:CG	0.45	2.69	82	1
1:A:42:ILE:HD13	1:A:45:VAL:HG22	0.45	1.87	12	3
1:A:25:HIS:O	1:A:30:GLU:OE1	0.45	2.34	64	1
1:A:42:ILE:CD1	1:A:45:VAL:CG2	0.45	2.94	13	13
1:A:28:PRO:CA	1:A:38:PHE:CD1	0.45	3.00	75	1
1:A:20:ASP:OD1	1:A:22:GLY:N	0.44	2.50	77	4
1:A:23:TYR:CZ	1:A:34:ARG:CG	0.44	3.00	67	1
1:A:32:ASN:OD1	1:A:38:PHE:HB2	0.44	2.12	83	1
1:A:25:HIS:ND1	1:A:30:GLU:OE1	0.44	2.50	37	8
1:A:23:TYR:OH	1:A:34:ARG:CZ	0.44	2.66	78	1
1:A:14:PRO:O	1:A:18:ARG:NH2	0.44	2.50	38	4
1:A:27:THR:OG1	1:A:30:GLU:N	0.44	2.48	78	6
1:A:32:ASN:OD1	1:A:38:PHE:N	0.44	2.50	66	2
1:A:18:ARG:NE	1:A:49:PHE:CD2	0.44	2.86	45	5
1:A:13:VAL:HB	1:A:18:ARG:HD3	0.44	1.89	61	19
1:A:23:TYR:CZ	1:A:34:ARG:HB3	0.44	2.48	35	3
1:A:26:VAL:CG1	1:A:48:CYS:HB2	0.44	2.42	56	10
1:A:27:THR:C	1:A:38:PHE:CE2	0.44	2.92	75	1
1:A:20:ASP:HB2	1:A:46:PRO:CG	0.44	2.43	79	1
1:A:29:LYS:O	1:A:32:ASN:ND2	0.43	2.50	22	2
1:A:32:ASN:OD1	1:A:32:ASN:N	0.43	2.50	72	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:LYS:NZ	1:A:17:ASP:OD2	0.43	2.51	71	1
1:A:17:ASP:O	1:A:17:ASP:OD1	0.43	2.37	62	1
1:A:26:VAL:HG11	1:A:48:CYS:CB	0.43	2.44	56	2
1:A:23:TYR:CE2	1:A:34:ARG:CG	0.43	3.02	55	2
1:A:19:VAL:HG11	1:A:50:LYS:HD3	0.43	1.90	82	1
1:A:43:PRO:O	1:A:45:VAL:O	0.43	2.37	67	35
1:A:50:LYS:HB3	1:A:51:PRO:HD2	0.42	1.90	14	5
1:A:10:GLN:CD	1:A:11:CYS:SG	0.42	2.97	72	1
1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:CE2	0.42	2.49	38	3
1:A:53:GLN:O	1:A:53:GLN:HG2	0.42	2.14	71	2
1:A:40:SER:HA	1:A:47:TRP:CD2	0.42	2.49	13	13
1:A:10:GLN:OE1	1:A:11:CYS:SG	0.42	2.78	72	1
1:A:29:LYS:O	1:A:33:ASN:HB2	0.42	2.15	60	11
1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:CD	0.42	2.45	9	12
1:A:13:VAL:HG22	1:A:52:LEU:HB2	0.42	1.90	39	1
1:A:27:THR:C	1:A:38:PHE:CE1	0.42	2.93	58	2
1:A:10:GLN:O	1:A:51:PRO:HA	0.42	2.14	39	2
1:A:23:TYR:OH	1:A:34:ARG:CG	0.42	2.68	67	1
1:A:15:ALA:C	1:A:18:ARG:HG2	0.41	2.35	58	2
1:A:33:ASN:OD1	1:A:33:ASN:C	0.41	2.58	42	2
1:A:17:ASP:OD2	1:A:53:GLN:NE2	0.41	2.52	69	1
1:A:53:GLN:O	1:A:53:GLN:OE1	0.41	2.38	13	2
1:A:18:ARG:NH1	1:A:45:VAL:HG23	0.41	2.30	61	1
1:A:30:GLU:C	1:A:30:GLU:OE1	0.41	2.58	64	1
1:A:27:THR:OG1	1:A:30:GLU:HB2	0.41	2.16	66	1
1:A:18:ARG:CB	1:A:46:PRO:HG2	0.41	2.45	82	2
1:A:23:TYR:OH	1:A:34:ARG:HG2	0.41	2.15	83	1
1:A:19:VAL:HG11	1:A:50:LYS:CD	0.41	2.45	16	1
1:A:19:VAL:O	1:A:20:ASP:C	0.41	2.59	29	1
1:A:18:ARG:HE	1:A:45:VAL:HG21	0.41	1.76	81	1
1:A:32:ASN:OD1	1:A:32:ASN:C	0.41	2.57	41	1
1:A:33:ASN:OD1	1:A:33:ASN:O	0.41	2.38	25	1
1:A:32:ASN:O	1:A:32:ASN:ND2	0.41	2.53	74	1
1:A:13:VAL:HG23	1:A:49:PHE:CE1	0.41	2.51	62	1
1:A:43:PRO:HA	1:A:47:TRP:NE1	0.41	2.31	80	1
1:A:27:THR:CG2	1:A:30:GLU:HB2	0.40	2.46	69	2
1:A:34:ARG:O	1:A:34:ARG:HD2	0.40	2.16	67	1
1:A:10:GLN:NE2	1:A:37:CYS:SG	0.40	2.94	50	1
1:A:16:LYS:C	1:A:16:LYS:HD2	0.40	2.36	79	1
1:A:43:PRO:O	1:A:44:GLY:C	0.40	2.60	83	1
1:A:35:GLY:O	1:A:36:CYS:HB2	0.40	2.16	39	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:GLN:OE1	1:A:37:CYS:SG	0.40	2.80	43	1
1:A:10:GLN:CG	1:A:51:PRO:HB3	0.40	2.46	68	1
1:A:35:GLY:O	1:A:36:CYS:CB	0.40	2.69	72	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	44/59 (75%)	27±1 (62±2%)	10±1 (24±3%)	6±1 (14±2%)	1 5
All	All	3740/5015 (75%)	2334 (62%)	884 (24%)	522 (14%)	1 5

All 11 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	20	ASP	85
1	A	24	PRO	85
1	A	29	LYS	85
1	A	36	CYS	85
1	A	53	GLN	62
1	A	22	GLY	61
1	A	15	ALA	21
1	A	14	PRO	20
1	A	25	HIS	9
1	A	52	LEU	8
1	A	35	GLY	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	39/51 (76%)	23±2 (60±4%)	16±2 (40±4%)	0 5
All	All	3315/4335 (76%)	1996 (60%)	1319 (40%)	0 5

All 23 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	13	VAL	85
1	A	16	LYS	85
1	A	21	CYS	85
1	A	25	HIS	85
1	A	31	CYS	85
1	A	36	CYS	85
1	A	42	ILE	85
1	A	45	VAL	85
1	A	53	GLN	84
1	A	34	ARG	78
1	A	29	LYS	71
1	A	17	ASP	70
1	A	11	CYS	66
1	A	41	ARG	54
1	A	10	GLN	49
1	A	32	ASN	47
1	A	52	LEU	24
1	A	23	TYR	24
1	A	30	GLU	23
1	A	20	ASP	14
1	A	18	ARG	13
1	A	50	LYS	12
1	A	27	THR	10

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 50% for the well-defined parts and 49% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *assigned_chem_shift_list_1*

7.1.1 Bookkeeping (i)

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

Total number of shifts	367
Number of shifts mapped to atoms	367
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	1

7.1.2 Chemical shift referencing (i)

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction ± precision, *ppm*	Suggested action
$^{13}C_{\alpha}$	0	—	None (insufficient data)
$^{13}C_{\beta}$	0	—	None (insufficient data)
$^{13}C'$	0	—	None (insufficient data)
^{15}N	50	-0.06 ± 0.94	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 50%, i.e. 287 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 576. 0 out of 5 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^{1}H	^{13}C	^{15}N
Backbone	118/211 (56%)	81/85 (95%)	0/88 (0%)	37/38 (97%)
Sidechain	155/316 (49%)	150/203 (74%)	0/97 (0%)	5/16 (31%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

	Total	^{1}H	^{13}C	^{15}N
Aromatic	14/49 (29%)	13/24 (54%)	0/22 (0%)	1/3 (33%)
Overall	287/576 (50%)	244/312 (78%)	0/207 (0%)	43/57 (75%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 49%, i.e. 367 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 755. 0 out of 7 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^{1}H	^{13}C	^{15}N
Backbone	156/287 (54%)	106/116 (91%)	0/118 (0%)	50/53 (94%)
Sidechain	195/400 (49%)	189/257 (74%)	0/126 (0%)	6/17 (35%)
Aromatic	16/68 (24%)	15/33 (45%)	0/32 (0%)	1/3 (33%)
Overall	367/755 (49%)	310/406 (76%)	0/276 (0%)	57/73 (78%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts (i)

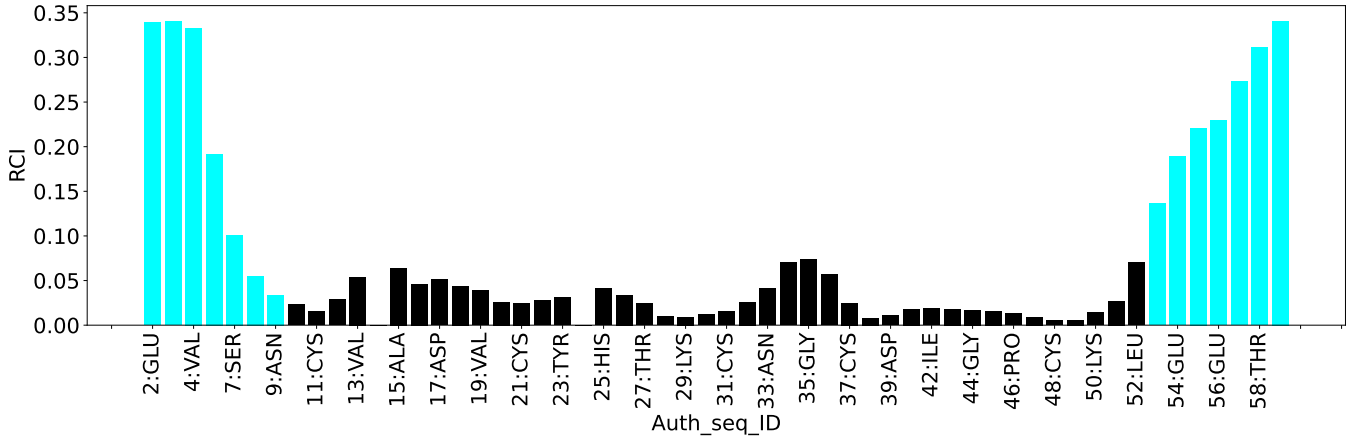
The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

List Id	Chain	Res	Type	Atom	Shift, *ppm*	Expected range, *ppm*	Z-score
1	A	18	ARG	NE	107.70	76.53 – 92.65	14.3

7.1.5 Random Coil Index (RCI) plots (i)

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

Random coil index (RCI) for chain A:


RCI
0.35
0.30
0.25
0.20
0.15
0.10
0.05
0.00
2:GLU
4:VAL
7:SER
9:ASN
11:CYS
13:VAL
15:ALA
17:ASP
19:VAL
21:CYS
23:TYR
25:HIS
27:THR
29:LYS
31:CYS
33:ASN
35:GLY
37:CYS
39:ASP
42:ILE
44:GLY
46:PRO
48:CYS
50:LYS
52:LEU
54:GLU
56:GLU
58:THR
Auth_seq_ID

8 NMR restraints analysis (i)

8.1 Conformationally restricting restraints (i)

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

Description	Value
Total distance restraints	1069
Intra-residue (|i-j|=0)	384
Sequential (|i-j|=1)	266
Medium range (|i-j|>1 and |i-j|<5)	157
Long range (|i-j|≥5)	258
Inter-chain	0
Hydrogen bond restraints	4
Disulfide bond restraints	0
Total dihedral-angle restraints	0
Number of unmapped restraints	0
Number of restraints per residue	18.1
Number of long range restraints per residue[1]	4.4

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

8.2 Residual restraint violations (i)

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

8.2.1 Average number of distance violations per model (i)

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

Bins (Å)	Average number of violations per model	Max (Å)
0.1-0.2 (Small)	23.8	0.2
0.2-0.5 (Medium)	21.2	0.5
>0.5 (Large)	48.0	3.13

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

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

9 Distance violation analysis (i)

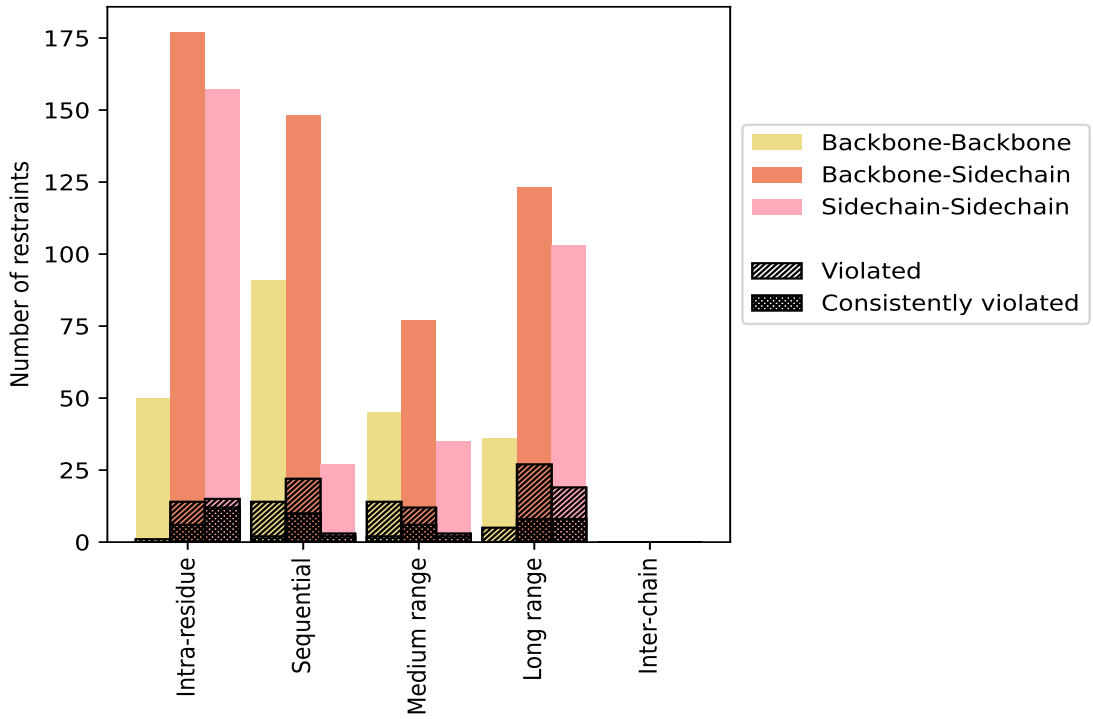
9.1 Summary of distance violations (i)

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

Restraints type	Count	%[1]	Violated[3]			Consistently Violated[4]		
			Count	%[2]	%[1]	Count	%[2]	%[1]
Intra-residue (|i-j|=0)	384	35.9	30	7.8	2.8	18	4.7	1.7
Backbone-Backbone	50	4.7	1	2.0	0.1	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	177	16.6	14	7.9	1.3	6	3.4	0.6
Sidechain-Sidechain	157	14.7	15	9.6	1.4	12	7.6	1.1
Sequential (|i-j|=1)	266	24.9	39	14.7	3.6	14	5.3	1.3
Backbone-Backbone	91	8.5	14	15.4	1.3	2	2.2	0.2
Backbone-Sidechain	148	13.8	22	14.9	2.1	10	6.8	0.9
Sidechain-Sidechain	27	2.5	3	11.1	0.3	2	7.4	0.2
Medium range (|i-j|>1 & |i-j|<5)	157	14.7	29	18.5	2.7	10	6.4	0.9
Backbone-Backbone	45	4.2	14	31.1	1.3	2	4.4	0.2
Backbone-Sidechain	77	7.2	12	15.6	1.1	6	7.8	0.6
Sidechain-Sidechain	35	3.3	3	8.6	0.3	2	5.7	0.2
Long range (|i-j|≥5)	258	24.1	51	19.8	4.8	16	6.2	1.5
Backbone-Backbone	32	3.0	5	15.6	0.5	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	123	11.5	27	22.0	2.5	8	6.5	0.7
Sidechain-Sidechain	103	9.6	19	18.4	1.8	8	7.8	0.7
Inter-chain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Hydrogen bond	4	0.4	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Disulfide bond	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Total	1069	100.0	149	13.9	13.9	58	5.4	5.4
Backbone-Backbone	222	20.8	34	15.3	3.2	4	1.8	0.4
Backbone-Sidechain	525	49.1	75	14.3	7.0	30	5.7	2.8
Sidechain-Sidechain	322	30.1	40	12.4	3.7	24	7.5	2.2

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

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



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

9.2 Distance violation statistics for each model (i)

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

Model ID	Number of violations						Mean (Å)	Max (Å)	SD[6] (Å)	Median (Å)
	IR[1]	SQ[2]	MR[3]	LR[4]	IC[5]	Total				
1	23	27	20	27	0	97	0.66	2.69	0.54	0.52
2	24	22	18	23	0	87	0.72	2.63	0.55	0.54
3	23	22	18	22	0	85	0.68	2.62	0.54	0.52
4	24	24	17	21	0	86	0.7	2.6	0.55	0.53
5	24	28	18	23	0	93	0.68	2.62	0.56	0.54
6	22	23	19	29	0	93	0.66	2.69	0.54	0.48
7	23	26	20	25	0	94	0.65	2.67	0.54	0.5
8	23	26	17	23	0	89	0.68	2.61	0.54	0.53
9	21	29	20	25	0	95	0.66	2.66	0.54	0.5
10	23	26	19	26	0	94	0.67	2.65	0.54	0.52
11	24	27	20	26	0	97	0.66	2.65	0.55	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Model ID	Number of violations						Mean (Å)	Max (Å)	SD[6] (Å)	Median (Å)
	IR[1]	SQ[2]	MR[3]	LR[4]	IC[5]	Total				
12	24	27	20	22	0	93	0.68	2.63	0.56	0.53
13	24	28	18	22	0	92	0.66	2.63	0.55	0.46
14	22	26	19	27	0	94	0.67	2.67	0.54	0.48
15	24	26	20	24	0	94	0.65	2.61	0.54	0.5
16	23	25	19	27	0	94	0.66	2.68	0.53	0.52
17	25	27	18	27	0	97	0.67	2.64	0.56	0.53
18	23	25	17	23	0	88	0.72	2.7	0.54	0.57
19	21	27	19	25	0	92	0.69	2.69	0.56	0.54
20	23	26	18	27	0	94	0.65	2.72	0.54	0.5
21	22	26	20	27	0	95	0.66	2.68	0.54	0.52
22	23	24	19	27	0	93	0.66	2.68	0.53	0.54
23	22	25	18	27	0	92	0.66	2.65	0.53	0.5
24	21	27	18	26	0	92	0.67	2.66	0.54	0.52
25	22	29	16	20	0	87	0.7	2.67	0.54	0.56
26	22	27	21	26	0	96	0.66	2.65	0.54	0.49
27	22	25	18	22	0	87	0.7	2.67	0.55	0.56
28	24	27	17	28	0	96	0.66	2.63	0.55	0.53
29	22	26	17	26	0	91	0.69	2.73	0.56	0.53
30	24	26	21	24	0	95	0.67	2.67	0.54	0.51
31	25	24	18	25	0	92	0.69	2.63	0.55	0.5
32	22	25	18	22	0	87	0.69	2.66	0.54	0.55
33	24	25	19	26	0	94	0.64	2.7	0.53	0.55
34	21	26	17	27	0	91	0.7	2.67	0.56	0.56
35	22	26	17	22	0	87	0.7	2.69	0.56	0.56
36	21	27	19	29	0	96	0.64	2.66	0.55	0.5
37	24	24	19	28	0	95	0.66	2.7	0.54	0.51
38	24	23	17	27	0	91	0.73	2.57	0.58	0.54
39	25	24	19	22	0	90	0.69	2.61	0.54	0.52
40	23	25	18	29	0	95	0.68	2.71	0.55	0.56
41	23	24	20	25	0	92	0.68	2.62	0.55	0.5
42	23	25	18	27	0	93	0.65	2.7	0.53	0.49
43	22	24	18	28	0	92	0.65	2.69	0.54	0.51
44	23	26	17	29	0	95	0.63	2.68	0.52	0.49
45	20	25	19	28	0	92	0.67	2.64	0.53	0.52
46	26	27	20	28	0	101	0.67	2.67	0.54	0.55
47	22	26	20	27	0	95	0.66	2.68	0.53	0.49
48	22	25	18	28	0	93	0.68	2.68	0.56	0.54
49	22	26	19	25	0	92	0.68	2.67	0.55	0.53
50	22	24	18	25	0	89	0.65	2.7	0.54	0.51
51	22	27	18	27	0	94	0.67	2.69	0.56	0.54
52	22	28	17	27	0	94	0.68	2.7	0.55	0.52

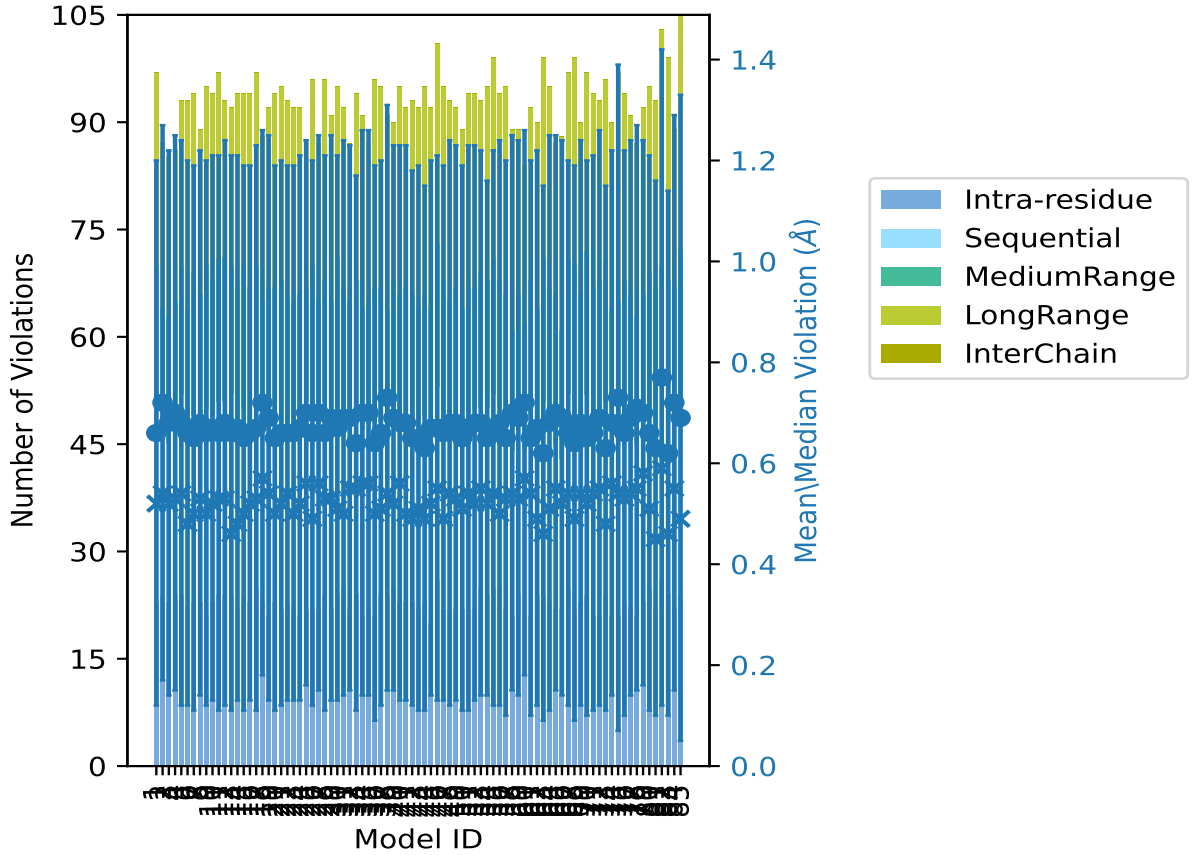
Continued on next page...

Continued from previous page...

Model ID	Number of violations						Mean (Å)	Max (Å)	SD[6] (Å)	Median (Å)
	IR[1]	SQ[2]	MR[3]	LR[4]	IC[5]	Total				
53	25	25	19	24	0	93	0.68	2.7	0.54	0.55
54	24	26	18	27	0	95	0.65	2.67	0.51	0.52
55	25	27	19	28	0	99	0.67	2.67	0.55	0.54
56	25	25	18	26	0	94	0.68	2.61	0.56	0.5
57	22	24	20	29	0	95	0.65	2.71	0.55	0.53
58	21	23	17	28	0	89	0.7	2.58	0.55	0.54
59	24	25	17	23	0	89	0.69	2.68	0.55	0.53
60	21	23	18	22	0	84	0.72	2.69	0.54	0.57
61	21	28	19	24	0	92	0.65	2.71	0.55	0.54
62	24	23	17	26	0	90	0.67	2.64	0.55	0.49
63	24	27	20	28	0	99	0.62	2.71	0.53	0.46
64	23	27	17	28	0	95	0.68	2.67	0.57	0.51
65	22	23	21	21	0	87	0.7	2.66	0.55	0.55
66	22	21	18	27	0	88	0.69	2.61	0.55	0.52
67	25	27	19	26	0	97	0.66	2.69	0.54	0.54
68	22	25	23	29	0	99	0.64	2.68	0.55	0.49
69	23	25	18	24	0	90	0.68	2.69	0.56	0.54
70	24	28	20	25	0	97	0.65	2.69	0.55	0.52
71	21	28	18	27	0	94	0.66	2.71	0.55	0.54
72	21	28	19	25	0	93	0.69	2.68	0.57	0.55
73	24	27	20	25	0	96	0.63	2.68	0.52	0.48
74	21	26	17	26	0	90	0.68	2.66	0.54	0.56
75	21	25	19	32	0	97	0.73	3.0	0.66	0.54
76	23	26	19	26	0	94	0.66	2.69	0.56	0.53
77	22	26	18	25	0	91	0.69	2.7	0.55	0.54
78	21	24	18	24	0	87	0.71	2.66	0.56	0.55
79	23	25	18	26	0	92	0.7	2.7	0.54	0.58
80	25	25	19	26	0	95	0.66	2.63	0.55	0.51
81	22	26	19	26	0	93	0.63	2.66	0.53	0.45
82	26	27	17	33	0	103	0.77	3.13	0.65	0.59
83	24	25	19	31	0	99	0.62	2.66	0.52	0.46
84	22	27	18	22	0	89	0.72	2.69	0.57	0.55
85	24	28	20	33	0	105	0.69	3.07	0.64	0.49

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

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



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

9.3 Distance violation statistics for the ensemble (i)

Violation analysis may find that some restraints are violated in few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of the ensemble. In total, 916(IR:354, SQ:227, MR:128, LR:207, IC:0) restraints are not violated in the ensemble.

Number of violated restraints						Fraction of the ensemble	
IR[1]	SQ[2]	MR[3]	LR[4]	IC[5]	Total	Count[6]	%
0	4	0	6	0	10	1	1.2
2	3	3	2	0	10	2	2.4
0	0	1	6	0	7	3	3.5
0	0	0	1	0	1	4	4.7
0	0	0	1	0	1	5	5.9
0	0	0	0	0	0	6	7.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Number of violated restraints						Fraction of the ensemble	
IR[1]	SQ[2]	MR[3]	LR[4]	IC[5]	Total	Count[6]	%
0	0	0	1	0	1	7	8.2
0	0	1	1	0	2	8	9.4
0	0	1	0	0	1	9	10.6
0	0	0	0	0	0	10	11.8
1	2	1	0	0	4	11	12.9
1	0	0	1	0	2	12	14.1
0	0	0	1	0	1	13	15.3
0	0	0	0	0	0	14	16.5
0	0	0	0	0	0	15	17.6
0	0	0	0	0	0	16	18.8
0	0	0	0	0	0	17	20.0
0	0	0	0	0	0	18	21.2
0	0	0	0	0	0	19	22.4
0	0	0	0	0	0	20	23.5
0	0	1	0	0	1	21	24.7
0	0	1	0	0	1	22	25.9
0	1	0	0	0	1	23	27.1
0	0	1	0	0	1	24	28.2
0	0	0	0	0	0	25	29.4
0	0	0	0	0	0	26	30.6
0	0	0	0	0	0	27	31.8
0	0	0	0	0	0	28	32.9
0	0	0	1	0	1	29	34.1
1	1	0	0	0	2	30	35.3
1	0	0	0	0	1	31	36.5
0	0	0	0	0	0	32	37.6
0	0	1	3	0	4	33	38.8
0	0	0	0	0	0	34	40.0
0	0	0	0	0	0	35	41.2
1	0	0	0	0	1	36	42.4
0	0	0	0	0	0	37	43.5
0	0	0	0	0	0	38	44.7
0	0	0	1	0	1	39	45.9
1	1	0	1	0	3	40	47.1
0	1	0	0	0	1	41	48.2
0	0	0	1	0	1	42	49.4
1	0	0	0	0	1	43	50.6
0	0	0	0	0	0	44	51.8
0	0	0	0	0	0	45	52.9
0	0	0	0	0	0	46	54.1
0	0	0	0	0	0	47	55.3

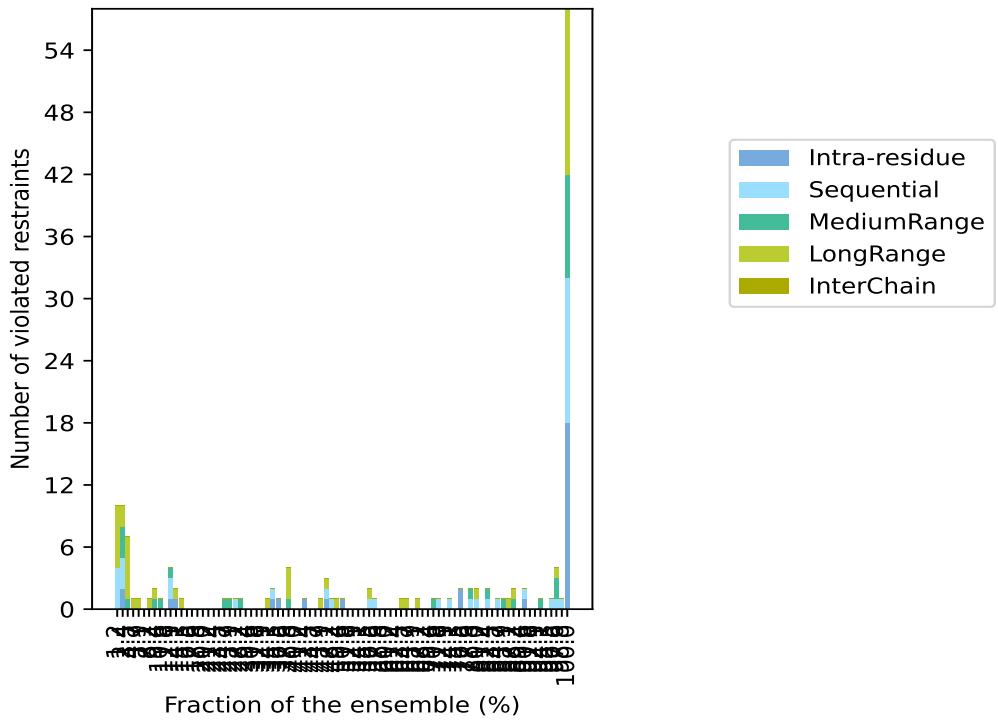
Continued on next page...

Continued from previous page...

Number of violated restraints						Fraction of the ensemble	
IR[1]	SQ[2]	MR[3]	LR[4]	IC[5]	Total	Count[6]	%
0	1	0	1	0	2	48	56.5
0	1	0	0	0	1	49	57.6
0	0	0	0	0	0	50	58.8
0	0	0	0	0	0	51	60.0
0	0	0	0	0	0	52	61.2
0	0	0	0	0	0	53	62.4
0	0	0	1	0	1	54	63.5
0	0	0	1	0	1	55	64.7
0	0	0	0	0	0	56	65.9
0	0	0	1	0	1	57	67.1
0	0	0	0	0	0	58	68.2
0	0	0	0	0	0	59	69.4
0	0	1	0	0	1	60	70.6
0	1	0	0	0	1	61	71.8
0	0	0	0	0	0	62	72.9
0	1	0	0	0	1	63	74.1
0	0	0	0	0	0	64	75.3
2	0	0	0	0	2	65	76.5
0	0	0	0	0	0	66	77.6
0	1	1	0	0	2	67	78.8
0	1	0	1	0	2	68	80.0
0	0	0	0	0	0	69	81.2
0	1	1	0	0	2	70	82.4
0	0	0	0	0	0	71	83.5
0	1	0	0	0	1	72	84.7
0	0	1	0	0	1	73	85.9
0	0	0	1	0	1	74	87.1
0	0	1	1	0	2	75	88.2
0	0	0	0	0	0	76	89.4
1	1	0	0	0	2	77	90.6
0	0	0	0	0	0	78	91.8
0	0	0	0	0	0	79	92.9
0	0	1	0	0	1	80	94.1
0	0	0	0	0	0	81	95.3
0	1	0	0	0	1	82	96.5
0	1	2	1	0	4	83	97.6
0	1	0	0	0	1	84	98.8
18	14	10	16	0	58	85	100.0

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

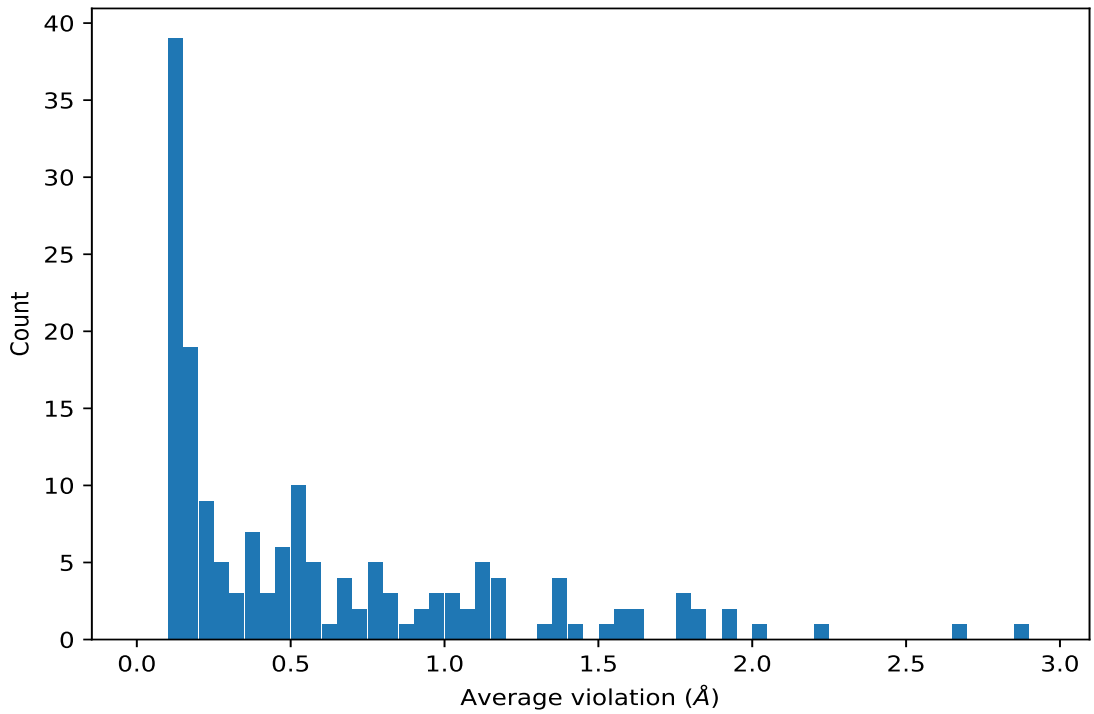
9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble (i)



9.4 Most violated distance restraints in the ensemble (i)

9.4.1 Histogram : Distribution of mean distance violations (i)

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



9.4.2 Table: Most violated distance restraints (i)

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

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	85	2.67	0.03	2.67
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	85	1.93	0.07	1.93
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	85	1.91	0.0	1.91
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	85	1.78	0.06	1.78
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	85	1.78	0.06	1.78
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	85	1.78	0.06	1.78
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	85	1.64	0.05	1.63
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	85	1.6	0.05	1.59
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	85	1.57	0.04	1.57
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	85	1.52	0.06	1.51
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	85	1.43	0.0	1.43
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	85	1.35	0.07	1.38
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	85	1.35	0.07	1.38
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	85	1.35	0.07	1.38
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	85	1.35	0.46	1.57
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	85	1.33	0.07	1.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	85	1.19	0.06	1.18
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	85	1.19	0.06	1.18
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	85	1.19	0.06	1.18
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	85	1.18	0.06	1.17
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	85	1.14	0.24	1.21
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	85	1.1	0.17	1.06
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	85	1.1	0.17	1.06
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	85	1.1	0.17	1.06
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	85	1.08	0.11	1.13
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	85	1.03	0.08	1.0
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	85	1.01	0.0	1.01
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	85	1.0	0.01	1.0
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	85	0.98	0.15	1.05
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	85	0.97	0.03	0.97
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	85	0.92	0.0	0.92
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	85	0.87	0.06	0.87
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	85	0.84	0.13	0.85
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	85	0.83	0.03	0.83
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	85	0.79	0.0	0.79
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	85	0.76	0.0	0.76
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	85	0.69	0.0	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	85	0.69	0.0	0.69
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	85	0.66	0.04	0.66
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	85	0.65	0.03	0.64
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	85	0.62	0.04	0.61
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	85	0.57	0.03	0.58
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	85	0.55	0.03	0.56
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	85	0.55	0.01	0.55
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	85	0.54	0.0	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	85	0.54	0.0	0.54
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	85	0.54	0.06	0.54
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	85	0.54	0.04	0.55
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	85	0.5	0.07	0.52
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	85	0.5	0.11	0.51
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	85	0.47	0.13	0.46
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	85	0.47	0.13	0.46
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	85	0.47	0.13	0.46
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	85	0.46	0.02	0.46
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	85	0.39	0.51	0.28
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	85	0.38	0.03	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	85	0.38	0.0	0.38
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	85	0.37	0.11	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	85	0.36	0.04	0.36
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	85	0.33	0.02	0.33
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	85	0.28	0.05	0.28
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	85	0.28	0.05	0.28
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	85	0.28	0.05	0.28
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	85	0.24	0.01	0.23
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	85	0.22	0.0	0.22
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	85	0.22	0.05	0.21
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	85	0.2	0.0	0.2
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	85	0.19	0.01	0.19
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	85	0.18	0.02	0.18
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	85	0.15	0.0	0.15
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	85	0.15	0.01	0.15
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	85	0.14	0.01	0.14
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	84	0.16	0.02	0.15
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	83	1.55	0.23	1.59
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	83	0.91	0.58	1.21
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	83	0.4	0.14	0.39
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	83	0.4	0.14	0.39
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	83	0.4	0.14	0.39
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	83	0.15	0.02	0.14
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	82	0.49	0.13	0.52
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	80	0.3	0.09	0.31
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	77	1.13	0.17	1.15
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	77	0.74	0.31	0.79
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	75	0.97	0.58	1.28
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	75	0.31	0.09	0.32
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	74	0.49	0.15	0.52
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	73	0.17	0.04	0.16
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	72	0.12	0.0	0.12
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	70	0.15	0.03	0.14
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	70	0.14	0.02	0.14
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	68	0.24	0.08	0.24
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	68	0.13	0.01	0.13
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	67	0.57	0.24	0.55
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	67	0.15	0.02	0.15
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	65	0.37	0.13	0.35
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	65	0.17	0.02	0.18
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	63	0.32	0.08	0.31
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	61	0.15	0.02	0.15
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	60	0.76	0.41	0.78
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	57	0.27	0.06	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	55	0.2	0.06	0.19
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	54	0.18	0.05	0.17
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	49	0.17	0.05	0.16
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	48	1.05	0.56	1.17
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	48	0.75	0.36	0.66
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	43	0.76	0.3	0.86
(2,96)	1:A:17:ASP:HA	1:A:53:GLN:HE22	42	0.59	0.35	0.4
(1,67)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:11:CYS:H	41	0.18	0.05	0.17
(2,111)	1:A:18:ARG:HG3	1:A:49:PHE:HZ	40	0.73	0.15	0.77
(1,424)	1:A:34:ARG:HB2	1:A:34:ARG:HG3	40	0.52	0.16	0.58
(1,73)	1:A:11:CYS:H	1:A:12:ALA:H	40	0.14	0.03	0.13
(2,48)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HE	39	0.15	0.02	0.15
(1,533)	1:A:42:ILE:H	1:A:42:ILE:HB	36	0.15	0.03	0.16
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG2	33	1.8	0.38	1.85
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG3	33	1.8	0.38	1.85
(1,187)	1:A:18:ARG:HA	1:A:49:PHE:HA	33	0.13	0.03	0.13
(2,335)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HZ	33	0.13	0.02	0.13
(1,100)	1:A:13:VAL:HA	1:A:52:LEU:HB2	33	0.13	0.02	0.13
(1,305)	1:A:26:VAL:H	1:A:26:VAL:HB	31	0.21	0.03	0.22
(2,16)	1:A:5:GLY:H	1:A:6:LEU:HB2	30	0.52	0.3	0.42
(1,441)	1:A:36:CYS:H	1:A:36:CYS:HA	30	0.13	0.02	0.12
(1,264)	1:A:21:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HA	29	0.18	0.05	0.18
(1,391)	1:A:32:ASN:H	1:A:34:ARG:H	24	0.13	0.02	0.12
(1,361)	1:A:29:LYS:HD2	1:A:30:GLU:HA	23	0.52	0.25	0.59
(1,329)	1:A:28:PRO:HA	1:A:30:GLU:H	22	0.18	0.04	0.2
(2,23)	1:A:8:ALA:H	1:A:12:ALA:HA	21	0.18	0.05	0.16
(2,117)	1:A:18:ARG:HD2	1:A:47:TRP:HA	13	0.11	0.01	0.11
(1,230)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:49:PHE:HB3	12	0.16	0.04	0.16
(1,230)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:49:PHE:HB3	12	0.16	0.04	0.16
(1,230)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:49:PHE:HB3	12	0.16	0.04	0.16
(1,677)	1:A:52:LEU:HA	1:A:52:LEU:HG	12	0.15	0.03	0.14
(1,58)	1:A:10:GLN:HA	1:A:10:GLN:HB2	11	0.38	0.0	0.38
(1,26)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:H	11	0.18	0.04	0.16
(1,51)	1:A:9:ASN:HA	1:A:12:ALA:H	11	0.15	0.04	0.13
(1,422)	1:A:34:ARG:HA	1:A:35:GLY:H	11	0.12	0.01	0.12
(1,354)	1:A:29:LYS:HA	1:A:32:ASN:H	9	0.13	0.02	0.12
(1,450)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:50:LYS:HA	8	0.12	0.0	0.12
(2,239)	1:A:34:ARG:HA	1:A:36:CYS:H	8	0.12	0.01	0.11
(1,215)	1:A:18:ARG:HD2	1:A:49:PHE:HA	7	0.14	0.03	0.13
(2,144)	1:A:21:CYS:H	1:A:50:LYS:HB2	5	0.14	0.01	0.13
(2,151)	1:A:21:CYS:HB2	1:A:49:PHE:H	4	0.12	0.01	0.12
(1,484)	1:A:38:PHE:HE1	1:A:48:CYS:HB2	3	2.86	0.02	2.86

Continued on next page...

Continued from previous page...

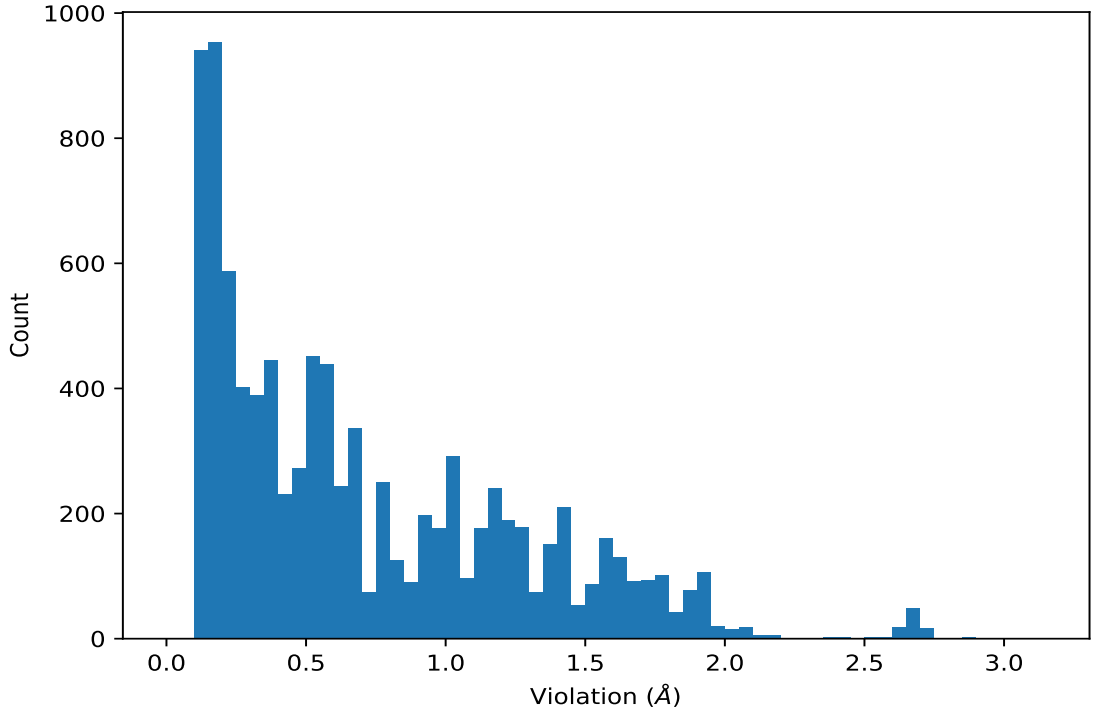
Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,483)	1:A:38:PHE:HD1	1:A:47:TRP:HB2	3	2.22	0.04	2.23
(2,187)	1:A:26:VAL:HA	1:A:38:PHE:HE1	3	2.03	0.06	2.05
(2,188)	1:A:26:VAL:HB	1:A:38:PHE:HE1	3	0.8	0.09	0.76
(2,266)	1:A:38:PHE:HE1	1:A:47:TRP:HA	3	0.51	0.06	0.53
(2,186)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HG2	3	0.17	0.04	0.15
(1,62)	1:A:10:GLN:HA	1:A:12:ALA:H	3	0.13	0.01	0.13
(1,526)	1:A:41:ARG:HB2	1:A:41:ARG:HD2	2	0.2	0.04	0.2
(1,526)	1:A:41:ARG:HB2	1:A:41:ARG:HD3	2	0.2	0.04	0.2
(1,12)	1:A:4:VAL:H	1:A:4:VAL:HB	2	0.18	0.03	0.18
(1,27)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HA	2	0.17	0.01	0.17
(1,245)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:22:GLY:H	2	0.16	0.02	0.16
(2,49)	1:A:13:VAL:HB	1:A:19:VAL:H	2	0.12	0.01	0.12
(2,169)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:24:PRO:HD2	2	0.12	0.02	0.12
(2,169)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:24:PRO:HD3	2	0.12	0.02	0.12
(1,18)	1:A:4:VAL:HA	1:A:5:GLY:H	2	0.12	0.0	0.12
(1,410)	1:A:33:ASN:HA	1:A:36:CYS:H	2	0.12	0.0	0.12
(1,314)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:31:CYS:H	2	0.11	0.0	0.11
(1,314)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:31:CYS:H	2	0.11	0.0	0.11
(1,314)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:31:CYS:H	2	0.11	0.0	0.11
(1,598)	1:A:46:PRO:HB2	1:A:49:PHE:HB2	2	0.11	0.0	0.11
(1,598)	1:A:46:PRO:HB2	1:A:49:PHE:HB3	2	0.11	0.0	0.11

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

9.5 All violated distance restraints (i)

9.5.1 Histogram : Distribution of distance violations (i)

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



9.5.2 Table : All distance violations (i)

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

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	82	3.13
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	85	3.07
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	75	3.0
(1,484)	1:A:38:PHE:HE1	1:A:48:CYS:HB2	75	2.88
(1,484)	1:A:38:PHE:HE1	1:A:48:CYS:HB2	82	2.86
(1,484)	1:A:38:PHE:HE1	1:A:48:CYS:HB2	85	2.84
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	29	2.73
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	20	2.72
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	40	2.71
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	57	2.71
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	61	2.71
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	63	2.71
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	71	2.71
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	18	2.7
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	33	2.7
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	37	2.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	42	2.7
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	50	2.7
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	52	2.7
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	53	2.7
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	77	2.7
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	79	2.7
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	1	2.69
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	6	2.69
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	19	2.69
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	35	2.69
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	43	2.69
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	51	2.69
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	60	2.69
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	67	2.69
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	69	2.69
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	70	2.69
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	76	2.69
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	84	2.69
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	16	2.68
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	21	2.68
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	22	2.68
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	44	2.68
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	47	2.68
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	48	2.68
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	59	2.68
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	68	2.68
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	72	2.68
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	73	2.68
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	82	2.68
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	7	2.67
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	14	2.67
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	25	2.67
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	27	2.67
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	30	2.67
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	34	2.67
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	46	2.67
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	49	2.67
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	54	2.67
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	55	2.67
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	64	2.67
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	9	2.66
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	24	2.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	32	2.66
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	36	2.66
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	65	2.66
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	74	2.66
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	75	2.66
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	78	2.66
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	81	2.66
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	83	2.66
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	10	2.65
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	11	2.65
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	23	2.65
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	26	2.65
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	85	2.65
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	17	2.64
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	45	2.64
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	62	2.64
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	2	2.63
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	12	2.63
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	13	2.63
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	28	2.63
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	31	2.63
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	80	2.63
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	3	2.62
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	5	2.62
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	41	2.62
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	8	2.61
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	15	2.61
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	39	2.61
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	56	2.61
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	66	2.61
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	4	2.6
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	58	2.58
(1,616)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HE1	38	2.57
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG2	38	2.51
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG3	38	2.51
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG2	72	2.43
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG3	72	2.43
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG2	64	2.37
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG3	64	2.37
(1,483)	1:A:38:PHE:HD1	1:A:47:TRP:HB2	75	2.26
(1,483)	1:A:38:PHE:HD1	1:A:47:TRP:HB2	85	2.23
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG2	76	2.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG3	76	2.16
(1,483)	1:A:38:PHE:HD1	1:A:47:TRP:HB2	82	2.16
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG2	28	2.15
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG3	28	2.15
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG2	43	2.14
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG3	43	2.14
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG2	69	2.12
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG3	69	2.12
(2,187)	1:A:26:VAL:HA	1:A:38:PHE:HE1	82	2.1
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG2	48	2.09
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG3	48	2.09
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG2	84	2.09
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG3	84	2.09
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG2	36	2.08
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG3	36	2.08
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG2	52	2.08
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG3	52	2.08
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	19	2.07
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	65	2.07
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	50	2.06
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	53	2.06
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG2	17	2.06
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG3	17	2.06
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	72	2.05
(2,187)	1:A:26:VAL:HA	1:A:38:PHE:HE1	85	2.05
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG2	68	2.05
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG3	68	2.05
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	18	2.04
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	25	2.04
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	35	2.04
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	37	2.04
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	84	2.04
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	61	2.03
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	77	2.03
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	21	2.02
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	49	2.02
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	63	2.02
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	27	2.01
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	60	2.01
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	70	2.01
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	59	2.0
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	71	2.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	76	1.98
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	78	1.98
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	32	1.97
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	34	1.97
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	64	1.97
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	68	1.97
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	69	1.97
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	75	1.97
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	79	1.97
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	42	1.96
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	67	1.96
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	29	1.95
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	33	1.95
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	40	1.95
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	57	1.95
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	74	1.95
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	82	1.95
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	83	1.95
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	85	1.95
(2,187)	1:A:26:VAL:HA	1:A:38:PHE:HE1	75	1.95
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	47	1.94
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	81	1.94
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	20	1.93
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	22	1.93
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	23	1.93
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	31	1.93
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	51	1.93
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	52	1.93
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	73	1.93
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	1	1.92
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	30	1.92
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	44	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	1	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	2	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	3	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	4	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	5	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	6	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	7	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	8	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	9	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	10	1.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	11	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	12	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	13	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	14	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	15	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	16	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	17	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	18	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	19	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	20	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	21	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	22	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	23	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	24	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	25	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	26	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	27	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	28	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	29	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	30	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	31	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	32	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	33	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	34	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	35	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	36	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	37	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	38	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	39	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	40	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	41	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	42	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	43	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	44	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	45	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	46	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	47	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	48	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	49	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	50	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	51	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	52	1.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	53	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	54	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	55	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	56	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	57	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	58	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	59	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	60	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	61	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	62	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	63	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	64	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	65	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	66	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	67	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	68	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	69	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	70	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	71	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	72	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	73	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	74	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	75	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	76	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	77	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	78	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	79	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	80	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	81	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	82	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	83	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	84	1.91
(1,629)	1:A:47:TRP:HE3	1:A:47:TRP:HZ2	85	1.91
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	58	1.9
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	58	1.9
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	58	1.9
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	24	1.9
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	43	1.9
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	48	1.9
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	62	1.9
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG2	34	1.9
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG3	34	1.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	9	1.89
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	9	1.89
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	9	1.89
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	10	1.89
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	10	1.89
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	10	1.89
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	11	1.89
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	11	1.89
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	11	1.89
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	29	1.89
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	29	1.89
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	29	1.89
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	73	1.89
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	73	1.89
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	73	1.89
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	82	1.89
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	82	1.89
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	82	1.89
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	6	1.89
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	7	1.89
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	26	1.89
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	46	1.89
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	54	1.89
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	55	1.89
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	80	1.89
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	26	1.88
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	26	1.88
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	26	1.88
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	45	1.88
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	45	1.88
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	45	1.88
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	85	1.88
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	85	1.88
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	85	1.88
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	3	1.88
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	10	1.88
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	14	1.88
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	16	1.88
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	36	1.88
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG2	51	1.88
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG3	51	1.88
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	7	1.87

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	7	1.87
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	7	1.87
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	43	1.87
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	43	1.87
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	43	1.87
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	9	1.87
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	11	1.87
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	15	1.87
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	17	1.87
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	45	1.87
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	20	1.86
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	20	1.86
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	20	1.86
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	30	1.86
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	30	1.86
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	30	1.86
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	2	1.86
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	56	1.86
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG2	80	1.86
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG3	80	1.86
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	16	1.85
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	16	1.85
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	16	1.85
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	38	1.85
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	38	1.85
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	38	1.85
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	68	1.85
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	68	1.85
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	68	1.85
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	13	1.85
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	28	1.85
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	41	1.85
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	66	1.85
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG2	66	1.85
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG3	66	1.85
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	40	1.84
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	40	1.84
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	40	1.84
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	52	1.84
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	52	1.84
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	52	1.84
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	57	1.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	57	1.84
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	57	1.84
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	4	1.84
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	80	1.83
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	80	1.83
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	80	1.83
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	5	1.83
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	12	1.83
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	39	1.83
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	14	1.82
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	14	1.82
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	14	1.82
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	6	1.81
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	6	1.81
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	6	1.81
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	13	1.81
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	13	1.81
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	13	1.81
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	48	1.81
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	48	1.81
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	48	1.81
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	5	1.8
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	5	1.8
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	5	1.8
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	8	1.8
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	8	1.8
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	8	1.8
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	28	1.8
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	28	1.8
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	28	1.8
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	44	1.8
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	44	1.8
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	44	1.8
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	79	1.8
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	79	1.8
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	79	1.8
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	12	1.79
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	12	1.79
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	12	1.79
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	17	1.79
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	17	1.79
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	17	1.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	24	1.79
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	24	1.79
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	24	1.79
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	41	1.79
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	41	1.79
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	41	1.79
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	42	1.79
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	42	1.79
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	42	1.79
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	66	1.79
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	66	1.79
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	66	1.79
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	58	1.79
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG2	85	1.79
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG3	85	1.79
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	3	1.78
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	3	1.78
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	3	1.78
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	15	1.78
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	15	1.78
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	15	1.78
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	39	1.78
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	39	1.78
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	39	1.78
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	46	1.78
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	46	1.78
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	46	1.78
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	51	1.78
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	51	1.78
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	51	1.78
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	55	1.78
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	55	1.78
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	55	1.78
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	56	1.78
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	56	1.78
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	56	1.78
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	62	1.78
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	62	1.78
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	62	1.78
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	8	1.78
(2,273)	1:A:39:ASP:HA	1:A:49:PHE:HD1	38	1.78
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	2	1.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	2	1.77
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	2	1.77
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	22	1.77
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	22	1.77
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	22	1.77
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	23	1.77
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	23	1.77
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	23	1.77
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	31	1.77
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	31	1.77
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	31	1.77
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	33	1.77
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	33	1.77
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	33	1.77
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	36	1.77
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	36	1.77
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	36	1.77
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	54	1.77
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	54	1.77
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	54	1.77
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	77	1.77
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	77	1.77
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	77	1.77
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	4	1.76
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	29	1.76
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	64	1.76
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	64	1.76
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	64	1.76
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	69	1.76
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	69	1.76
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	69	1.76
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	71	1.76
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	71	1.76
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	71	1.76
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	84	1.76
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	84	1.76
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	84	1.76
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	10	1.75
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	45	1.75
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	40	1.75
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	57	1.75
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	4	1.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	4	1.75
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	4	1.75
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	60	1.75
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	60	1.75
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	60	1.75
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	61	1.75
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	61	1.75
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	61	1.75
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	75	1.75
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	75	1.75
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	75	1.75
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	62	1.75
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	35	1.74
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	58	1.74
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	61	1.74
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	1	1.74
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	1	1.74
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	1	1.74
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	25	1.74
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	25	1.74
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	25	1.74
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	27	1.74
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	27	1.74
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	27	1.74
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	47	1.74
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	47	1.74
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	47	1.74
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	63	1.74
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	63	1.74
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	63	1.74
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	70	1.74
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	70	1.74
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	70	1.74
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	74	1.74
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	74	1.74
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	74	1.74
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	30	1.74
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	51	1.74
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	57	1.74
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG2	81	1.74
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG3	81	1.74
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	54	1.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	75	1.73
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	20	1.73
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	71	1.73
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	79	1.73
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	32	1.73
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	32	1.73
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	32	1.73
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	37	1.73
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	37	1.73
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	37	1.73
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	59	1.73
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	59	1.73
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	59	1.73
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	67	1.73
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	67	1.73
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	67	1.73
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	78	1.73
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	78	1.73
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	78	1.73
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	64	1.73
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG2	77	1.73
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG3	77	1.73
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	13	1.73
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	48	1.72
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	67	1.72
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	34	1.72
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	34	1.72
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	34	1.72
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	35	1.72
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	35	1.72
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	35	1.72
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	50	1.72
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	50	1.72
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	50	1.72
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	65	1.72
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	65	1.72
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	65	1.72
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	72	1.72
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	72	1.72
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	72	1.72
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	79	1.72
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	9	1.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	23	1.71
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	24	1.71
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	83	1.71
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	83	1.71
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	83	1.71
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	61	1.71
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	51	1.71
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	13	1.7
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	26	1.7
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	18	1.7
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	18	1.7
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	18	1.7
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	21	1.7
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	21	1.7
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	21	1.7
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	81	1.7
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	81	1.7
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	81	1.7
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	29	1.7
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	61	1.7
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	67	1.7
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	78	1.7
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	76	1.69
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	82	1.69
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	19	1.69
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	19	1.69
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	19	1.69
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	49	1.69
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	49	1.69
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	49	1.69
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	76	1.69
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	76	1.69
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	76	1.69
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	7	1.69
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	12	1.69
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	26	1.69
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	31	1.69
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	71	1.69
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	75	1.69
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	76	1.69
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	40	1.68
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	52	1.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	56	1.68
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	18	1.68
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	50	1.68
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	51	1.68
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	53	1.68
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	67	1.68
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	69	1.68
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	70	1.68
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	77	1.68
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	1	1.68
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	6	1.68
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	14	1.68
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	19	1.68
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	25	1.68
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	42	1.68
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	65	1.68
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	76	1.68
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	84	1.68
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	8	1.67
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	19	1.67
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	84	1.67
(2,324)	1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:PHE:HE1	53	1.67
(2,324)	1:A:45:VAL:HG12	1:A:49:PHE:HE1	53	1.67
(2,324)	1:A:45:VAL:HG13	1:A:49:PHE:HE1	53	1.67
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	2	1.67
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	5	1.67
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	10	1.67
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	11	1.67
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	32	1.67
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	6	1.67
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	40	1.67
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	57	1.67
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	67	1.67
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	5	1.66
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	12	1.66
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	35	1.66
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	59	1.66
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	60	1.66
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	4	1.66
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	9	1.66
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	18	1.66
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	46	1.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	47	1.66
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	55	1.66
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	71	1.66
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	40	1.66
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	29	1.66
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	69	1.66
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	70	1.66
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	82	1.66
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	68	1.66
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	1	1.65
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	82	1.65
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	1	1.65
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	27	1.65
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	32	1.65
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	37	1.65
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	43	1.65
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	49	1.65
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	52	1.65
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	63	1.65
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	74	1.65
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	16	1.65
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	45	1.65
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG2	58	1.65
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG3	58	1.65
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	20	1.65
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	50	1.65
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	51	1.65
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	74	1.65
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	62	1.65
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	5	1.65
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	16	1.64
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	21	1.64
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	22	1.64
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	25	1.64
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	34	1.64
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	46	1.64
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	65	1.64
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	72	1.64
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	75	1.64
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	20	1.64
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	21	1.64
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	29	1.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	18	1.64
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	19	1.64
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	27	1.64
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	49	1.64
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	53	1.64
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	77	1.64
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	78	1.64
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	77	1.64
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	84	1.64
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	74	1.64
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	20	1.63
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	29	1.63
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	6	1.63
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	11	1.63
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	16	1.63
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	33	1.63
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	42	1.63
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	47	1.63
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	54	1.63
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	64	1.63
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	68	1.63
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	78	1.63
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	35	1.63
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	63	1.63
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG2	78	1.63
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG3	78	1.63
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	59	1.63
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	56	1.63
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	59	1.63
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	80	1.63
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	48	1.63
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	49	1.63
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	32	1.62
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	55	1.62
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	7	1.62
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	12	1.62
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	14	1.62
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	36	1.62
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	44	1.62
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	48	1.62
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	55	1.62
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	27	1.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	33	1.62
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	40	1.62
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	70	1.62
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	73	1.62
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	41	1.62
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG2	75	1.62
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG3	75	1.62
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	25	1.62
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	32	1.62
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	34	1.62
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	52	1.62
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	65	1.62
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	72	1.62
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	37	1.62
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	38	1.62
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	19	1.62
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	3	1.61
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	7	1.61
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	11	1.61
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	22	1.61
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	30	1.61
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	31	1.61
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	83	1.61
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	9	1.61
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	10	1.61
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	17	1.61
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	23	1.61
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	30	1.61
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	62	1.61
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	73	1.61
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	80	1.61
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	34	1.61
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG2	56	1.61
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG3	56	1.61
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	21	1.61
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	35	1.61
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	60	1.61
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	64	1.61
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	68	1.61
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	8	1.61
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	12	1.61
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	15	1.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	21	1.61
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	31	1.61
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	58	1.61
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	69	1.61
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	72	1.61
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	78	1.61
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	36	1.61
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	33	1.6
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	57	1.6
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	59	1.6
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	64	1.6
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	70	1.6
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	72	1.6
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	80	1.6
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	2	1.6
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	5	1.6
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	13	1.6
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	24	1.6
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	26	1.6
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	28	1.6
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	31	1.6
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	85	1.6
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	17	1.6
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	49	1.6
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	60	1.6
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	62	1.6
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	36	1.6
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	43	1.6
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	85	1.6
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	5	1.6
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	27	1.6
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	49	1.6
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	34	1.6
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	47	1.6
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	15	1.59
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	21	1.59
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	49	1.59
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	78	1.59
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	3	1.59
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	39	1.59
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	37	1.59
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	46	1.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	63	1.59
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	80	1.59
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	81	1.59
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	3	1.59
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	11	1.59
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	17	1.59
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	19	1.59
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	41	1.59
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	50	1.59
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	57	1.59
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	66	1.59
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	71	1.59
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	75	1.59
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	85	1.59
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	1	1.59
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	18	1.59
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	24	1.59
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	32	1.59
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	60	1.59
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	71	1.59
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	84	1.59
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	8	1.59
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	37	1.58
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	46	1.58
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	53	1.58
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	63	1.58
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	77	1.58
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	4	1.58
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	8	1.58
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	41	1.58
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	45	1.58
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	81	1.58
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG2	82	1.58
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG3	82	1.58
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	62	1.58
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	62	1.58
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	62	1.58
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	47	1.58
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	48	1.58
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	55	1.58
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	26	1.58
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	30	1.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	35	1.58
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	39	1.58
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	51	1.58
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	53	1.58
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	61	1.58
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	64	1.58
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	70	1.58
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	56	1.58
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	4	1.58
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	5	1.58
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	9	1.58
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	14	1.58
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	19	1.58
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	25	1.58
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	28	1.58
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	52	1.58
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	65	1.58
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	2	1.57
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	43	1.57
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	76	1.57
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	15	1.57
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	56	1.57
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	83	1.57
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	31	1.57
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	39	1.57
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	69	1.57
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	1	1.57
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	10	1.57
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	12	1.57
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	16	1.57
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	22	1.57
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	23	1.57
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	54	1.57
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	83	1.57
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	2	1.57
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	14	1.57
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	16	1.57
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	25	1.57
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	29	1.57
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	40	1.57
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	52	1.57
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	6	1.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	7	1.57
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	10	1.57
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	26	1.57
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	29	1.57
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	61	1.57
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	39	1.57
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	38	1.56
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	41	1.56
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	79	1.56
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	66	1.56
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	23	1.56
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	44	1.56
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	57	1.56
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG2	74	1.56
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG3	74	1.56
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG2	83	1.56
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG3	83	1.56
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	5	1.56
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	7	1.56
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	9	1.56
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	14	1.56
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	17	1.56
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	26	1.56
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	28	1.56
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	33	1.56
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	56	1.56
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	4	1.56
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	6	1.56
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	13	1.56
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	32	1.56
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	34	1.56
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	46	1.56
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	65	1.56
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	67	1.56
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	79	1.56
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	81	1.56
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	38	1.56
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	84	1.56
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	2	1.56
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	12	1.56
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	68	1.56
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	75	1.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	62	1.56
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	19	1.55
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	25	1.55
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	27	1.55
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	34	1.55
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	22	1.55
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	24	1.55
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	37	1.55
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	2	1.55
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	6	1.55
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	11	1.55
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	31	1.55
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	42	1.55
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	44	1.55
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	58	1.55
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	62	1.55
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	73	1.55
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	9	1.55
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	20	1.55
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	44	1.55
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	45	1.55
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	48	1.55
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	55	1.55
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	68	1.55
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	11	1.55
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	45	1.55
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	35	1.55
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	6	1.54
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	17	1.54
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	36	1.54
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	39	1.54
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	42	1.54
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	51	1.54
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	68	1.54
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	58	1.54
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	59	1.54
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	79	1.54
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	3	1.54
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	4	1.54
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	24	1.54
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	30	1.54
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	39	1.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	41	1.54
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	45	1.54
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	66	1.54
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	1	1.54
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	7	1.54
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	10	1.54
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	22	1.54
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	28	1.54
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	36	1.54
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	82	1.54
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	72	1.54
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	78	1.54
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	55	1.54
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	67	1.54
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	85	1.54
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	28	1.53
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	47	1.53
(2,334)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HD1	38	1.53
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	82	1.53
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	8	1.53
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	53	1.53
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	14	1.53
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	59	1.53
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	81	1.53
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	81	1.53
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	81	1.53
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	8	1.53
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	13	1.53
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	15	1.53
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	18	1.53
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	23	1.53
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	33	1.53
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	47	1.53
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	73	1.53
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	74	1.53
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	83	1.53
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	58	1.53
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	42	1.53
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	56	1.53
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	58	1.53
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	74	1.53
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	65	1.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	2	1.52
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	38	1.52
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	72	1.52
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	55	1.52
(1,498)	1:A:39:ASP:HB3	1:A:49:PHE:HD1	38	1.52
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	24	1.52
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	42	1.52
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	43	1.52
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	52	1.52
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	54	1.52
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	60	1.52
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	77	1.52
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	77	1.52
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	12	1.52
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	65	1.52
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	61	1.51
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	46	1.51
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	64	1.51
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	70	1.51
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	38	1.51
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	83	1.51
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	50	1.5
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	38	1.5
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	41	1.5
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	53	1.5
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	63	1.5
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	69	1.5
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	72	1.5
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	78	1.5
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	21	1.5
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	71	1.49
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	15	1.49
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	79	1.49
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	85	1.49
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	17	1.49
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	50	1.49
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	76	1.49
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	18	1.48
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	66	1.48
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	69	1.48
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	56	1.48
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	28	1.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	75	1.48
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	3	1.48
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	22	1.48
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	23	1.48
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	27	1.48
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	33	1.48
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	43	1.48
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	59	1.48
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	36	1.48
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	55	1.48
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	60	1.47
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	82	1.47
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	12	1.47
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	12	1.47
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	12	1.47
(1,460)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:39:ASP:H	63	1.47
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	8	1.47
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	15	1.47
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	20	1.47
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	30	1.47
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	31	1.47
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	35	1.47
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	37	1.47
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	44	1.47
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	54	1.47
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	17	1.47
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	3	1.46
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	30	1.46
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	84	1.46
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	84	1.46
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	84	1.46
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	13	1.46
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	21	1.46
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	40	1.46
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	73	1.46
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	24	1.46
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	37	1.46
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	46	1.45
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	38	1.45
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	16	1.45
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	57	1.45
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	80	1.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	13	1.44
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	41	1.44
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	39	1.44
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	79	1.44
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	66	1.44
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	74	1.43
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	70	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	1	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	2	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	3	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	4	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	5	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	6	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	7	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	8	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	9	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	10	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	11	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	12	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	13	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	14	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	15	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	16	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	17	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	18	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	19	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	20	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	21	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	22	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	23	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	24	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	25	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	26	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	27	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	28	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	29	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	30	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	31	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	32	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	33	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	34	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	35	1.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	36	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	37	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	38	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	39	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	40	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	41	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	42	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	43	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	44	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	45	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	46	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	47	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	48	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	49	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	50	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	51	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	52	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	53	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	54	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	55	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	56	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	57	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	58	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	59	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	60	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	61	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	62	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	63	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	64	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	65	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	66	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	67	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	68	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	69	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	70	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	71	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	72	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	73	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	74	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	75	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	76	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	77	1.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	78	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	79	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	80	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	81	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	82	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	83	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	84	1.43
(1,556)	1:A:43:PRO:HA	1:A:43:PRO:HG2	85	1.43
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	62	1.43
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	15	1.43
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	15	1.43
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	15	1.43
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	84	1.43
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	19	1.43
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	80	1.43
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	34	1.42
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	83	1.42
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	59	1.42
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	59	1.42
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	59	1.42
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	36	1.42
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	38	1.42
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	38	1.42
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	38	1.42
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	39	1.42
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	39	1.42
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	39	1.42
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	44	1.42
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	44	1.42
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	44	1.42
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	54	1.42
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	54	1.42
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	54	1.42
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	57	1.42
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	57	1.42
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	57	1.42
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	64	1.42
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	64	1.42
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	64	1.42
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	76	1.42
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	38	1.42
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	79	1.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,96)	1:A:17:ASP:HA	1:A:53:GLN:HE22	41	1.41
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	5	1.41
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	66	1.41
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	81	1.41
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	3	1.41
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	3	1.41
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	3	1.41
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	20	1.41
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	20	1.41
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	20	1.41
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	31	1.41
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	31	1.41
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	31	1.41
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	40	1.41
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	40	1.41
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	40	1.41
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	47	1.41
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	47	1.41
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	47	1.41
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	73	1.41
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	73	1.41
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	73	1.41
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	48	1.41
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	3	1.41
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	4	1.41
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	12	1.41
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	41	1.41
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	62	1.41
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	71	1.41
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	14	1.4
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	50	1.4
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	21	1.4
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	35	1.4
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	9	1.4
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	10	1.4
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	82	1.4
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	1	1.4
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	1	1.4
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	1	1.4
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	2	1.4
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	2	1.4
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	2	1.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	25	1.4
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	25	1.4
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	25	1.4
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	26	1.4
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	26	1.4
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	26	1.4
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	29	1.4
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	29	1.4
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	29	1.4
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	33	1.4
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	33	1.4
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	33	1.4
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	45	1.4
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	45	1.4
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	45	1.4
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	53	1.4
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	53	1.4
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	53	1.4
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	59	1.4
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	59	1.4
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	59	1.4
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	62	1.4
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	62	1.4
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	62	1.4
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	65	1.4
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	65	1.4
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	65	1.4
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	71	1.4
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	71	1.4
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	71	1.4
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	56	1.4
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	2	1.4
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	5	1.4
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	8	1.4
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	13	1.4
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	17	1.4
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	28	1.4
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	31	1.4
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	39	1.4
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	56	1.4
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	58	1.4
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	61	1.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	66	1.4
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	54	1.39
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	27	1.39
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	48	1.39
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	82	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	4	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	4	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	4	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	5	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	5	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	5	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	6	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	6	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	6	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	14	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	14	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	14	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	19	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	19	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	19	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	21	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	21	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	21	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	22	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	22	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	22	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	23	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	23	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	23	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	24	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	24	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	24	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	27	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	27	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	27	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	30	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	30	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	30	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	35	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	35	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	35	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	37	1.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	37	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	37	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	41	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	41	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	41	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	50	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	50	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	50	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	60	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	60	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	60	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	61	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	61	1.39
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	61	1.39
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	2	1.39
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	11	1.39
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	15	1.39
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	51	1.39
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	64	1.39
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	27	1.38
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	7	1.38
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	7	1.38
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	7	1.38
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	8	1.38
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	8	1.38
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	8	1.38
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	9	1.38
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	9	1.38
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	9	1.38
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	12	1.38
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	12	1.38
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	12	1.38
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	16	1.38
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	16	1.38
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	16	1.38
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	18	1.38
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	18	1.38
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	18	1.38
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	32	1.38
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	32	1.38
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	32	1.38
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	34	1.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	34	1.38
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	34	1.38
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	42	1.38
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	42	1.38
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	42	1.38
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	49	1.38
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	49	1.38
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	49	1.38
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	72	1.38
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	72	1.38
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	72	1.38
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	69	1.38
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	72	1.38
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	84	1.38
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	26	1.37
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	79	1.37
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	79	1.37
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	79	1.37
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	7	1.37
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	49	1.37
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	10	1.37
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	10	1.37
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	10	1.37
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	13	1.37
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	13	1.37
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	13	1.37
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	53	1.37
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	68	1.37
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	25	1.37
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	50	1.37
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	59	1.37
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	60	1.37
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	65	1.37
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	75	1.37
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	77	1.37
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	82	1.37
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	58	1.37
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	39	1.36
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	18	1.36
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	34	1.36
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	11	1.36
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	11	1.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	11	1.36
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	78	1.36
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	18	1.36
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	19	1.36
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	27	1.36
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	32	1.36
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	34	1.36
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	35	1.36
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	49	1.36
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	53	1.36
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	70	1.36
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	76	1.36
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	11	1.36
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG2	46	1.35
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG3	46	1.35
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG2	55	1.35
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG3	55	1.35
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	73	1.35
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	73	1.35
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	73	1.35
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	1	1.35
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	24	1.35
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	34	1.35
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	52	1.35
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	67	1.35
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	78	1.35
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	39	1.34
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	39	1.34
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	39	1.34
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	4	1.34
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	14	1.34
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	47	1.34
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	71	1.34
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	82	1.34
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	82	1.34
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	82	1.34
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	56	1.34
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	20	1.34
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	74	1.34
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	19	1.33
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	11	1.33
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	26	1.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	67	1.33
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	67	1.33
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	67	1.33
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	23	1.33
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	45	1.33
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	61	1.33
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	41	1.33
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	69	1.32
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	69	1.32
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	69	1.32
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	4	1.32
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	4	1.32
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	4	1.32
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	6	1.32
(1,302)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HB3	83	1.32
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	17	1.32
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	17	1.32
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	17	1.32
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	22	1.32
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	13	1.32
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	66	1.32
(2,16)	1:A:5:GLY:H	1:A:6:LEU:HB2	74	1.31
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	38	1.31
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	38	1.31
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	38	1.31
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	66	1.31
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	66	1.31
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	66	1.31
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	29	1.31
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	60	1.31
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	79	1.31
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	79	1.31
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	79	1.31
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	29	1.31
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	40	1.31
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	57	1.31
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	15	1.31
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	17	1.31
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	31	1.31
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	38	1.31
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	56	1.31
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	80	1.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	76	1.3
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	76	1.3
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	76	1.3
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	3	1.3
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	3	1.3
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	3	1.3
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	31	1.3
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	31	1.3
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	31	1.3
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	62	1.3
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	32	1.3
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	50	1.3
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	5	1.3
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	8	1.3
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	12	1.3
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	28	1.3
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	39	1.3
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	43	1.29
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	43	1.29
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	43	1.29
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	46	1.29
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	46	1.29
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	46	1.29
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	51	1.29
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	51	1.29
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	51	1.29
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	82	1.29
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	82	1.29
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	82	1.29
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	44	1.29
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	53	1.29
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	53	1.29
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	53	1.29
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	80	1.29
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	80	1.29
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	80	1.29
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	12	1.29
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	85	1.29
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	85	1.29
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	85	1.29
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	1	1.29
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	9	1.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	30	1.29
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	21	1.29
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	36	1.29
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	85	1.29
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	3	1.29
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	4	1.29
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	11	1.29
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	70	1.28
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	70	1.28
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	70	1.28
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	83	1.28
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	83	1.28
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	83	1.28
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	84	1.28
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	84	1.28
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	84	1.28
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	5	1.28
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	5	1.28
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	5	1.28
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	19	1.28
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	65	1.28
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	46	1.28
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	46	1.28
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	46	1.28
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	51	1.28
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	51	1.28
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	51	1.28
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	74	1.28
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	74	1.28
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	74	1.28
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	81	1.28
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	23	1.28
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	37	1.28
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	46	1.28
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	63	1.28
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	68	1.28
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	2	1.28
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	11	1.27
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	36	1.27
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	36	1.27
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	36	1.27
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	52	1.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	52	1.27
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	52	1.27
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	55	1.27
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	55	1.27
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	55	1.27
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	67	1.27
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	67	1.27
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	67	1.27
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	68	1.27
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	68	1.27
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	68	1.27
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	80	1.27
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	80	1.27
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	80	1.27
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	11	1.27
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	11	1.27
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	11	1.27
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	76	1.27
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	84	1.27
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	66	1.27
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	66	1.27
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	66	1.27
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	69	1.27
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	69	1.27
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	69	1.27
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	70	1.27
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	70	1.27
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	70	1.27
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	75	1.27
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	75	1.27
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	75	1.27
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	77	1.27
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	77	1.27
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	77	1.27
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	81	1.27
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	81	1.27
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	81	1.27
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	43	1.27
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	58	1.27
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	28	1.26
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	28	1.26
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	28	1.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	77	1.26
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	77	1.26
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	77	1.26
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	56	1.26
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	56	1.26
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	56	1.26
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	67	1.26
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	67	1.26
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	67	1.26
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	11	1.26
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	12	1.26
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	27	1.26
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	31	1.26
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	49	1.26
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	59	1.26
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	52	1.26
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	52	1.26
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	52	1.26
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	55	1.26
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	55	1.26
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	55	1.26
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	56	1.26
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	56	1.26
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	56	1.26
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	63	1.26
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	63	1.26
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	63	1.26
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	78	1.26
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	78	1.26
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	78	1.26
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	83	1.26
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	83	1.26
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	83	1.26
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	42	1.26
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	72	1.26
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	10	1.26
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	55	1.26
(2,96)	1:A:17:ASP:HA	1:A:53:GLN:HE22	14	1.25
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	71	1.25
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	17	1.25
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	17	1.25
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	17	1.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	48	1.25
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	48	1.25
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	48	1.25
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	75	1.25
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	75	1.25
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	75	1.25
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	85	1.25
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	85	1.25
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	85	1.25
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	64	1.25
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG2	63	1.25
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG3	63	1.25
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	5	1.25
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	19	1.25
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	72	1.25
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	58	1.25
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	58	1.25
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	58	1.25
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	58	1.25
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	64	1.25
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	26	1.25
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	47	1.25
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	48	1.25
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	52	1.25
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	24	1.25
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	81	1.25
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	2	1.25
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	8	1.25
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	58	1.24
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	74	1.24
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	74	1.24
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	74	1.24
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	8	1.24
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	21	1.24
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	35	1.24
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	37	1.24
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	41	1.24
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	77	1.24
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	82	1.24
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	80	1.24
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	80	1.24
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	80	1.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	73	1.24
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	41	1.24
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	1	1.24
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	6	1.24
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	7	1.24
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	22	1.24
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	24	1.24
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	33	1.24
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	54	1.24
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	81	1.24
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	25	1.24
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	3	1.24
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	4	1.24
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	12	1.24
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	13	1.24
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	39	1.24
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	63	1.23
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	63	1.23
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	63	1.23
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	66	1.23
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	66	1.23
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	66	1.23
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	53	1.23
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	80	1.23
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	2	1.23
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	2	1.23
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	2	1.23
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	37	1.23
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	37	1.23
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	37	1.23
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	25	1.23
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	51	1.23
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	17	1.23
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	46	1.23
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	45	1.23
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	28	1.23
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	28	1.23
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	28	1.23
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	76	1.23
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	76	1.23
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	76	1.23
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	84	1.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	84	1.23
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	84	1.23
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	47	1.23
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	9	1.23
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	14	1.23
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	30	1.23
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	44	1.23
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	9	1.23
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	10	1.23
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	20	1.23
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	15	1.23
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	56	1.22
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	56	1.22
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	56	1.22
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	78	1.22
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	78	1.22
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	78	1.22
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	17	1.22
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	17	1.22
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	17	1.22
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	2	1.22
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	3	1.22
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	32	1.22
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	38	1.22
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	53	1.22
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	84	1.22
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	25	1.22
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	46	1.22
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	70	1.22
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	36	1.22
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	36	1.22
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	36	1.22
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	49	1.22
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	35	1.22
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	16	1.22
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	26	1.22
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	42	1.22
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	45	1.22
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	21	1.22
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	27	1.22
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	32	1.22
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	72	1.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	79	1.22
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	5	1.22
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	17	1.22
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	31	1.22
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	38	1.22
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	27	1.21
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	27	1.21
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	27	1.21
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	35	1.21
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	35	1.21
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	35	1.21
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	53	1.21
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	53	1.21
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	53	1.21
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	64	1.21
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	64	1.21
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	64	1.21
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	79	1.21
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	4	1.21
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	17	1.21
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	34	1.21
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	61	1.21
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	64	1.21
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	69	1.21
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	71	1.21
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	55	1.21
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	48	1.21
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	48	1.21
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	48	1.21
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	46	1.21
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	6	1.21
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	7	1.21
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	16	1.21
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	26	1.21
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	45	1.21
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	46	1.21
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	51	1.21
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	55	1.21
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	60	1.21
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	64	1.21
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	65	1.21
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	69	1.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	70	1.21
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	73	1.21
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	82	1.21
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	84	1.21
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	28	1.21
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	41	1.21
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	56	1.21
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	80	1.21
(2,96)	1:A:17:ASP:HA	1:A:53:GLN:HE22	15	1.2
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	58	1.2
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	58	1.2
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	58	1.2
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	62	1.2
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	62	1.2
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	62	1.2
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	3	1.2
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	38	1.2
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	62	1.2
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	41	1.2
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	41	1.2
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	41	1.2
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	79	1.2
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	79	1.2
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	79	1.2
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	39	1.2
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	50	1.2
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	56	1.2
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	65	1.2
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	67	1.2
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	43	1.2
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	43	1.2
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	43	1.2
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	5	1.2
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	23	1.2
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	73	1.2
(1,207)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HB3	83	1.2
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	14	1.2
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	19	1.2
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	29	1.2
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	30	1.2
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	34	1.2
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	35	1.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	36	1.2
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	48	1.2
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	52	1.2
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	54	1.2
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	68	1.2
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	71	1.2
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	66	1.2
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	21	1.19
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	21	1.19
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	21	1.19
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	32	1.19
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	32	1.19
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	32	1.19
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	40	1.19
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	40	1.19
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	40	1.19
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	50	1.19
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	50	1.19
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	50	1.19
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	81	1.19
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	81	1.19
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	81	1.19
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	66	1.19
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	4	1.19
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	5	1.19
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	12	1.19
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	13	1.19
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	17	1.19
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	28	1.19
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	31	1.19
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	39	1.19
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	41	1.19
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	56	1.19
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	61	1.19
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	71	1.19
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	24	1.19
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	24	1.19
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	24	1.19
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	15	1.19
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	28	1.19
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	70	1.19
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	16	1.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	37	1.19
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	2	1.19
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	63	1.19
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	30	1.19
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	38	1.19
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	22	1.19
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	33	1.19
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	40	1.19
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	44	1.19
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	53	1.19
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	59	1.19
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	77	1.19
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	47	1.19
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	8	1.18
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	8	1.18
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	8	1.18
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	13	1.18
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	13	1.18
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	13	1.18
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	18	1.18
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	18	1.18
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	18	1.18
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	19	1.18
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	19	1.18
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	19	1.18
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	20	1.18
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	20	1.18
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	20	1.18
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	37	1.18
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	37	1.18
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	37	1.18
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	2	1.18
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	8	1.18
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	66	1.18
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	21	1.18
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	21	1.18
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	21	1.18
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	13	1.18
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	57	1.18
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	25	1.18
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG21	68	1.18
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG22	68	1.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,292)	1:A:24:PRO:HD3	1:A:26:VAL:HG23	68	1.18
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	18	1.18
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	75	1.18
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	77	1.18
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	8	1.18
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	39	1.18
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	1	1.18
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	43	1.18
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	47	1.18
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	49	1.18
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	57	1.18
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	74	1.18
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	78	1.18
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	33	1.18
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	45	1.18
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	11	1.17
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	4	1.17
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	4	1.17
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	4	1.17
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	5	1.17
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	5	1.17
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	5	1.17
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	12	1.17
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	12	1.17
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	12	1.17
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	22	1.17
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	22	1.17
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	22	1.17
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	23	1.17
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	23	1.17
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	23	1.17
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	41	1.17
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	41	1.17
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	41	1.17
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	57	1.17
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	57	1.17
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	57	1.17
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	61	1.17
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	61	1.17
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	61	1.17
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	48	1.17
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	49	1.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	15	1.17
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	84	1.17
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	15	1.17
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	15	1.17
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	15	1.17
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	14	1.17
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	16	1.17
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	20	1.17
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	29	1.17
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	40	1.17
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	58	1.17
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	42	1.17
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	15	1.17
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	80	1.17
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	13	1.17
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	76	1.17
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	43	1.17
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	44	1.17
(2,96)	1:A:17:ASP:HA	1:A:53:GLN:HE22	59	1.16
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	3	1.16
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	3	1.16
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	3	1.16
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	44	1.16
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	44	1.16
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	44	1.16
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	11	1.16
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	51	1.16
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	64	1.16
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	69	1.16
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	6	1.16
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	9	1.16
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	18	1.16
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	26	1.16
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	30	1.16
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	36	1.16
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	75	1.16
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	80	1.16
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	10	1.16
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	67	1.16
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	51	1.16
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	62	1.16
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	2	1.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	3	1.16
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	4	1.16
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	5	1.16
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	12	1.16
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	18	1.16
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	67	1.16
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	1	1.16
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	6	1.16
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	30	1.16
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	57	1.16
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	82	1.16
(2,96)	1:A:17:ASP:HA	1:A:53:GLN:HE22	38	1.15
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	2	1.15
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	2	1.15
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	2	1.15
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	15	1.15
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	15	1.15
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	15	1.15
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	16	1.15
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	16	1.15
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	16	1.15
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	25	1.15
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	25	1.15
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	25	1.15
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	26	1.15
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	26	1.15
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	26	1.15
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	29	1.15
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	29	1.15
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	29	1.15
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	34	1.15
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	34	1.15
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	34	1.15
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	39	1.15
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	39	1.15
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	39	1.15
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	59	1.15
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	59	1.15
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	59	1.15
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	71	1.15
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	71	1.15
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	71	1.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG2	70	1.15
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG3	70	1.15
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	58	1.15
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	65	1.15
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	75	1.15
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	77	1.15
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	57	1.15
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	57	1.15
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	57	1.15
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	68	1.15
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	68	1.15
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	68	1.15
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	1	1.15
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	7	1.15
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	10	1.15
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	22	1.15
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	44	1.15
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	46	1.15
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	55	1.15
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	78	1.15
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	79	1.15
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	79	1.15
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	17	1.15
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	55	1.15
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	17	1.15
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	28	1.15
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	80	1.15
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	14	1.15
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	18	1.15
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	20	1.15
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	21	1.15
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	22	1.15
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	29	1.15
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	36	1.15
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	40	1.15
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	46	1.15
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	59	1.15
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	67	1.15
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	1	1.14
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	1	1.14
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	1	1.14
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	6	1.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	6	1.14
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	6	1.14
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	9	1.14
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	9	1.14
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	9	1.14
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	11	1.14
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	11	1.14
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	11	1.14
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	14	1.14
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	14	1.14
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	14	1.14
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	42	1.14
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	42	1.14
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	42	1.14
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	19	1.14
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	25	1.14
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	49	1.14
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	50	1.14
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	53	1.14
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	59	1.14
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	60	1.14
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	70	1.14
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	72	1.14
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	76	1.14
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	10	1.14
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	10	1.14
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	10	1.14
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	27	1.14
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	27	1.14
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	27	1.14
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	50	1.14
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	50	1.14
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	50	1.14
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	69	1.14
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	69	1.14
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	69	1.14
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	15	1.14
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	41	1.14
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	62	1.14
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	9	1.14
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	19	1.14
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	24	1.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	26	1.14
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	27	1.14
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	32	1.14
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	34	1.14
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	35	1.14
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	49	1.14
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	54	1.14
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	55	1.14
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	60	1.14
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	64	1.14
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	68	1.14
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	71	1.14
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	72	1.14
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	81	1.14
(2,96)	1:A:17:ASP:HA	1:A:53:GLN:HE22	37	1.13
(2,96)	1:A:17:ASP:HA	1:A:53:GLN:HE22	46	1.13
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	21	1.13
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	83	1.13
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	85	1.13
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	7	1.13
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	7	1.13
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	7	1.13
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	30	1.13
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	30	1.13
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	30	1.13
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG2	67	1.13
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG3	67	1.13
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	18	1.13
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	27	1.13
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	32	1.13
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	34	1.13
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	35	1.13
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	67	1.13
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	48	1.13
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	66	1.13
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	85	1.13
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	40	1.13
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	10	1.13
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	60	1.13
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	56	1.13
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	66	1.13
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	7	1.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	10	1.13
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	16	1.13
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	48	1.13
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	52	1.13
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	69	1.13
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	73	1.13
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	74	1.13
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	76	1.13
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	20	1.12
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	24	1.12
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	81	1.12
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	73	1.12
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	73	1.12
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	73	1.12
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	74	1.12
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	78	1.12
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	82	1.12
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	8	1.12
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	8	1.12
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	8	1.12
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	51	1.12
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	51	1.12
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	51	1.12
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	58	1.12
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	58	1.12
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	58	1.12
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	23	1.12
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	24	1.12
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	60	1.12
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	68	1.12
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	82	1.12
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	53	1.12
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	67	1.12
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	80	1.12
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	31	1.12
(2,96)	1:A:17:ASP:HA	1:A:53:GLN:HE22	77	1.11
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	23	1.11
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	37	1.11
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	24	1.11
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	24	1.11
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	24	1.11
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	31	1.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	31	1.11
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	31	1.11
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	49	1.11
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	49	1.11
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	49	1.11
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	65	1.11
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	65	1.11
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	65	1.11
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	43	1.11
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	45	1.11
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	54	1.11
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	74	1.11
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	61	1.11
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	85	1.11
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	18	1.11
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	53	1.11
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	12	1.1
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	15	1.1
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	42	1.1
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	57	1.1
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	62	1.1
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	24	1.1
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	84	1.1
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	10	1.1
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	10	1.1
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	10	1.1
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	38	1.1
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	38	1.1
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	38	1.1
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	54	1.1
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	54	1.1
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	54	1.1
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	60	1.1
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	60	1.1
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	60	1.1
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	30	1.1
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	30	1.1
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	30	1.1
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	40	1.1
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	40	1.1
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	40	1.1
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	33	1.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	47	1.1
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	11	1.1
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	25	1.1
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	78	1.1
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	4	1.09
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	10	1.09
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	29	1.09
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	40	1.09
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	63	1.09
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	72	1.09
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	72	1.09
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	72	1.09
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	71	1.09
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	71	1.09
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	71	1.09
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	42	1.09
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	58	1.09
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	51	1.09
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	65	1.09
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	84	1.09
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	2	1.08
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	5	1.08
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	9	1.08
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	31	1.08
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	36	1.08
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	39	1.08
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	45	1.08
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	45	1.08
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	45	1.08
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	47	1.08
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	47	1.08
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	47	1.08
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	65	1.08
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	65	1.08
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	65	1.08
(2,16)	1:A:5:GLY:H	1:A:6:LEU:HB2	1	1.08
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	19	1.08
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	19	1.08
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	19	1.08
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	28	1.08
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	28	1.08
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	28	1.08

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	73	1.08
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	49	1.08
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	74	1.08
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	33	1.08
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	76	1.08
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	77	1.08
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	1	1.07
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	3	1.07
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	8	1.07
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	13	1.07
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	28	1.07
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	33	1.07
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	38	1.07
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	41	1.07
(2,191)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:TRP:HD1	33	1.07
(2,191)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:TRP:HD1	33	1.07
(2,191)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:47:TRP:HD1	33	1.07
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	20	1.07
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	48	1.07
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	48	1.07
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	48	1.07
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	52	1.07
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	81	1.07
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	58	1.07
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	79	1.07
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	53	1.07
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	77	1.07
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	78	1.07
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	79	1.07
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	22	1.06
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	43	1.06
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	47	1.06
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	54	1.06
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	68	1.06
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	16	1.06
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	16	1.06
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	16	1.06
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	62	1.06
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	75	1.06
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	52	1.06
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	7	1.05
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	17	1.05

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	44	1.05
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	45	1.05
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	56	1.05
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	80	1.05
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	57	1.05
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	13	1.05
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	13	1.05
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	13	1.05
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	70	1.05
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	70	1.05
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	70	1.05
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	79	1.05
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	76	1.05
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	18	1.05
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	51	1.05
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	40	1.05
(2,96)	1:A:17:ASP:HA	1:A:53:GLN:HE22	85	1.04
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	6	1.04
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	14	1.04
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	30	1.04
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	46	1.04
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	48	1.04
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	52	1.04
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	66	1.04
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	80	1.04
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	2	1.04
(2,16)	1:A:5:GLY:H	1:A:6:LEU:HB2	44	1.04
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	29	1.04
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	40	1.04
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	9	1.04
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	9	1.04
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	9	1.04
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	46	1.04
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	46	1.04
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	46	1.04
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	49	1.04
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	49	1.04
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	49	1.04
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	55	1.04
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	55	1.04
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	55	1.04
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	76	1.04

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	20	1.04
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	61	1.04
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	64	1.04
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	71	1.04
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	74	1.04
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	4	1.04
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	12	1.04
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	22	1.04
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	70	1.04
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	16	1.03
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	26	1.03
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	73	1.03
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	6	1.03
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	6	1.03
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	6	1.03
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	52	1.03
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	52	1.03
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	52	1.03
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	78	1.03
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	78	1.03
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	78	1.03
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	83	1.03
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	83	1.03
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	83	1.03
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	75	1.03
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	63	1.03
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	21	1.03
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	31	1.03
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	37	1.03
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	9	1.03
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	52	1.03
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	64	1.03
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	60	1.03
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	77	1.03
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	84	1.03
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	31	1.03
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	55	1.03
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	55	1.02
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	38	1.02
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	10	1.02
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	60	1.02
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	54	1.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	21	1.02
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	1	1.02
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	1	1.02
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	1	1.02
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	20	1.02
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	20	1.02
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	20	1.02
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	50	1.02
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	53	1.02
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	74	1.02
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	84	1.02
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	59	1.02
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	80	1.02
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	5	1.02
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	8	1.02
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	9	1.02
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	11	1.02
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	13	1.02
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	15	1.02
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	25	1.02
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	26	1.02
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	29	1.02
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	61	1.02
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	73	1.02
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	77	1.02
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	83	1.02
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	58	1.02
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	25	1.02
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	27	1.02
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	32	1.02
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	34	1.02
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	50	1.02
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	69	1.02
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	70	1.02
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	82	1.02
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	42	1.02
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	46	1.02
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	82	1.01
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	66	1.01
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	22	1.01
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	36	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	1	1.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	2	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	3	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	4	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	5	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	6	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	7	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	8	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	9	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	10	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	11	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	12	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	13	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	14	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	15	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	16	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	17	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	18	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	19	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	20	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	21	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	22	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	23	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	24	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	25	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	26	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	27	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	28	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	29	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	30	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	31	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	32	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	33	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	34	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	35	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	36	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	37	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	38	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	39	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	40	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	41	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	42	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	43	1.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	44	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	45	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	46	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	47	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	48	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	49	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	50	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	51	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	52	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	53	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	54	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	55	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	56	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	57	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	58	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	59	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	60	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	61	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	62	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	63	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	64	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	65	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	66	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	67	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	68	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	69	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	70	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	71	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	72	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	73	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	74	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	75	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	76	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	77	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	78	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	79	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	80	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	81	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	82	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	83	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	84	1.01
(1,655)	1:A:49:PHE:HD1	1:A:49:PHE:HD2	85	1.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	60	1.01
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	61	1.01
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	63	1.01
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	71	1.01
(1,461)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:48:CYS:HA	83	1.01
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	11	1.01
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	15	1.01
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	27	1.01
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	30	1.01
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	77	1.01
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	84	1.01
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	1	1.01
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	2	1.01
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	7	1.01
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	10	1.01
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	12	1.01
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	16	1.01
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	18	1.01
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	19	1.01
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	20	1.01
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	21	1.01
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	28	1.01
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	30	1.01
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	32	1.01
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	34	1.01
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	35	1.01
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	41	1.01
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	42	1.01
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	48	1.01
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	49	1.01
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	52	1.01
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	57	1.01
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	71	1.01
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	74	1.01
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	75	1.01
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	80	1.01
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	85	1.01
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	16	1.01
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	29	1.01
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	29	1.01
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	65	1.01
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	67	1.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	73	1.01
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	37	1.0
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	68	1.0
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	85	1.0
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	35	1.0
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	35	1.0
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	35	1.0
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	82	1.0
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	82	1.0
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	82	1.0
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	67	1.0
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	69	1.0
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	77	1.0
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	82	1.0
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	5	1.0
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	8	1.0
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	12	1.0
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	26	1.0
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	35	1.0
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	49	1.0
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	51	1.0
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	85	1.0
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	3	1.0
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	4	1.0
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	6	1.0
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	14	1.0
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	22	1.0
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	23	1.0
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	24	1.0
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	27	1.0
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	31	1.0
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	33	1.0
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	36	1.0
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	37	1.0
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	39	1.0
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	40	1.0
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	44	1.0
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	45	1.0
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	47	1.0
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	50	1.0
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	53	1.0
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	59	1.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	62	1.0
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	65	1.0
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	68	1.0
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	76	1.0
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	79	1.0
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	81	1.0
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	82	1.0
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	84	1.0
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	24	1.0
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	36	1.0
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	59	1.0
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	78	1.0
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	85	1.0
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	13	1.0
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	56	0.99
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	1	0.99
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	9	0.99
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	43	0.99
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	46	0.99
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	63	0.99
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	18	0.99
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	18	0.99
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	18	0.99
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	25	0.99
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	25	0.99
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	25	0.99
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	47	0.99
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	47	0.99
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	47	0.99
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	51	0.99
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	3	0.99
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	16	0.99
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	19	0.99
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	41	0.99
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	56	0.99
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	57	0.99
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	61	0.99
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	72	0.99
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	64	0.99
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	17	0.99
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	43	0.99
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	54	0.99

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	56	0.99
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	58	0.99
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	60	0.99
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	10	0.99
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	18	0.99
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	35	0.99
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	40	0.99
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	43	0.99
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	57	0.99
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	72	0.99
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	54	0.99
(2,96)	1:A:17:ASP:HA	1:A:53:GLN:HE22	82	0.98
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	31	0.98
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	80	0.98
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	23	0.98
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	29	0.98
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	29	0.98
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	29	0.98
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	32	0.98
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	32	0.98
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	32	0.98
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	60	0.98
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	60	0.98
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	60	0.98
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	61	0.98
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	61	0.98
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	61	0.98
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	72	0.98
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	2	0.98
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	13	0.98
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	17	0.98
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	25	0.98
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	29	0.98
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	38	0.98
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	50	0.98
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	69	0.98
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	71	0.98
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	5	0.98
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	7	0.98
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	26	0.98
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	51	0.98
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	55	0.98

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	63	0.98
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	66	0.98
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	67	0.98
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	69	0.98
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	70	0.98
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	72	0.98
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	78	0.98
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	70	0.98
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	9	0.98
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	19	0.98
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	49	0.98
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	52	0.98
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	76	0.98
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	81	0.98
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	6	0.98
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	25	0.97
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	30	0.97
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	10	0.97
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	52	0.97
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	55	0.97
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	33	0.97
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	33	0.97
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	33	0.97
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	34	0.97
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	34	0.97
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	34	0.97
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	45	0.97
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	45	0.97
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	45	0.97
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	70	0.97
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	78	0.97
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	85	0.97
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	4	0.97
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	9	0.97
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	14	0.97
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	22	0.97
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	39	0.97
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	40	0.97
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	44	0.97
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	53	0.97
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	58	0.97
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	85	0.97

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	38	0.97
(1,345)	1:A:28:PRO:HD3	1:A:29:LYS:HA	46	0.97
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	46	0.97
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	53	0.97
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	54	0.97
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	63	0.97
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	51	0.96
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	62	0.96
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	23	0.96
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	4	0.96
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	47	0.96
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	48	0.96
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	7	0.96
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	7	0.96
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	7	0.96
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	23	0.96
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	23	0.96
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	23	0.96
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	6	0.96
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	7	0.96
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	20	0.96
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	32	0.96
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	45	0.96
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	51	0.96
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	64	0.96
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	65	0.96
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	66	0.96
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	70	0.96
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	73	0.96
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	78	0.96
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	81	0.96
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	63	0.96
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	1	0.96
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	7	0.96
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	22	0.96
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	23	0.96
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	42	0.96
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	45	0.96
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	27	0.95
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	37	0.95
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	41	0.95
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	50	0.95

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	64	0.95
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	84	0.95
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	1	0.95
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	26	0.95
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	26	0.95
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	26	0.95
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	18	0.95
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	19	0.95
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	1	0.95
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	10	0.95
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	23	0.95
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	33	0.95
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	68	0.95
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	6	0.95
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	14	0.95
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	21	0.95
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	33	0.95
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	44	0.95
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	47	0.95
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	48	0.95
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	55	0.95
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	73	0.95
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	83	0.95
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	35	0.94
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	79	0.94
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	20	0.94
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	32	0.94
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	7	0.94
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	22	0.94
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	24	0.94
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	54	0.94
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	81	0.94
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	38	0.94
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	34	0.94
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	52	0.94
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	42	0.94
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	46	0.94
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	48	0.94
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	55	0.94
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	75	0.94
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	79	0.94
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	83	0.94

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	16	0.94
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	26	0.94
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	68	0.94
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	59	0.93
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	6	0.93
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	9	0.93
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	14	0.93
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	33	0.93
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	44	0.93
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	14	0.93
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	14	0.93
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	14	0.93
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	44	0.93
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	44	0.93
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	44	0.93
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	76	0.93
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	76	0.93
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	76	0.93
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	80	0.93
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	65	0.93
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	24	0.93
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	28	0.93
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	34	0.93
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	36	0.93
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	47	0.93
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	54	0.93
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	67	0.93
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	82	0.93
(1,361)	1:A:29:LYS:HD2	1:A:30:GLU:HA	84	0.93
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	12	0.93
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	76	0.93
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	28	0.93
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	37	0.93
(2,188)	1:A:26:VAL:HB	1:A:38:PHE:HE1	82	0.92
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	16	0.92
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	30	0.92
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	45	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	1	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	2	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	3	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	4	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	5	0.92

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	6	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	7	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	8	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	9	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	10	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	11	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	12	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	13	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	14	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	15	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	16	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	17	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	18	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	19	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	20	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	21	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	22	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	23	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	24	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	25	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	26	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	27	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	29	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	30	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	31	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	32	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	33	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	34	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	35	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	36	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	37	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	38	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	39	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	40	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	41	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	42	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	43	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	44	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	45	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	46	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	47	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	48	0.92

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	49	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	50	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	51	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	52	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	53	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	54	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	55	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	56	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	57	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	58	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	59	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	60	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	61	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	62	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	63	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	64	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	65	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	67	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	69	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	70	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	71	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	72	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	73	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	74	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	75	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	76	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	77	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	78	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	79	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	80	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	81	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	82	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	83	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	84	0.92
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	85	0.92
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	36	0.92
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	36	0.92
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	36	0.92
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	64	0.92
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	64	0.92
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	64	0.92
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	20	0.92

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	37	0.92
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	57	0.92
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	18	0.92
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	74	0.92
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	18	0.92
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	66	0.92
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	75	0.92
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	29	0.92
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	72	0.92
(1,208)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HD1	30	0.92
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	84	0.91
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	69	0.91
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	78	0.91
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	18	0.91
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG2	79	0.91
(2,173)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:30:GLU:HG3	79	0.91
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	26	0.91
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	28	0.91
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	66	0.91
(1,657)	1:A:49:PHE:HZ	1:A:49:PHE:HD2	68	0.91
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	22	0.91
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	22	0.91
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	22	0.91
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	74	0.91
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	74	0.91
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	74	0.91
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	75	0.91
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	75	0.91
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	75	0.91
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	68	0.91
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	35	0.91
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	40	0.91
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	49	0.91
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	43	0.91
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	52	0.91
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	60	0.91
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	15	0.91
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	31	0.91
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	40	0.91
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	16	0.91
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	55	0.9
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	76	0.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	82	0.9
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	42	0.9
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	54	0.9
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	54	0.9
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	54	0.9
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	4	0.9
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	29	0.9
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	59	0.9
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	80	0.9
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	1	0.9
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	15	0.89
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	71	0.89
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	65	0.89
(2,16)	1:A:5:GLY:H	1:A:6:LEU:HB2	11	0.89
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	73	0.89
(2,107)	1:A:18:ARG:HG2	1:A:49:PHE:HA	83	0.89
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	56	0.89
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	64	0.89
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	68	0.89
(1,361)	1:A:29:LYS:HD2	1:A:30:GLU:HA	46	0.89
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	28	0.89
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	28	0.89
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	14	0.88
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	17	0.88
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	21	0.88
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	29	0.88
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	61	0.88
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	70	0.88
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	31	0.88
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	51	0.88
(2,111)	1:A:18:ARG:HG3	1:A:49:PHE:HZ	73	0.88
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	43	0.88
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	43	0.88
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	43	0.88
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	39	0.88
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	84	0.88
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	85	0.88
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	21	0.88
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	25	0.88
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	43	0.88
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	48	0.88
(1,459)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:HA	63	0.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	43	0.88
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	55	0.88
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	5	0.87
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	12	0.87
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	13	0.87
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	16	0.87
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	18	0.87
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	19	0.87
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	34	0.87
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	40	0.87
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	46	0.87
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	48	0.87
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	57	0.87
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	58	0.87
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	67	0.87
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	68	0.87
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	83	0.87
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	3	0.87
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	45	0.87
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	58	0.87
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	3	0.86
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	6	0.86
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	11	0.86
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	25	0.86
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	39	0.86
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	44	0.86
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	60	0.86
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	72	0.86
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	75	0.86
(2,111)	1:A:18:ARG:HG3	1:A:49:PHE:HZ	26	0.86
(2,111)	1:A:18:ARG:HG3	1:A:49:PHE:HZ	42	0.86
(2,111)	1:A:18:ARG:HG3	1:A:49:PHE:HZ	83	0.86
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	8	0.86
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	12	0.86
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	23	0.86
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	25	0.86
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	65	0.86
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	27	0.86
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	55	0.86
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	57	0.86
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	85	0.86
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	8	0.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	30	0.85
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	49	0.85
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	52	0.85
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	53	0.85
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	77	0.85
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	10	0.85
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	11	0.85
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	20	0.85
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	31	0.85
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	43	0.85
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	63	0.85
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	66	0.85
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	69	0.85
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	82	0.85
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	36	0.85
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	50	0.85
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	60	0.85
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	20	0.84
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	26	0.84
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	28	0.84
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	63	0.84
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	65	0.84
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	73	0.84
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	7	0.84
(2,111)	1:A:18:ARG:HG3	1:A:49:PHE:HZ	16	0.84
(2,111)	1:A:18:ARG:HG3	1:A:49:PHE:HZ	33	0.84
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	2	0.84
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	15	0.84
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	17	0.84
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	28	0.84
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	29	0.84
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	40	0.84
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	42	0.84
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	52	0.84
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	57	0.84
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	62	0.84
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	75	0.84
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	76	0.84
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	56	0.84
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	75	0.83
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	76	0.83
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	2	0.83

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	73	0.83
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	45	0.83
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	64	0.83
(2,111)	1:A:18:ARG:HG3	1:A:49:PHE:HZ	6	0.83
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	39	0.83
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	63	0.83
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	63	0.83
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	63	0.83
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	24	0.83
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	26	0.83
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	36	0.83
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	41	0.83
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	44	0.83
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	46	0.83
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	51	0.83
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	64	0.83
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	71	0.83
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	73	0.83
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	74	0.83
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	79	0.83
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	32	0.83
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	42	0.83
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	46	0.83
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	83	0.83
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	14	0.83
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	32	0.83
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	75	0.83
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	65	0.82
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	4	0.82
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	32	0.82
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	36	0.82
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	81	0.82
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	74	0.82
(2,111)	1:A:18:ARG:HG3	1:A:49:PHE:HZ	9	0.82
(2,111)	1:A:18:ARG:HG3	1:A:49:PHE:HZ	14	0.82
(2,111)	1:A:18:ARG:HG3	1:A:49:PHE:HZ	24	0.82
(2,111)	1:A:18:ARG:HG3	1:A:49:PHE:HZ	30	0.82
(2,111)	1:A:18:ARG:HG3	1:A:49:PHE:HZ	44	0.82
(2,111)	1:A:18:ARG:HG3	1:A:49:PHE:HZ	45	0.82
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	5	0.82
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	9	0.82
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	13	0.82

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	27	0.82
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	30	0.82
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	32	0.82
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	33	0.82
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	55	0.82
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	59	0.82
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	72	0.82
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	80	0.82
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	49	0.82
(2,96)	1:A:17:ASP:HA	1:A:53:GLN:HE22	45	0.81
(2,96)	1:A:17:ASP:HA	1:A:53:GLN:HE22	62	0.81
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	50	0.81
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	69	0.81
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	70	0.81
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	77	0.81
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	23	0.81
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	43	0.81
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	47	0.81
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	72	0.81
(2,16)	1:A:5:GLY:H	1:A:6:LEU:HB2	63	0.81
(2,111)	1:A:18:ARG:HG3	1:A:49:PHE:HZ	7	0.81
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	85	0.81
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	85	0.81
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	85	0.81
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	1	0.81
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	6	0.81
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	7	0.81
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	14	0.81
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	47	0.81
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	48	0.81
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	49	0.81
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	67	0.81
(1,361)	1:A:29:LYS:HD2	1:A:30:GLU:HA	17	0.81
(1,361)	1:A:29:LYS:HD2	1:A:30:GLU:HA	25	0.81
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	46	0.81
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	53	0.81
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	61	0.8
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	72	0.8
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	1	0.8
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	42	0.8
(2,16)	1:A:5:GLY:H	1:A:6:LEU:HB2	48	0.8
(2,111)	1:A:18:ARG:HG3	1:A:49:PHE:HZ	23	0.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,111)	1:A:18:ARG:HG3	1:A:49:PHE:HZ	54	0.8
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	16	0.8
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	18	0.8
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	21	0.8
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	22	0.8
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	34	0.8
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	35	0.8
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	50	0.8
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	53	0.8
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	61	0.8
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	78	0.8
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	23	0.8
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	81	0.8
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	21	0.8
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	44	0.8
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	32	0.8
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	37	0.8
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	22	0.79
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	24	0.79
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	33	0.79
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	74	0.79
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	85	0.79
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	71	0.79
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	71	0.79
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	71	0.79
(2,111)	1:A:18:ARG:HG3	1:A:49:PHE:HZ	22	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	1	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	2	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	3	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	4	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	5	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	6	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	7	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	8	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	9	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	10	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	11	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	12	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	13	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	14	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	15	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	16	0.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	17	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	18	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	19	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	20	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	21	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	22	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	23	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	24	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	25	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	26	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	27	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	28	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	29	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	30	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	31	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	32	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	33	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	34	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	35	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	36	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	37	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	38	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	39	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	40	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	41	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	42	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	43	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	44	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	45	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	46	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	47	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	48	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	49	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	50	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	51	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	52	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	53	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	54	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	55	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	56	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	57	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	58	0.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	59	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	60	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	61	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	62	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	63	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	64	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	65	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	66	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	67	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	68	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	69	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	70	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	71	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	72	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	73	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	74	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	75	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	76	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	77	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	78	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	79	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	80	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	81	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	82	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	83	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	84	0.79
(1,656)	1:A:49:PHE:HE1	1:A:49:PHE:HD2	85	0.79
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	42	0.79
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	42	0.79
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	42	0.79
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	19	0.79
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	37	0.79
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	54	0.79
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	60	0.79
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	81	0.79
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	1	0.79
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	28	0.79
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	33	0.79
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	11	0.79
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	27	0.79
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	25	0.78
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	51	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	7	0.78
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	9	0.78
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	82	0.78
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	42	0.78
(2,111)	1:A:18:ARG:HG3	1:A:49:PHE:HZ	48	0.78
(2,111)	1:A:18:ARG:HG3	1:A:49:PHE:HZ	81	0.78
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	77	0.78
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	77	0.78
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	77	0.78
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	83	0.78
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	24	0.78
(1,361)	1:A:29:LYS:HD2	1:A:30:GLU:HA	55	0.78
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	19	0.77
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	60	0.77
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	74	0.77
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	79	0.77
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	10	0.77
(2,111)	1:A:18:ARG:HG3	1:A:49:PHE:HZ	1	0.77
(2,111)	1:A:18:ARG:HG3	1:A:49:PHE:HZ	10	0.77
(2,111)	1:A:18:ARG:HG3	1:A:49:PHE:HZ	47	0.77
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD11	72	0.77
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD12	72	0.77
(1,64)	1:A:10:GLN:HA	1:A:52:LEU:HD13	72	0.77
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	70	0.77
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	17	0.77
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	44	0.77
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	47	0.77
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	13	0.77
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	27	0.76
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	53	0.76
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	67	0.76
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	45	0.76
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	54	0.76
(2,39)	1:A:11:CYS:HA	1:A:49:PHE:HD2	85	0.76
(2,188)	1:A:26:VAL:HB	1:A:38:PHE:HE1	85	0.76
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	48	0.76
(2,111)	1:A:18:ARG:HG3	1:A:49:PHE:HZ	52	0.76
(2,111)	1:A:18:ARG:HG3	1:A:49:PHE:HZ	55	0.76
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	73	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	1	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	2	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	3	0.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	4	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	5	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	6	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	7	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	8	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	9	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	10	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	11	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	12	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	13	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	14	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	15	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	16	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	17	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	18	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	19	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	20	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	21	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	22	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	23	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	24	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	25	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	26	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	27	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	28	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	29	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	30	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	31	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	32	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	33	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	34	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	35	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	36	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	37	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	38	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	39	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	40	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	41	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	42	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	43	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	44	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	45	0.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	46	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	47	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	48	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	49	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	50	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	51	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	52	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	53	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	54	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	55	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	56	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	57	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	58	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	59	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	60	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	61	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	62	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	63	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	64	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	65	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	66	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	67	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	68	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	69	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	70	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	71	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	72	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	73	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	74	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	75	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	76	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	77	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	78	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	79	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	80	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	81	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	82	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	83	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	84	0.76
(1,599)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:46:PRO:HG2	85	0.76
(1,553)	1:A:42:ILE:HG12	1:A:43:PRO:HD3	77	0.76
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	22	0.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	30	0.76
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	54	0.76
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	66	0.76
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	77	0.76
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	84	0.76
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	32	0.75
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	79	0.75
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	61	0.75
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	61	0.75
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	61	0.75
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	6	0.75
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	31	0.75
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	33	0.75
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	39	0.75
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	65	0.75
(2,96)	1:A:17:ASP:HA	1:A:53:GLN:HE22	61	0.74
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	34	0.74
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	71	0.74
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	29	0.74
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	29	0.74
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	29	0.74
(2,111)	1:A:18:ARG:HG3	1:A:49:PHE:HZ	37	0.74
(2,111)	1:A:18:ARG:HG3	1:A:49:PHE:HZ	63	0.74
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	35	0.74
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	54	0.74
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	64	0.73
(2,16)	1:A:5:GLY:H	1:A:6:LEU:HB2	61	0.73
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	20	0.73
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	20	0.73
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	20	0.73
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	40	0.73
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	40	0.73
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	40	0.73
(2,111)	1:A:18:ARG:HG3	1:A:49:PHE:HZ	43	0.73
(2,111)	1:A:18:ARG:HG3	1:A:49:PHE:HZ	46	0.73
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	9	0.73
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	14	0.73
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	73	0.73
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	8	0.73
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	13	0.73
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	31	0.73
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	39	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	59	0.73
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	64	0.73
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	81	0.73
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	49	0.72
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	58	0.72
(2,188)	1:A:26:VAL:HB	1:A:38:PHE:HE1	75	0.72
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	28	0.72
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	57	0.72
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	57	0.72
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	57	0.72
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	15	0.72
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	73	0.72
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	8	0.72
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	48	0.72
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	18	0.71
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	59	0.71
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	78	0.71
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	13	0.71
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	38	0.71
(2,16)	1:A:5:GLY:H	1:A:6:LEU:HB2	82	0.71
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	79	0.71
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	79	0.71
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	79	0.71
(2,111)	1:A:18:ARG:HG3	1:A:49:PHE:HZ	36	0.71
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	19	0.71
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	58	0.71
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	62	0.71
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	49	0.71
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	62	0.71
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	85	0.71
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	69	0.71
(2,47)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HG3	35	0.7
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	8	0.7
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	82	0.7
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	82	0.7
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	82	0.7
(2,111)	1:A:18:ARG:HG3	1:A:49:PHE:HZ	29	0.7
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	16	0.7
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	26	0.7
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	15	0.7
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	16	0.7
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	21	0.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	22	0.7
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	30	0.7
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	44	0.7
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	80	0.7
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	42	0.7
(2,111)	1:A:18:ARG:HG3	1:A:49:PHE:HZ	20	0.69
(2,111)	1:A:18:ARG:HG3	1:A:49:PHE:HZ	40	0.69
(2,111)	1:A:18:ARG:HG3	1:A:49:PHE:HZ	68	0.69
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	12	0.69
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	70	0.69
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	7	0.69
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	10	0.69
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	11	0.69
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	11	0.69
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	27	0.69
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	82	0.69
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	38	0.69
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	7	0.69
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	21	0.69
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	17	0.69
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	83	0.69
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	26	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	1	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	1	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	2	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	2	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	3	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	3	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	4	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	4	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	5	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	5	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	6	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	6	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	7	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	7	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	8	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	8	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	9	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	9	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	10	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	10	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	11	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	11	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	12	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	12	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	13	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	13	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	14	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	14	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	15	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	15	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	16	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	16	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	17	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	17	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	18	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	18	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	19	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	19	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	20	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	20	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	21	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	21	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	22	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	22	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	23	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	23	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	24	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	24	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	25	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	25	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	26	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	26	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	27	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	27	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	28	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	28	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	29	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	29	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	30	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	30	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	31	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	31	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	32	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	32	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	33	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	33	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	34	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	34	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	35	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	35	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	36	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	36	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	37	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	37	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	38	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	38	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	39	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	39	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	40	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	40	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	41	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	41	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	42	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	42	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	43	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	43	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	44	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	44	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	45	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	45	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	46	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	46	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	47	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	47	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	48	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	48	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	49	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	49	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	50	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	50	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	51	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	51	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	52	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	52	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	53	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	53	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	54	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	54	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	55	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	55	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	56	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	56	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	57	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	57	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	58	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	58	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	59	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	59	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	60	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	60	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	61	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	61	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	62	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	62	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	63	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	63	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	64	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	64	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	65	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	65	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	66	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	66	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	67	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	67	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	68	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	68	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	69	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	69	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	70	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	70	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	71	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	71	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	72	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	72	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	73	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	73	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	74	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	74	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	75	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	75	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	76	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	76	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	77	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	77	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	78	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	78	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	79	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	79	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	80	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	80	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	81	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	81	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	82	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	82	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	83	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	83	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	84	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	84	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG3	85	0.69
(1,117)	1:A:14:PRO:HA	1:A:14:PRO:HG2	85	0.69
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	35	0.68
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	33	0.68
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	36	0.68
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	84	0.68
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	18	0.68
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	24	0.68
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	3	0.68
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	41	0.68
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	3	0.68
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	5	0.68
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	9	0.68
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	37	0.68
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	42	0.68
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	50	0.68
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	53	0.68
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	54	0.68
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	57	0.68
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	7	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	11	0.68
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	14	0.68
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	21	0.68
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	26	0.68
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	29	0.68
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	30	0.68
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	33	0.68
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	43	0.68
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	45	0.68
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	46	0.68
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	47	0.68
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	48	0.68
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	58	0.68
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	68	0.68
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	73	0.68
(2,16)	1:A:5:GLY:H	1:A:6:LEU:HB2	2	0.67
(2,111)	1:A:18:ARG:HG3	1:A:49:PHE:HZ	57	0.67
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	71	0.67
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	27	0.67
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	51	0.67
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	67	0.67
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	4	0.67
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	5	0.67
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	9	0.67
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	39	0.67
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	45	0.67
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	23	0.67
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	26	0.67
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	41	0.67
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	72	0.67
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	74	0.67
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	77	0.67
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	47	0.67
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	76	0.67
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	79	0.67
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	14	0.67
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	31	0.67
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	31	0.67
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	31	0.67
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	40	0.67
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	57	0.67
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	1	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	6	0.67
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	9	0.67
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	10	0.67
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	16	0.67
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	20	0.67
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	22	0.67
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	24	0.67
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	36	0.67
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	37	0.67
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	40	0.67
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	44	0.67
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	52	0.67
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	54	0.67
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	55	0.67
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	57	0.67
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	81	0.67
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	83	0.67
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	30	0.67
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	47	0.67
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	12	0.66
(2,111)	1:A:18:ARG:HG3	1:A:49:PHE:HZ	21	0.66
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	22	0.66
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	14	0.66
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	15	0.66
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	20	0.66
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	25	0.66
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	29	0.66
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	32	0.66
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	33	0.66
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	41	0.66
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	43	0.66
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	47	0.66
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	54	0.66
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	59	0.66
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	61	0.66
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	63	0.66
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	69	0.66
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	70	0.66
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	74	0.66
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	79	0.66
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	82	0.66
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	2	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	12	0.66
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	20	0.66
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	32	0.66
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	56	0.66
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	66	0.66
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	71	0.66
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	75	0.66
(1,361)	1:A:29:LYS:HD2	1:A:30:GLU:HA	82	0.66
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	3	0.66
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	29	0.66
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	23	0.66
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	42	0.66
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	63	0.66
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	85	0.66
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	55	0.65
(2,16)	1:A:5:GLY:H	1:A:6:LEU:HB2	24	0.65
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	58	0.65
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	58	0.65
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	58	0.65
(2,111)	1:A:18:ARG:HG3	1:A:49:PHE:HZ	85	0.65
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	72	0.65
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	3	0.65
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	6	0.65
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	7	0.65
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	16	0.65
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	26	0.65
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	31	0.65
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	44	0.65
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	85	0.65
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	24	0.65
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	29	0.65
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	45	0.65
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	51	0.65
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	58	0.65
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	61	0.65
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	78	0.65
(1,361)	1:A:29:LYS:HD2	1:A:30:GLU:HA	10	0.65
(1,361)	1:A:29:LYS:HD2	1:A:30:GLU:HA	79	0.65
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	67	0.65
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	40	0.65
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	15	0.65
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	49	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	49	0.65
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	49	0.65
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	20	0.65
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	82	0.65
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	82	0.65
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	82	0.65
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	81	0.64
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	42	0.64
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	4	0.64
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	11	0.64
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	28	0.64
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	58	0.64
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	80	0.64
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	84	0.64
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	12	0.64
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	2	0.64
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	19	0.64
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	25	0.64
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	38	0.64
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	47	0.64
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	55	0.64
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	65	0.64
(1,361)	1:A:29:LYS:HD2	1:A:30:GLU:HA	16	0.64
(1,361)	1:A:29:LYS:HD2	1:A:30:GLU:HA	67	0.64
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	33	0.64
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	17	0.64
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	46	0.64
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	63	0.64
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	70	0.64
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	79	0.64
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	82	0.64
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	26	0.64
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	4	0.64
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	4	0.64
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	4	0.64
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	34	0.64
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	34	0.64
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	34	0.64
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	2	0.64
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	5	0.64
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	8	0.64
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	12	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	31	0.64
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	34	0.64
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	38	0.64
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	66	0.64
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	30	0.63
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	64	0.63
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	43	0.63
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	43	0.63
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	43	0.63
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	83	0.63
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	83	0.63
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	83	0.63
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	52	0.63
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	72	0.63
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	75	0.63
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	28	0.63
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	51	0.63
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	65	0.63
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	69	0.63
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	13	0.63
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	40	0.63
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	1	0.63
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	34	0.63
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	40	0.63
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	48	0.63
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	60	0.63
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	55	0.63
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	57	0.63
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	9	0.63
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	18	0.63
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	18	0.63
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	18	0.63
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	3	0.63
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	4	0.63
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	13	0.63
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	15	0.63
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	18	0.63
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	19	0.63
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	25	0.63
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	39	0.63
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	41	0.63
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	49	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	60	0.63
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	64	0.63
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	65	0.63
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	71	0.63
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	72	0.63
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	76	0.63
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	15	0.62
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	57	0.62
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	74	0.62
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	75	0.62
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	77	0.62
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	81	0.62
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	17	0.62
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	56	0.62
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	66	0.62
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	71	0.62
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	72	0.62
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	8	0.62
(1,501)	1:A:39:ASP:HB2	1:A:49:PHE:HD1	38	0.62
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	8	0.62
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	16	0.62
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	19	0.62
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	20	0.62
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	41	0.62
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	44	0.62
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	46	0.62
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	53	0.62
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	64	0.62
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	6	0.62
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	18	0.62
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	52	0.62
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	76	0.62
(1,361)	1:A:29:LYS:HD2	1:A:30:GLU:HA	37	0.62
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	4	0.62
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	12	0.62
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	19	0.62
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	27	0.62
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	5	0.62
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	5	0.62
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	5	0.62
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	32	0.62
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	35	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	53	0.62
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	56	0.62
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	59	0.62
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	61	0.62
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	62	0.62
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	67	0.62
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	69	0.62
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	76	0.62
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	78	0.62
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	84	0.62
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	77	0.62
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	61	0.61
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	71	0.61
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	23	0.61
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	27	0.61
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	41	0.61
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	54	0.61
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	28	0.61
(2,16)	1:A:5:GLY:H	1:A:6:LEU:HB2	25	0.61
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	7	0.61
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	20	0.61
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	33	0.61
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	45	0.61
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	50	0.61
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	67	0.61
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	46	0.61
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	60	0.61
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	64	0.61
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	78	0.61
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	31	0.61
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	34	0.61
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	70	0.61
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	76	0.61
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	10	0.61
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	23	0.61
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	37	0.61
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	50	0.61
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	7	0.61
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	10	0.61
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	14	0.61
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	46	0.61
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	67	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	69	0.61
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	70	0.61
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	83	0.61
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	67	0.61
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	71	0.61
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	80	0.61
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	17	0.61
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	27	0.61
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	28	0.61
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	50	0.61
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	51	0.61
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	70	0.61
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	74	0.61
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	77	0.61
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	80	0.61
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	53	0.61
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	20	0.6
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	36	0.6
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	40	0.6
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	51	0.6
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	57	0.6
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	67	0.6
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	76	0.6
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	79	0.6
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	75	0.6
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	3	0.6
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	20	0.6
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	22	0.6
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	37	0.6
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	40	0.6
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	46	0.6
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	50	0.6
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	51	0.6
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	76	0.6
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	77	0.6
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	79	0.6
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	5	0.6
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	84	0.6
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	10	0.6
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	18	0.6
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	34	0.6
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	48	0.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	49	0.6
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	50	0.6
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	52	0.6
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	55	0.6
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	62	0.6
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	77	0.6
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	84	0.6
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	15	0.6
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	17	0.6
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	25	0.6
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	38	0.6
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	49	0.6
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	67	0.6
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	2	0.6
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	3	0.6
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	4	0.6
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	14	0.6
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	27	0.6
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	34	0.6
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	38	0.6
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	39	0.6
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	55	0.6
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	63	0.6
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	67	0.6
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	17	0.6
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	28	0.6
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	63	0.6
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	79	0.6
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	83	0.6
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	54	0.6
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	35	0.6
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	35	0.6
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	35	0.6
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	50	0.6
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	50	0.6
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	50	0.6
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	75	0.6
(1,183)	1:A:18:ARG:HA	1:A:18:ARG:HG3	79	0.6
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	49	0.6
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	84	0.6
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	1	0.59
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	29	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	34	0.59
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	46	0.59
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	55	0.59
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	75	0.59
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	51	0.59
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	43	0.59
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	53	0.59
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	67	0.59
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	69	0.59
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	80	0.59
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	63	0.59
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	63	0.59
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	63	0.59
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	2	0.59
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	21	0.59
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	23	0.59
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	36	0.59
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	37	0.59
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	38	0.59
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	53	0.59
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	68	0.59
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	76	0.59
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	27	0.59
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	59	0.59
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	61	0.59
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	62	0.59
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	64	0.59
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	75	0.59
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	79	0.59
(1,424)	1:A:34:ARG:HB2	1:A:34:ARG:HG3	16	0.59
(1,424)	1:A:34:ARG:HB2	1:A:34:ARG:HG3	33	0.59
(1,424)	1:A:34:ARG:HB2	1:A:34:ARG:HG3	39	0.59
(1,424)	1:A:34:ARG:HB2	1:A:34:ARG:HG3	44	0.59
(1,424)	1:A:34:ARG:HB2	1:A:34:ARG:HG3	66	0.59
(1,424)	1:A:34:ARG:HB2	1:A:34:ARG:HG3	73	0.59
(1,424)	1:A:34:ARG:HB2	1:A:34:ARG:HG3	80	0.59
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	6	0.59
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	12	0.59
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	15	0.59
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	17	0.59
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	22	0.59
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	32	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	47	0.59
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	57	0.59
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	66	0.59
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	70	0.59
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	4	0.59
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	68	0.59
(1,361)	1:A:29:LYS:HD2	1:A:30:GLU:HA	40	0.59
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	62	0.59
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	2	0.59
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	2	0.59
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	2	0.59
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	11	0.59
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	11	0.59
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	11	0.59
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	61	0.59
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	79	0.59
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	10	0.59
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	24	0.59
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	81	0.59
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	82	0.59
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	5	0.59
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	65	0.59
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	71	0.59
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	72	0.59
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	82	0.59
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	6	0.58
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	48	0.58
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	53	0.58
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	54	0.58
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	60	0.58
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	69	0.58
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	74	0.58
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	78	0.58
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	77	0.58
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	16	0.58
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	17	0.58
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	21	0.58
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	63	0.58
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	77	0.58
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	52	0.58
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	74	0.58
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	45	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,16)	1:A:5:GLY:H	1:A:6:LEU:HB2	51	0.58
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	72	0.58
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	72	0.58
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	72	0.58
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	23	0.58
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	60	0.58
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	65	0.58
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	68	0.58
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	8	0.58
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	12	0.58
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	22	0.58
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	30	0.58
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	39	0.58
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	57	0.58
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	73	0.58
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	81	0.58
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	2	0.58
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	4	0.58
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	19	0.58
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	32	0.58
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	41	0.58
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	56	0.58
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	60	0.58
(1,424)	1:A:34:ARG:HB2	1:A:34:ARG:HG3	3	0.58
(1,424)	1:A:34:ARG:HB2	1:A:34:ARG:HG3	8	0.58
(1,424)	1:A:34:ARG:HB2	1:A:34:ARG:HG3	13	0.58
(1,424)	1:A:34:ARG:HB2	1:A:34:ARG:HG3	15	0.58
(1,424)	1:A:34:ARG:HB2	1:A:34:ARG:HG3	20	0.58
(1,424)	1:A:34:ARG:HB2	1:A:34:ARG:HG3	21	0.58
(1,424)	1:A:34:ARG:HB2	1:A:34:ARG:HG3	22	0.58
(1,424)	1:A:34:ARG:HB2	1:A:34:ARG:HG3	23	0.58
(1,424)	1:A:34:ARG:HB2	1:A:34:ARG:HG3	27	0.58
(1,424)	1:A:34:ARG:HB2	1:A:34:ARG:HG3	30	0.58
(1,424)	1:A:34:ARG:HB2	1:A:34:ARG:HG3	31	0.58
(1,424)	1:A:34:ARG:HB2	1:A:34:ARG:HG3	35	0.58
(1,424)	1:A:34:ARG:HB2	1:A:34:ARG:HG3	37	0.58
(1,424)	1:A:34:ARG:HB2	1:A:34:ARG:HG3	40	0.58
(1,424)	1:A:34:ARG:HB2	1:A:34:ARG:HG3	41	0.58
(1,424)	1:A:34:ARG:HB2	1:A:34:ARG:HG3	43	0.58
(1,424)	1:A:34:ARG:HB2	1:A:34:ARG:HG3	50	0.58
(1,424)	1:A:34:ARG:HB2	1:A:34:ARG:HG3	53	0.58
(1,424)	1:A:34:ARG:HB2	1:A:34:ARG:HG3	54	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,424)	1:A:34:ARG:HB2	1:A:34:ARG:HG3	57	0.58
(1,424)	1:A:34:ARG:HB2	1:A:34:ARG:HG3	59	0.58
(1,424)	1:A:34:ARG:HB2	1:A:34:ARG:HG3	62	0.58
(1,424)	1:A:34:ARG:HB2	1:A:34:ARG:HG3	64	0.58
(1,424)	1:A:34:ARG:HB2	1:A:34:ARG:HG3	69	0.58
(1,424)	1:A:34:ARG:HB2	1:A:34:ARG:HG3	76	0.58
(1,424)	1:A:34:ARG:HB2	1:A:34:ARG:HG3	81	0.58
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	1	0.58
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	18	0.58
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	30	0.58
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	43	0.58
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	54	0.58
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	60	0.58
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	62	0.58
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	65	0.58
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	73	0.58
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	76	0.58
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	79	0.58
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	43	0.58
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	84	0.58
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	34	0.58
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	5	0.58
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	61	0.58
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	68	0.58
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	25	0.58
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	25	0.58
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	25	0.58
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	72	0.58
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	72	0.58
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	72	0.58
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	9	0.58
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	11	0.58
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	20	0.58
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	21	0.58
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	36	0.58
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	45	0.58
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	44	0.58
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	18	0.58
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	19	0.58
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	70	0.58
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	12	0.57
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	14	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	18	0.57
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	22	0.57
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	32	0.57
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	47	0.57
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	49	0.57
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	50	0.57
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	52	0.57
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	59	0.57
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	81	0.57
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	83	0.57
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	79	0.57
(2,266)	1:A:38:PHE:HE1	1:A:47:TRP:HA	75	0.57
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	33	0.57
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	39	0.57
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	54	0.57
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	59	0.57
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	78	0.57
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	31	0.57
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	59	0.57
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	83	0.57
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	75	0.57
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	75	0.57
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	75	0.57
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	1	0.57
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	17	0.57
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	34	0.57
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	1	0.57
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	9	0.57
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	35	0.57
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	40	0.57
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	45	0.57
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	3	0.57
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	18	0.57
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	35	0.57
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	78	0.57
(1,424)	1:A:34:ARG:HB2	1:A:34:ARG:HG3	83	0.57
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	7	0.57
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	13	0.57
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	21	0.57
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	25	0.57
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	35	0.57
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	52	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	59	0.57
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	78	0.57
(1,406)	1:A:33:ASN:H	1:A:35:GLY:HA2	36	0.57
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	38	0.57
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	42	0.57
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	71	0.57
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	55	0.57
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	69	0.57
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	21	0.57
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	32	0.57
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	34	0.57
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	35	0.57
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	74	0.57
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	5	0.56
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	8	0.56
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	19	0.56
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	21	0.56
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	24	0.56
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	27	0.56
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	33	0.56
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	35	0.56
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	37	0.56
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	43	0.56
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	44	0.56
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	64	0.56
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	74	0.56
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	3	0.56
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	8	0.56
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	11	0.56
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	16	0.56
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	21	0.56
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	22	0.56
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	24	0.56
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	25	0.56
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	27	0.56
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	30	0.56
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	31	0.56
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	34	0.56
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	35	0.56
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	37	0.56
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	44	0.56
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	45	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	49	0.56
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	50	0.56
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	53	0.56
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	55	0.56
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	56	0.56
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	60	0.56
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	62	0.56
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	64	0.56
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	65	0.56
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	66	0.56
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	72	0.56
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	73	0.56
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	74	0.56
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	80	0.56
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	81	0.56
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	82	0.56
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	85	0.56
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	33	0.56
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	70	0.56
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	80	0.56
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	46	0.56
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	46	0.56
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	46	0.56
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	48	0.56
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	48	0.56
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	48	0.56
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	76	0.56
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	76	0.56
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	76	0.56
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	63	0.56
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	5	0.56
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	42	0.56
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	65	0.56
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	5	0.56
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	71	0.56
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	77	0.56
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	26	0.56
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	28	0.56
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	33	0.56
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	42	0.56
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	45	0.56
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	68	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	69	0.56
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	72	0.56
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	80	0.56
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	83	0.56
(1,361)	1:A:29:LYS:HD2	1:A:30:GLU:HA	53	0.56
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	74	0.56
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	18	0.56
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	56	0.56
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	66	0.56
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	66	0.56
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	66	0.56
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	71	0.56
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	71	0.56
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	71	0.56
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	6	0.56
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	9	0.56
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	16	0.56
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	44	0.56
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	73	0.56
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	6	0.56
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	7	0.56
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	14	0.56
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	16	0.56
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	22	0.56
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	27	0.56
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	29	0.56
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	30	0.56
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	40	0.56
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	43	0.56
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	46	0.56
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	52	0.56
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	54	0.56
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	57	0.56
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	58	0.56
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	73	0.56
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	79	0.56
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	84	0.56
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	67	0.56
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	25	0.56
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	67	0.56
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	69	0.56
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	78	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	16	0.55
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	23	0.55
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	42	0.55
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	63	0.55
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	70	0.55
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	78	0.55
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	2	0.55
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	4	0.55
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	5	0.55
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	9	0.55
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	10	0.55
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	12	0.55
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	13	0.55
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	15	0.55
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	17	0.55
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	18	0.55
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	19	0.55
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	23	0.55
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	26	0.55
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	32	0.55
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	38	0.55
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	41	0.55
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	42	0.55
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	46	0.55
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	47	0.55
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	58	0.55
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	61	0.55
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	63	0.55
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	67	0.55
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	70	0.55
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	75	0.55
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	83	0.55
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	44	0.55
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	48	0.55
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	83	0.55
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	28	0.55
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	28	0.55
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	28	0.55
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	33	0.55
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	33	0.55
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	33	0.55
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	49	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	49	0.55
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	49	0.55
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	56	0.55
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	56	0.55
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	56	0.55
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	65	0.55
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	65	0.55
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	65	0.55
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	69	0.55
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	69	0.55
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	69	0.55
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	15	0.55
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	13	0.55
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	19	0.55
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	24	0.55
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	53	0.55
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	58	0.55
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	74	0.55
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	80	0.55
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	5	0.55
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	31	0.55
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	36	0.55
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	56	0.55
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	84	0.55
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	23	0.55
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	71	0.55
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	78	0.55
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	60	0.55
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	60	0.55
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	60	0.55
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	10	0.55
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	14	0.55
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	23	0.55
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	24	0.55
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	26	0.55
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	33	0.55
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	45	0.55
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	51	0.55
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	54	0.55
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	85	0.55
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	1	0.55
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	25	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	26	0.55
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	32	0.55
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	33	0.55
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	44	0.55
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	47	0.55
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	48	0.55
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	51	0.55
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	60	0.55
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	68	0.55
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	70	0.55
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	71	0.55
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	72	0.55
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	74	0.55
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	62	0.55
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	60	0.55
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	61	0.55
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	79	0.55
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	28	0.54
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	39	0.54
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	41	0.54
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	72	0.54
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	77	0.54
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	69	0.54
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	1	0.54
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	6	0.54
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	7	0.54
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	14	0.54
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	20	0.54
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	28	0.54
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	36	0.54
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	40	0.54
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	48	0.54
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	51	0.54
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	57	0.54
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	71	0.54
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	61	0.54
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	68	0.54
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	68	0.54
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	68	0.54
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	68	0.54
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	84	0.54
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	84	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	84	0.54
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	8	0.54
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	25	0.54
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	58	0.54
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	50	0.54
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	66	0.54
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	68	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	1	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	1	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	2	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	2	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	3	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	3	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	4	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	4	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	5	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	5	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	6	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	6	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	7	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	7	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	8	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	8	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	9	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	9	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	10	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	10	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	11	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	11	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	12	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	12	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	13	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	13	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	14	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	14	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	15	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	15	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	16	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	16	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	17	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	17	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	18	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	18	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	19	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	19	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	20	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	20	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	21	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	21	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	22	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	22	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	23	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	23	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	24	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	24	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	25	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	25	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	26	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	26	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	27	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	27	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	28	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	28	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	29	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	29	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	30	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	30	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	31	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	31	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	32	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	32	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	33	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	33	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	34	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	34	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	35	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	35	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	36	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	36	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	37	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	37	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	38	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	38	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	39	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	39	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	40	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	40	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	41	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	41	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	42	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	42	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	43	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	43	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	44	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	44	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	45	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	45	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	46	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	46	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	47	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	47	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	48	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	48	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	49	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	49	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	50	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	50	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	51	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	51	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	52	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	52	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	53	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	53	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	54	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	54	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	55	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	55	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	56	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	56	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	57	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	57	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	58	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	58	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	59	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	59	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	60	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	60	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	61	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	61	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	62	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	62	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	63	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	63	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	64	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	64	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	65	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	65	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	66	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	66	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	67	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	67	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	68	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	68	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	69	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	69	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	70	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	70	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	71	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	71	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	72	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	72	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	73	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	73	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	74	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	74	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	75	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	75	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	76	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	76	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	77	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	77	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	78	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	78	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	79	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	79	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	80	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	80	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	81	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	81	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	82	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	82	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	83	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	83	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	84	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	84	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD2	85	0.54
(1,566)	1:A:43:PRO:HB2	1:A:43:PRO:HD3	85	0.54
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	24	0.54
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	61	0.54
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	82	0.54
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	29	0.54
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	6	0.54
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	61	0.54
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	61	0.54
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	61	0.54
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	1	0.54
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	7	0.54
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	11	0.54
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	22	0.54
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	36	0.54
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	37	0.54
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	19	0.54
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	28	0.54
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	35	0.54
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	64	0.54
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	65	0.54
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	77	0.54
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	80	0.54
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	85	0.54
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	11	0.54
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	11	0.54
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	68	0.54
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	84	0.53
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	17	0.53
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	62	0.53
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	66	0.53
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	84	0.53
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	67	0.53
(2,266)	1:A:38:PHE:HE1	1:A:47:TRP:HA	85	0.53
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	29	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	52	0.53
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	68	0.53
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	76	0.53
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	84	0.53
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	39	0.53
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	82	0.53
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	76	0.53
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	37	0.53
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	36	0.53
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	36	0.53
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	36	0.53
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	67	0.53
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	67	0.53
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	67	0.53
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	3	0.53
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	11	0.53
(1,664)	1:A:50:LYS:HB2	1:A:50:LYS:HG2	83	0.53
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	11	0.53
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	12	0.53
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	46	0.53
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	9	0.53
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	11	0.53
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	29	0.53
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	71	0.53
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	74	0.53
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	81	0.53
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	72	0.53
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	10	0.53
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	8	0.53
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	11	0.53
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	44	0.53
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	51	0.53
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	28	0.53
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	28	0.53
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	28	0.53
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	38	0.53
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	38	0.53
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	38	0.53
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	27	0.53
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	28	0.53
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	30	0.53
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	43	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	46	0.53
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	48	0.53
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	77	0.53
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	8	0.53
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	12	0.53
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	13	0.53
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	15	0.53
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	17	0.53
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	34	0.53
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	59	0.53
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	67	0.53
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	20	0.53
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	29	0.53
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	57	0.53
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	59	0.53
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	85	0.53
(2,96)	1:A:17:ASP:HA	1:A:53:GLN:HE22	42	0.52
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	81	0.52
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	2	0.52
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	4	0.52
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	13	0.52
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	15	0.52
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	25	0.52
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	38	0.52
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	34	0.52
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	60	0.52
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	71	0.52
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	43	0.52
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	69	0.52
(2,242)	1:A:35:GLY:HA2	1:A:37:CYS:H	79	0.52
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	54	0.52
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	73	0.52
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	68	0.52
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	51	0.52
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	51	0.52
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	51	0.52
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	60	0.52
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	60	0.52
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	60	0.52
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	75	0.52
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	76	0.52
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	8	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	13	0.52
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	39	0.52
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	55	0.52
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	85	0.52
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	49	0.52
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	51	0.52
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	58	0.52
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	77	0.52
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	2	0.52
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	36	0.52
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	1	0.52
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	21	0.52
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	47	0.52
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	52	0.52
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	55	0.52
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	69	0.52
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	70	0.52
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	2	0.52
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	3	0.52
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	4	0.52
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	5	0.52
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	18	0.52
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	39	0.52
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	41	0.52
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	49	0.52
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	53	0.52
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	56	0.52
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	66	0.52
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	76	0.52
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	78	0.52
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	42	0.52
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	1	0.52
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	7	0.52
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	10	0.52
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	27	0.52
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	36	0.52
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	37	0.52
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	40	0.52
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	46	0.52
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	47	0.52
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	50	0.52
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	51	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	58	0.52
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	81	0.52
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	3	0.51
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	7	0.51
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	31	0.51
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	56	0.51
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	65	0.51
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	80	0.51
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	82	0.51
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	62	0.51
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	66	0.51
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	56	0.51
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	52	0.51
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	52	0.51
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	52	0.51
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	55	0.51
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	55	0.51
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	55	0.51
(2,111)	1:A:18:ARG:HG3	1:A:49:PHE:HZ	82	0.51
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	43	0.51
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	47	0.51
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	10	0.51
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	23	0.51
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	26	0.51
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	30	0.51
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	36	0.51
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	43	0.51
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	45	0.51
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	48	0.51
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	75	0.51
(1,418)	1:A:34:ARG:H	1:A:35:GLY:HA2	85	0.51
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	83	0.51
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	38	0.51
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	59	0.51
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	41	0.51
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	41	0.51
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	41	0.51
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	17	0.51
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	50	0.51
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	59	0.51
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	67	0.51
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	37	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	83	0.51
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	22	0.51
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	43	0.51
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	48	0.51
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	52	0.51
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	54	0.51
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	55	0.51
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	64	0.51
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	9	0.5
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	10	0.5
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	11	0.5
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	26	0.5
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	30	0.5
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	68	0.5
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	61	0.5
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	29	0.5
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	52	0.5
(2,16)	1:A:5:GLY:H	1:A:6:LEU:HB2	52	0.5
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	81	0.5
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	81	0.5
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	81	0.5
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	9	0.5
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	52	0.5
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	17	0.5
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	70	0.5
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	82	0.5
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	39	0.5
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	3	0.5
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	77	0.5
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	77	0.5
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	77	0.5
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	25	0.5
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	32	0.5
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	35	0.5
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	60	0.5
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	62	0.5
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	84	0.5
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	31	0.5
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	38	0.5
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	63	0.5
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	23	0.5
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	63	0.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	1	0.5
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	9	0.5
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	24	0.5
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	30	0.5
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	45	0.5
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	63	0.5
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	45	0.49
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	58	0.49
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	73	0.49
(2,329)	1:A:46:PRO:HG2	1:A:47:TRP:HD1	85	0.49
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	76	0.49
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	79	0.49
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	85	0.49
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	69	0.49
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	85	0.49
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	16	0.49
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	38	0.49
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	38	0.49
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	38	0.49
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	66	0.49
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	66	0.49
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	66	0.49
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	78	0.49
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	78	0.49
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	78	0.49
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	85	0.49
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	85	0.49
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	85	0.49
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	7	0.49
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	14	0.49
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	21	0.49
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	37	0.49
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	47	0.49
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	48	0.49
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	73	0.49
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	82	0.49
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	2	0.49
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	28	0.49
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	31	0.49
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	56	0.49
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	65	0.49
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	76	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	84	0.49
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	31	0.49
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	41	0.49
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	68	0.49
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	34	0.49
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	24	0.49
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	9	0.49
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	30	0.49
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	67	0.49
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	67	0.49
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	67	0.49
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	84	0.49
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	84	0.49
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	84	0.49
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	2	0.49
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	3	0.49
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	8	0.49
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	18	0.49
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	19	0.49
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	31	0.49
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	39	0.49
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	41	0.49
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	49	0.49
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	53	0.49
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	72	0.49
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	23	0.49
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	33	0.49
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	42	0.49
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	44	0.49
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	73	0.49
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	75	0.49
(2,96)	1:A:17:ASP:HA	1:A:53:GLN:HE22	64	0.48
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	20	0.48
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	77	0.48
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	32	0.48
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	47	0.48
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	73	0.48
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	73	0.48
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	73	0.48
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	36	0.48
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	6	0.48
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	16	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	24	0.48
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	4	0.48
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	11	0.48
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	25	0.48
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	58	0.48
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	61	0.48
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	62	0.48
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	67	0.48
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	69	0.48
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	72	0.48
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	75	0.48
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	77	0.48
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	79	0.48
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	80	0.48
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	85	0.48
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	20	0.48
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	23	0.48
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	83	0.48
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	39	0.48
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	39	0.48
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	39	0.48
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	4	0.48
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	5	0.48
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	12	0.48
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	38	0.48
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	64	0.48
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	65	0.48
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	15	0.48
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	6	0.48
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	14	0.48
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	23	0.48
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	26	0.48
(2,96)	1:A:17:ASP:HA	1:A:53:GLN:HE22	54	0.47
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	50	0.47
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	59	0.47
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	28	0.47
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	75	0.47
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	31	0.47
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	31	0.47
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	31	0.47
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	47	0.47
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	47	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	47	0.47
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	64	0.47
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	64	0.47
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	64	0.47
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	70	0.47
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	70	0.47
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	70	0.47
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	74	0.47
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	74	0.47
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	74	0.47
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	57	0.47
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	61	0.47
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	29	0.47
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	63	0.47
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	3	0.47
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	15	0.47
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	18	0.47
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	34	0.47
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	41	0.47
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	49	0.47
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	50	0.47
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	51	0.47
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	53	0.47
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	60	0.47
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	68	0.47
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	71	0.47
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	74	0.47
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	39	0.47
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	54	0.47
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	73	0.47
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	69	0.47
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	69	0.47
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	69	0.47
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	78	0.47
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	78	0.47
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	78	0.47
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	13	0.47
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	37	0.47
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	42	0.47
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	75	0.47
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	83	0.47
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	85	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	75	0.47
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	16	0.47
(2,346)	1:A:52:LEU:H	1:A:54:GLU:HB2	62	0.46
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	36	0.46
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	70	0.46
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	82	0.46
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	36	0.46
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	71	0.46
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	41	0.46
(2,16)	1:A:5:GLY:H	1:A:6:LEU:HB2	4	0.46
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	25	0.46
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	25	0.46
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	25	0.46
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	59	0.46
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	59	0.46
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	59	0.46
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	77	0.46
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	77	0.46
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	77	0.46
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	13	0.46
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	1	0.46
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	5	0.46
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	7	0.46
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	10	0.46
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	13	0.46
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	19	0.46
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	23	0.46
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	26	0.46
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	27	0.46
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	29	0.46
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	30	0.46
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	32	0.46
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	35	0.46
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	59	0.46
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	63	0.46
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	64	0.46
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	73	0.46
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	60	0.46
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	20	0.46
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	34	0.46
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	41	0.46
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	73	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	82	0.46
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	83	0.46
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	72	0.46
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	19	0.46
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	19	0.46
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	19	0.46
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	27	0.46
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	27	0.46
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	27	0.46
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	34	0.46
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	48	0.45
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	49	0.45
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	57	0.45
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	64	0.45
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	72	0.45
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	11	0.45
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	75	0.45
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	67	0.45
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	58	0.45
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	10	0.45
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	24	0.45
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	24	0.45
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	24	0.45
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	34	0.45
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	34	0.45
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	34	0.45
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	54	0.45
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	54	0.45
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	54	0.45
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	20	0.45
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	42	0.45
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	44	0.45
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	1	0.45
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	9	0.45
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	20	0.45
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	21	0.45
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	37	0.45
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	38	0.45
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	40	0.45
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	45	0.45
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	46	0.45
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	52	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	55	0.45
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	57	0.45
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	66	0.45
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	78	0.45
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	25	0.45
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	52	0.45
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	64	0.45
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	71	0.45
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	81	0.45
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	74	0.45
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	74	0.45
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	74	0.45
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	79	0.45
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	79	0.45
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	79	0.45
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	82	0.45
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	82	0.45
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	82	0.45
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	85	0.45
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	85	0.45
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	85	0.45
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	50	0.45
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	50	0.45
(1,152)	1:A:16:LYS:HA	1:A:17:ASP:HB3	61	0.45
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	28	0.45
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	83	0.45
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	54	0.44
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	5	0.44
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	9	0.44
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	26	0.44
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	56	0.44
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	71	0.44
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	19	0.44
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	19	0.44
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	19	0.44
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	37	0.44
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	70	0.44
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	76	0.44
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	33	0.44
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	40	0.44
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	54	0.44
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	57	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	6	0.44
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	8	0.44
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	12	0.44
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	14	0.44
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	16	0.44
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	33	0.44
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	36	0.44
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	39	0.44
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	42	0.44
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	43	0.44
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	44	0.44
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	47	0.44
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	39	0.44
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	83	0.44
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	35	0.44
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	81	0.44
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	47	0.44
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	70	0.44
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	70	0.44
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	70	0.44
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	76	0.44
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	76	0.44
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	76	0.44
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	61	0.44
(2,96)	1:A:17:ASP:HA	1:A:53:GLN:HE22	74	0.43
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	53	0.43
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	80	0.43
(2,266)	1:A:38:PHE:HE1	1:A:47:TRP:HA	82	0.43
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	12	0.43
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	32	0.43
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	42	0.43
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	67	0.43
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	67	0.43
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	67	0.43
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	43	0.43
(2,16)	1:A:5:GLY:H	1:A:6:LEU:HB2	13	0.43
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	17	0.43
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	17	0.43
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	17	0.43
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	17	0.43
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	67	0.43
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	22	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	22	0.43
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	24	0.43
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	48	0.43
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	54	0.43
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	44	0.43
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	64	0.43
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	4	0.43
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	45	0.43
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	6	0.43
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	60	0.43
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	81	0.43
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	26	0.43
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	73	0.43
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	27	0.43
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	47	0.43
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	47	0.43
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	47	0.43
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	56	0.43
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	56	0.43
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	56	0.43
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	2	0.43
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	62	0.43
(2,96)	1:A:17:ASP:HA	1:A:53:GLN:HE22	43	0.42
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	58	0.42
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	21	0.42
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	68	0.42
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	9	0.42
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	9	0.42
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	9	0.42
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	10	0.42
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	10	0.42
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	10	0.42
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	32	0.42
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	32	0.42
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	32	0.42
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	28	0.42
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	84	0.42
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	83	0.42
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	16	0.42
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	53	0.42
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	66	0.42
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	78	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	19	0.42
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	23	0.42
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	47	0.42
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	54	0.42
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	60	0.42
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	65	0.42
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	78	0.42
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	1	0.42
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	44	0.42
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	66	0.42
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	22	0.42
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	24	0.42
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	35	0.42
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	41	0.42
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	51	0.42
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	51	0.42
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	51	0.42
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	3	0.42
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	4	0.42
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	17	0.42
(2,96)	1:A:17:ASP:HA	1:A:53:GLN:HE22	17	0.41
(2,96)	1:A:17:ASP:HA	1:A:53:GLN:HE22	79	0.41
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	29	0.41
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	40	0.41
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	52	0.41
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	85	0.41
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	19	0.41
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	56	0.41
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	77	0.41
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	78	0.41
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	6	0.41
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	6	0.41
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	6	0.41
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	18	0.41
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	18	0.41
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	18	0.41
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	51	0.41
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	61	0.41
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	69	0.41
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	79	0.41
(1,601)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:47:TRP:H	81	0.41
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	33	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	59	0.41
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	14	0.41
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	50	0.41
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	58	0.41
(1,361)	1:A:29:LYS:HD2	1:A:30:GLU:HA	52	0.41
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	5	0.41
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	10	0.41
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	11	0.41
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	19	0.41
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	2	0.41
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	4	0.41
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	6	0.41
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	7	0.41
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	10	0.41
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	11	0.41
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	12	0.41
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	14	0.41
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	15	0.41
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	16	0.41
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	22	0.41
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	39	0.41
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	42	0.41
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	62	0.41
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	37	0.41
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	47	0.41
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	69	0.41
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	72	0.41
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	32	0.41
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	5	0.41
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	31	0.41
(2,96)	1:A:17:ASP:HA	1:A:53:GLN:HE22	75	0.4
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	23	0.4
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	35	0.4
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	49	0.4
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	46	0.4
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	46	0.4
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	46	0.4
(2,16)	1:A:5:GLY:H	1:A:6:LEU:HB2	14	0.4
(2,16)	1:A:5:GLY:H	1:A:6:LEU:HB2	84	0.4
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	1	0.4
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	1	0.4
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	1	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	7	0.4
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	7	0.4
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	7	0.4
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	14	0.4
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	14	0.4
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	14	0.4
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	16	0.4
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	16	0.4
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	16	0.4
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	30	0.4
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	30	0.4
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	30	0.4
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	84	0.4
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	38	0.4
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	31	0.4
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	20	0.4
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	62	0.4
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	72	0.4
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	2	0.4
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	6	0.4
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	37	0.4
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	6	0.4
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	7	0.4
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	12	0.4
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	3	0.4
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	5	0.4
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	9	0.4
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	17	0.4
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	18	0.4
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	21	0.4
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	23	0.4
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	24	0.4
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	30	0.4
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	41	0.4
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	45	0.4
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	47	0.4
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	65	0.4
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	33	0.4
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	6	0.4
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	6	0.4
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	6	0.4
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	58	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	58	0.4
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	58	0.4
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	56	0.4
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	13	0.4
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	15	0.4
(2,96)	1:A:17:ASP:HA	1:A:53:GLN:HE22	63	0.39
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	22	0.39
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	43	0.39
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	63	0.39
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	83	0.39
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	2	0.39
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	6	0.39
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	84	0.39
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	79	0.39
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	17	0.39
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	17	0.39
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	17	0.39
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	5	0.39
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	5	0.39
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	5	0.39
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	42	0.39
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	42	0.39
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	42	0.39
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	80	0.39
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	80	0.39
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	80	0.39
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	81	0.39
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	15	0.39
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	35	0.39
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	46	0.39
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	62	0.39
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	63	0.39
(1,58)	1:A:10:GLN:HA	1:A:10:GLN:HB2	2	0.39
(1,58)	1:A:10:GLN:HA	1:A:10:GLN:HB2	32	0.39
(1,58)	1:A:10:GLN:HA	1:A:10:GLN:HB2	82	0.39
(1,58)	1:A:10:GLN:HA	1:A:10:GLN:HB2	85	0.39
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	37	0.39
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	41	0.39
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	50	0.39
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	73	0.39
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	56	0.39
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	4	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	14	0.39
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	8	0.39
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	27	0.39
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	31	0.39
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	32	0.39
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	34	0.39
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	35	0.39
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	37	0.39
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	51	0.39
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	53	0.39
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	54	0.39
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	2	0.39
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	12	0.39
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	12	0.39
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	12	0.39
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	13	0.39
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	13	0.39
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	13	0.39
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	14	0.39
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	14	0.39
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	14	0.39
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	54	0.39
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	54	0.39
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	54	0.39
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	80	0.39
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	80	0.39
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	80	0.39
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	12	0.39
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	39	0.39
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	41	0.39
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	56	0.39
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	80	0.39
(2,96)	1:A:17:ASP:HA	1:A:53:GLN:HE22	11	0.38
(2,96)	1:A:17:ASP:HA	1:A:53:GLN:HE22	50	0.38
(2,96)	1:A:17:ASP:HA	1:A:53:GLN:HE22	60	0.38
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	21	0.38
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	32	0.38
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	37	0.38
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	55	0.38
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	81	0.38
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	14	0.38
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	55	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	55	0.38
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	55	0.38
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	63	0.38
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	63	0.38
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	63	0.38
(2,16)	1:A:5:GLY:H	1:A:6:LEU:HB2	8	0.38
(2,16)	1:A:5:GLY:H	1:A:6:LEU:HB2	68	0.38
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	26	0.38
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	26	0.38
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	26	0.38
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	45	0.38
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	45	0.38
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	45	0.38
(2,111)	1:A:18:ARG:HG3	1:A:49:PHE:HZ	58	0.38
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	62	0.38
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	4	0.38
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	25	0.38
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	27	0.38
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	41	0.38
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	49	0.38
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	55	0.38
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	56	0.38
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	68	0.38
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	71	0.38
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	83	0.38
(1,58)	1:A:10:GLN:HA	1:A:10:GLN:HB2	4	0.38
(1,58)	1:A:10:GLN:HA	1:A:10:GLN:HB2	10	0.38
(1,58)	1:A:10:GLN:HA	1:A:10:GLN:HB2	28	0.38
(1,58)	1:A:10:GLN:HA	1:A:10:GLN:HB2	49	0.38
(1,58)	1:A:10:GLN:HA	1:A:10:GLN:HB2	53	0.38
(1,58)	1:A:10:GLN:HA	1:A:10:GLN:HB2	54	0.38
(1,58)	1:A:10:GLN:HA	1:A:10:GLN:HB2	74	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	1	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	2	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	3	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	4	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	5	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	6	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	7	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	8	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	9	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	10	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	11	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	12	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	13	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	14	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	15	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	16	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	17	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	18	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	19	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	20	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	21	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	22	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	23	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	24	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	25	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	26	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	27	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	28	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	29	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	30	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	31	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	32	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	33	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	34	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	35	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	36	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	37	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	38	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	39	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	40	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	41	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	42	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	43	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	44	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	45	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	46	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	47	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	48	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	49	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	50	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	51	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	52	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	53	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	54	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	55	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	56	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	57	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	58	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	59	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	60	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	61	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	62	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	63	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	64	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	65	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	66	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	67	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	68	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	69	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	70	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	71	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	72	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	73	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	74	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	75	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	76	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	77	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	78	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	79	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	80	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	81	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	82	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	83	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	84	0.38
(1,562)	1:A:43:PRO:HB3	1:A:43:PRO:HG2	85	0.38
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	40	0.38
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	80	0.38
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	31	0.38
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	65	0.38
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	18	0.38
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	2	0.38
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	9	0.38
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	18	0.38
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	26	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	32	0.38
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	42	0.38
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	65	0.38
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	13	0.38
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	19	0.38
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	25	0.38
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	33	0.38
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	46	0.38
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	50	0.38
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	55	0.38
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	59	0.38
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	60	0.38
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	63	0.38
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	67	0.38
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	70	0.38
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	63	0.38
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	68	0.38
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	23	0.38
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	25	0.38
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	7	0.38
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	7	0.38
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	7	0.38
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	21	0.38
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	21	0.38
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	21	0.38
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	44	0.38
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	44	0.38
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	44	0.38
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	62	0.38
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	62	0.38
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	62	0.38
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	63	0.38
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	63	0.38
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	63	0.38
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	8	0.38
(2,96)	1:A:17:ASP:HA	1:A:53:GLN:HE22	23	0.37
(2,96)	1:A:17:ASP:HA	1:A:53:GLN:HE22	66	0.37
(2,96)	1:A:17:ASP:HA	1:A:53:GLN:HE22	68	0.37
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	18	0.37
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	19	0.37
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	27	0.37
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	1	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	7	0.37
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	83	0.37
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	21	0.37
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	59	0.37
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	66	0.37
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	2	0.37
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	3	0.37
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	5	0.37
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	18	0.37
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	19	0.37
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	32	0.37
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	34	0.37
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	36	0.37
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	52	0.37
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	53	0.37
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	72	0.37
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	74	0.37
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	75	0.37
(1,602)	1:A:46:PRO:HB3	1:A:48:CYS:H	81	0.37
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	71	0.37
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	72	0.37
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	74	0.37
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	78	0.37
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	82	0.37
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	3	0.37
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	20	0.37
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	21	0.37
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	23	0.37
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	38	0.37
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	1	0.37
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	7	0.37
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	16	0.37
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	21	0.37
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	53	0.37
(1,361)	1:A:29:LYS:HD2	1:A:30:GLU:HA	9	0.37
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	19	0.37
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	36	0.37
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	48	0.37
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	1	0.37
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	35	0.37
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	28	0.37
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	29	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	36	0.37
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	40	0.37
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	48	0.37
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	49	0.37
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	65	0.37
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	66	0.37
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	68	0.37
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	84	0.37
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	63	0.37
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	77	0.37
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	16	0.37
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	16	0.37
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	16	0.37
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	17	0.37
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	17	0.37
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	17	0.37
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	43	0.37
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	43	0.37
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	43	0.37
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	53	0.37
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	53	0.37
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	53	0.37
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	65	0.37
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	65	0.37
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	65	0.37
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	38	0.37
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	66	0.37
(2,96)	1:A:17:ASP:HA	1:A:53:GLN:HE22	18	0.36
(2,96)	1:A:17:ASP:HA	1:A:53:GLN:HE22	21	0.36
(2,96)	1:A:17:ASP:HA	1:A:53:GLN:HE22	25	0.36
(2,96)	1:A:17:ASP:HA	1:A:53:GLN:HE22	53	0.36
(2,96)	1:A:17:ASP:HA	1:A:53:GLN:HE22	67	0.36
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	16	0.36
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	24	0.36
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	33	0.36
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	46	0.36
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	25	0.36
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	47	0.36
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	78	0.36
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	70	0.36
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	70	0.36
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	70	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	2	0.36
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	2	0.36
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	2	0.36
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	11	0.36
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	11	0.36
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	11	0.36
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	73	0.36
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	27	0.36
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	69	0.36
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	11	0.36
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	13	0.36
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	21	0.36
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	48	0.36
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	50	0.36
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	59	0.36
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	64	0.36
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	65	0.36
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	77	0.36
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	29	0.36
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	38	0.36
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	53	0.36
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	57	0.36
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	64	0.36
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	66	0.36
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	69	0.36
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	79	0.36
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	22	0.36
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	27	0.36
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	40	0.36
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	45	0.36
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	27	0.36
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	62	0.36
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	79	0.36
(1,361)	1:A:29:LYS:HD2	1:A:30:GLU:HA	8	0.36
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	56	0.36
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	21	0.36
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	45	0.36
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	20	0.36
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	57	0.36
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	61	0.36
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	75	0.36
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	76	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	79	0.36
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	85	0.36
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	45	0.36
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	77	0.36
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	74	0.36
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	68	0.36
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	3	0.36
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	3	0.36
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	3	0.36
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	8	0.36
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	8	0.36
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	8	0.36
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	26	0.36
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	26	0.36
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	26	0.36
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	64	0.36
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	64	0.36
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	64	0.36
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	75	0.36
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	75	0.36
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	75	0.36
(2,96)	1:A:17:ASP:HA	1:A:53:GLN:HE22	28	0.35
(2,96)	1:A:17:ASP:HA	1:A:53:GLN:HE22	36	0.35
(2,96)	1:A:17:ASP:HA	1:A:53:GLN:HE22	47	0.35
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	44	0.35
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	56	0.35
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	58	0.35
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	10	0.35
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	18	0.35
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	45	0.35
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	65	0.35
(2,16)	1:A:5:GLY:H	1:A:6:LEU:HB2	66	0.35
(2,111)	1:A:18:ARG:HG3	1:A:49:PHE:HZ	11	0.35
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	16	0.35
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	31	0.35
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	55	0.35
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	62	0.35
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	80	0.35
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	12	0.35
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	29	0.35
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	30	0.35
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	37	0.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	61	0.35
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	75	0.35
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	77	0.35
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	34	0.35
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	47	0.35
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	80	0.35
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	10	0.35
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	40	0.35
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	16	0.35
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	27	0.35
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	61	0.35
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	62	0.35
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	52	0.35
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	64	0.35
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	71	0.35
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	77	0.35
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	80	0.35
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	82	0.35
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	9	0.35
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	20	0.35
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	29	0.35
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	40	0.35
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	19	0.35
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	26	0.35
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	36	0.35
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	42	0.35
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	65	0.35
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	22	0.35
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	22	0.35
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	22	0.35
(2,96)	1:A:17:ASP:HA	1:A:53:GLN:HE22	20	0.34
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	6	0.34
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	42	0.34
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	4	0.34
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	34	0.34
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	22	0.34
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	80	0.34
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	81	0.34
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	81	0.34
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	21	0.34
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	21	0.34
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	21	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	44	0.34
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	44	0.34
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	44	0.34
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	30	0.34
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	56	0.34
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	79	0.34
(1,67)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:11:CYS:H	85	0.34
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	1	0.34
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	8	0.34
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	14	0.34
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	26	0.34
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	43	0.34
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	60	0.34
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	78	0.34
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	82	0.34
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	19	0.34
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	43	0.34
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	47	0.34
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	51	0.34
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	60	0.34
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	76	0.34
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	81	0.34
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	85	0.34
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	9	0.34
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	33	0.34
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	56	0.34
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	20	0.34
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	32	0.34
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	72	0.34
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	59	0.34
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	8	0.34
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	23	0.34
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	37	0.34
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	47	0.34
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	38	0.34
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	43	0.34
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	56	0.34
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	58	0.34
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	74	0.34
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	78	0.34
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	83	0.34
(1,264)	1:A:21:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HA	80	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	57	0.34
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	2	0.34
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	3	0.34
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	18	0.34
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	43	0.34
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	74	0.34
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	15	0.34
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	15	0.34
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	15	0.34
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	83	0.34
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	14	0.33
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	30	0.33
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	46	0.33
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	63	0.33
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	70	0.33
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	74	0.33
(2,16)	1:A:5:GLY:H	1:A:6:LEU:HB2	70	0.33
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	3	0.33
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	3	0.33
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	3	0.33
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	12	0.33
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	12	0.33
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	12	0.33
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	15	0.33
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	15	0.33
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	15	0.33
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	23	0.33
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	23	0.33
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	23	0.33
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	27	0.33
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	27	0.33
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	27	0.33
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	35	0.33
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	35	0.33
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	35	0.33
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	53	0.33
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	53	0.33
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	53	0.33
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	81	0.33
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	83	0.33
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	59	0.33
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	6	0.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	46	0.33
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	51	0.33
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	6	0.33
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	7	0.33
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	9	0.33
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	22	0.33
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	23	0.33
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	38	0.33
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	85	0.33
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	6	0.33
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	14	0.33
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	34	0.33
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	39	0.33
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	44	0.33
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	48	0.33
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	49	0.33
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	50	0.33
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	52	0.33
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	54	0.33
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	56	0.33
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	58	0.33
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	59	0.33
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	65	0.33
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	67	0.33
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	83	0.33
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	7	0.33
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	42	0.33
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	2	0.33
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	4	0.33
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	8	0.33
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	34	0.33
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	13	0.33
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	22	0.33
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	69	0.33
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	81	0.33
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	22	0.33
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	42	0.33
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	43	0.33
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	50	0.33
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	83	0.33
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	5	0.33
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	14	0.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	85	0.33
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	33	0.33
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	33	0.33
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	33	0.33
(2,96)	1:A:17:ASP:HA	1:A:53:GLN:HE22	19	0.32
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	1	0.32
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	24	0.32
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	38	0.32
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	17	0.32
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	20	0.32
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	29	0.32
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	56	0.32
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	57	0.32
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	71	0.32
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	43	0.32
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	43	0.32
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	43	0.32
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	69	0.32
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	69	0.32
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	69	0.32
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	79	0.32
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	79	0.32
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	79	0.32
(2,16)	1:A:5:GLY:H	1:A:6:LEU:HB2	9	0.32
(2,16)	1:A:5:GLY:H	1:A:6:LEU:HB2	26	0.32
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	4	0.32
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	4	0.32
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	4	0.32
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	39	0.32
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	39	0.32
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	39	0.32
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	41	0.32
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	41	0.32
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	41	0.32
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	50	0.32
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	50	0.32
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	50	0.32
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	16	0.32
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	24	0.32
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	42	0.32
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	44	0.32
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	47	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	57	0.32
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	58	0.32
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	66	0.32
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	73	0.32
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	80	0.32
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	1	0.32
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	2	0.32
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	22	0.32
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	23	0.32
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	24	0.32
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	27	0.32
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	33	0.32
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	36	0.32
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	37	0.32
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	45	0.32
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	46	0.32
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	2	0.32
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	22	0.32
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	23	0.32
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	26	0.32
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	27	0.32
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	35	0.32
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	10	0.32
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	15	0.32
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	19	0.32
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	25	0.32
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	12	0.32
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	25	0.32
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	35	0.32
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	38	0.32
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	66	0.32
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	13	0.32
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	25	0.32
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	39	0.32
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	75	0.32
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	11	0.32
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	82	0.32
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	30	0.32
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	30	0.32
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	30	0.32
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	59	0.32
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	59	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	59	0.32
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	47	0.31
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	66	0.31
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	68	0.31
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	74	0.31
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	40	0.31
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	55	0.31
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	61	0.31
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	64	0.31
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	68	0.31
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	69	0.31
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	72	0.31
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	2	0.31
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	2	0.31
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	2	0.31
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	19	0.31
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	19	0.31
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	19	0.31
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	23	0.31
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	23	0.31
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	23	0.31
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	37	0.31
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	37	0.31
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	37	0.31
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	62	0.31
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	62	0.31
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	62	0.31
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	48	0.31
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	20	0.31
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	33	0.31
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	39	0.31
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	81	0.31
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	83	0.31
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	5	0.31
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	8	0.31
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	11	0.31
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	15	0.31
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	16	0.31
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	18	0.31
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	21	0.31
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	28	0.31
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	30	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	31	0.31
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	32	0.31
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	35	0.31
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	55	0.31
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	62	0.31
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	63	0.31
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	70	0.31
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	10	0.31
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	13	0.31
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	16	0.31
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	30	0.31
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	32	0.31
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	44	0.31
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	54	0.31
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	73	0.31
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	24	0.31
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	30	0.31
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	57	0.31
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	77	0.31
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	83	0.31
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	26	0.31
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	42	0.31
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	4	0.31
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	29	0.31
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	50	0.31
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	85	0.31
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	73	0.31
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	17	0.31
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	54	0.31
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	73	0.31
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	1	0.31
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	1	0.31
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	1	0.31
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	46	0.31
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	46	0.31
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	46	0.31
(2,96)	1:A:17:ASP:HA	1:A:53:GLN:HE22	6	0.3
(2,96)	1:A:17:ASP:HA	1:A:53:GLN:HE22	31	0.3
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	8	0.3
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	24	0.3
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	26	0.3
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	36	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	43	0.3
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	44	0.3
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	67	0.3
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	77	0.3
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	78	0.3
(2,23)	1:A:8:ALA:H	1:A:12:ALA:HA	21	0.3
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	5	0.3
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	5	0.3
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	5	0.3
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	6	0.3
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	6	0.3
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	6	0.3
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	12	0.3
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	12	0.3
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	12	0.3
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	13	0.3
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	13	0.3
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	13	0.3
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	14	0.3
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	14	0.3
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	14	0.3
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	15	0.3
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	15	0.3
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	15	0.3
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	26	0.3
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	26	0.3
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	26	0.3
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	32	0.3
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	32	0.3
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	32	0.3
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	37	0.3
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	37	0.3
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	37	0.3
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	39	0.3
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	39	0.3
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	39	0.3
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	47	0.3
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	47	0.3
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	47	0.3
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	50	0.3
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	50	0.3
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	50	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	81	0.3
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	8	0.3
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	8	0.3
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	8	0.3
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	53	0.3
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	67	0.3
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	26	0.3
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	29	0.3
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	40	0.3
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	83	0.3
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	10	0.3
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	40	0.3
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	45	0.3
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	3	0.3
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	12	0.3
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	17	0.3
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	25	0.3
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	26	0.3
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	41	0.3
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	42	0.3
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	73	0.3
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	84	0.3
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	3	0.3
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	4	0.3
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	8	0.3
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	14	0.3
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	45	0.3
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	72	0.3
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	18	0.3
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	41	0.3
(1,361)	1:A:29:LYS:HD2	1:A:30:GLU:HA	63	0.3
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	65	0.3
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	20	0.3
(1,280)	1:A:23:TYR:HA	1:A:24:PRO:HD2	72	0.3
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	33	0.3
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	78	0.3
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	1	0.3
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	28	0.3
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	45	0.3
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	70	0.3
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	39	0.3
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	3	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	38	0.29
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	17	0.29
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	26	0.29
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	28	0.29
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	60	0.29
(2,237)	1:A:33:ASN:H	1:A:34:ARG:HG3	72	0.29
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	7	0.29
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	10	0.29
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	16	0.29
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	30	0.29
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	37	0.29
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	42	0.29
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	52	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	1	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	1	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	1	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	4	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	4	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	4	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	7	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	7	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	7	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	9	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	9	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	9	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	16	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	16	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	16	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	18	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	18	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	18	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	21	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	21	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	21	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	27	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	27	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	27	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	28	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	28	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	28	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	35	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	35	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	35	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	45	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	45	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	45	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	51	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	51	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	51	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	53	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	53	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	53	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	62	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	62	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	62	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	65	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	65	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	65	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	76	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	76	0.29
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	76	0.29
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	12	0.29
(1,610)	1:A:47:TRP:H	1:A:48:CYS:HB2	54	0.29
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	7	0.29
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	9	0.29
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	10	0.29
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	13	0.29
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	68	0.29
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	6	0.29
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	31	0.29
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	49	0.29
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	59	0.29
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	74	0.29
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	3	0.29
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	15	0.29
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	44	0.29
(1,361)	1:A:29:LYS:HD2	1:A:30:GLU:HA	7	0.29
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	46	0.29
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	9	0.29
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	16	0.29
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	26	0.29
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	42	0.29
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	46	0.29
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	55	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	61	0.29
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	62	0.29
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	10	0.29
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	10	0.29
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	10	0.29
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	52	0.29
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	52	0.29
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	52	0.29
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	2	0.28
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	13	0.28
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	5	0.28
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	9	0.28
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	15	0.28
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	84	0.28
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	4	0.28
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	8	0.28
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	9	0.28
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	14	0.28
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	21	0.28
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	28	0.28
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	31	0.28
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	33	0.28
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	35	0.28
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	41	0.28
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	48	0.28
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	59	0.28
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	76	0.28
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	3	0.28
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	3	0.28
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	3	0.28
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	11	0.28
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	11	0.28
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	11	0.28
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	30	0.28
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	30	0.28
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	30	0.28
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	31	0.28
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	31	0.28
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	31	0.28
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	34	0.28
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	34	0.28
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	34	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	42	0.28
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	42	0.28
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	42	0.28
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	54	0.28
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	54	0.28
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	54	0.28
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	83	0.28
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	83	0.28
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	83	0.28
(1,485)	1:A:38:PHE:HZ	1:A:39:ASP:HA	4	0.28
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	1	0.28
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	5	0.28
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	11	0.28
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	12	0.28
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	24	0.28
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	62	0.28
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	61	0.28
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	1	0.28
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	30	0.28
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	67	0.28
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	69	0.28
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	33	0.28
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	78	0.28
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	53	0.28
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	59	0.28
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	10	0.28
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	24	0.28
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	44	0.28
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	45	0.28
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	52	0.28
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	71	0.28
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	32	0.28
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	32	0.28
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	32	0.28
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	4	0.27
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	17	0.27
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	31	0.27
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	39	0.27
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	58	0.27
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	62	0.27
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	80	0.27
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	8	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	1	0.27
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	2	0.27
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	3	0.27
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	6	0.27
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	11	0.27
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	12	0.27
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	19	0.27
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	23	0.27
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	27	0.27
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	32	0.27
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	49	0.27
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	50	0.27
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	53	0.27
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	54	0.27
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	58	0.27
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	62	0.27
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	66	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	8	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	8	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	8	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	10	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	10	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	10	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	20	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	20	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	20	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	24	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	24	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	24	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	25	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	25	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	25	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	36	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	36	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	36	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	38	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	38	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	38	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	40	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	40	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	40	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	44	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	44	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	44	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	52	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	52	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	52	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	59	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	59	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	59	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	60	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	60	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	60	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	61	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	61	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	61	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	71	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	71	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	71	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	84	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	84	0.27
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	84	0.27
(2,16)	1:A:5:GLY:H	1:A:6:LEU:HB2	28	0.27
(2,16)	1:A:5:GLY:H	1:A:6:LEU:HB2	64	0.27
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	63	0.27
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	78	0.27
(1,67)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:11:CYS:H	47	0.27
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	39	0.27
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	41	0.27
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	14	0.27
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	5	0.27
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	13	0.27
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	24	0.27
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	31	0.27
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	49	0.27
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	22	0.27
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	40	0.27
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	70	0.27
(1,264)	1:A:21:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HA	82	0.27
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	6	0.27
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	7	0.27
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	14	0.27
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	15	0.27
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	54	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	76	0.27
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	44	0.27
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	59	0.27
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	63	0.27
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	64	0.27
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	14	0.27
(2,96)	1:A:17:ASP:HA	1:A:53:GLN:HE22	10	0.26
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	11	0.26
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	56	0.26
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	5	0.26
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	13	0.26
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	15	0.26
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	18	0.26
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	25	0.26
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	34	0.26
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	45	0.26
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	51	0.26
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	60	0.26
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	73	0.26
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	84	0.26
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	29	0.26
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	29	0.26
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	29	0.26
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	33	0.26
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	33	0.26
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	33	0.26
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	41	0.26
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	41	0.26
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	41	0.26
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	48	0.26
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	48	0.26
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	48	0.26
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	49	0.26
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	49	0.26
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	49	0.26
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	57	0.26
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	57	0.26
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	57	0.26
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	64	0.26
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	64	0.26
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	64	0.26
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	68	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	68	0.26
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	68	0.26
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	72	0.26
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	72	0.26
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	72	0.26
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	73	0.26
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	73	0.26
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	73	0.26
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	82	0.26
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	82	0.26
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	82	0.26
(2,185)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HB3	66	0.26
(1,51)	1:A:9:ASN:HA	1:A:12:ALA:H	85	0.26
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	21	0.26
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	25	0.26
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	38	0.26
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	9	0.26
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	11	0.26
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	25	0.26
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	29	0.26
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	44	0.26
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	7	0.26
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	32	0.26
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	35	0.26
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	58	0.26
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	9	0.26
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	11	0.26
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	59	0.26
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	63	0.26
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	73	0.26
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	59	0.26
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	15	0.26
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	57	0.26
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	60	0.26
(1,26)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:H	16	0.26
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	30	0.26
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	66	0.26
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	80	0.26
(1,174)	1:A:17:ASP:HB3	1:A:18:ARG:H	62	0.26
(1,103)	1:A:13:VAL:HB	1:A:49:PHE:HD2	38	0.26
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	12	0.25
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	15	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	28	0.25
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	66	0.25
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	31	0.25
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	39	0.25
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	45	0.25
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	62	0.25
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	38	0.25
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	39	0.25
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	47	0.25
(2,23)	1:A:8:ALA:H	1:A:12:ALA:HA	53	0.25
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	26	0.25
(1,73)	1:A:11:CYS:H	1:A:12:ALA:H	83	0.25
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	10	0.25
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	31	0.25
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	37	0.25
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	14	0.25
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	44	0.25
(1,67)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:11:CYS:H	84	0.25
(1,526)	1:A:41:ARG:HB2	1:A:41:ARG:HD2	56	0.25
(1,526)	1:A:41:ARG:HB2	1:A:41:ARG:HD3	56	0.25
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	18	0.25
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	19	0.25
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	47	0.25
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	1	0.25
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	2	0.25
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	4	0.25
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	5	0.25
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	6	0.25
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	7	0.25
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	10	0.25
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	12	0.25
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	14	0.25
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	16	0.25
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	18	0.25
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	19	0.25
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	23	0.25
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	26	0.25
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	27	0.25
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	30	0.25
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	32	0.25
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	34	0.25
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	37	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	42	0.25
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	53	0.25
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	65	0.25
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	71	0.25
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	82	0.25
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	83	0.25
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	6	0.25
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	81	0.25
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	46	0.25
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	57	0.25
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	70	0.25
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	71	0.25
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	30	0.25
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	49	0.25
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	71	0.25
(1,264)	1:A:21:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HA	79	0.25
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	23	0.25
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	56	0.25
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	58	0.25
(1,230)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:49:PHE:HB3	71	0.25
(1,230)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:49:PHE:HB3	71	0.25
(1,230)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:49:PHE:HB3	71	0.25
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	13	0.25
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	5	0.24
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	41	0.24
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	7	0.24
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	38	0.24
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	41	0.24
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	68	0.24
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	73	0.24
(2,230)	1:A:31:CYS:HA	1:A:38:PHE:HE1	65	0.24
(2,23)	1:A:8:ALA:H	1:A:12:ALA:HA	76	0.24
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	22	0.24
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	22	0.24
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	22	0.24
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	3	0.24
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	5	0.24
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	11	0.24
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	15	0.24
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	21	0.24
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	24	0.24
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	27	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	38	0.24
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	39	0.24
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	50	0.24
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	51	0.24
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	56	0.24
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	66	0.24
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	69	0.24
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	71	0.24
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	79	0.24
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	80	0.24
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	41	0.24
(1,67)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:11:CYS:H	36	0.24
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	15	0.24
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	64	0.24
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	3	0.24
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	21	0.24
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	22	0.24
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	24	0.24
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	35	0.24
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	38	0.24
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	40	0.24
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	41	0.24
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	45	0.24
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	85	0.24
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	12	0.24
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	64	0.24
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	8	0.24
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	43	0.24
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	61	0.24
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	77	0.24
(1,329)	1:A:28:PRO:HA	1:A:30:GLU:H	31	0.24
(1,329)	1:A:28:PRO:HA	1:A:30:GLU:H	33	0.24
(1,329)	1:A:28:PRO:HA	1:A:30:GLU:H	59	0.24
(1,305)	1:A:26:VAL:H	1:A:26:VAL:HB	43	0.24
(1,305)	1:A:26:VAL:H	1:A:26:VAL:HB	58	0.24
(1,305)	1:A:26:VAL:H	1:A:26:VAL:HB	69	0.24
(1,305)	1:A:26:VAL:H	1:A:26:VAL:HB	83	0.24
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	3	0.24
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	31	0.24
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	73	0.24
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	28	0.24
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	30	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	1	0.24
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	22	0.24
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	43	0.24
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	48	0.24
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	8	0.24
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	40	0.24
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	51	0.24
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	78	0.24
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	79	0.24
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	80	0.24
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	42	0.23
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	10	0.23
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	13	0.23
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	49	0.23
(2,186)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HG2	73	0.23
(2,16)	1:A:5:GLY:H	1:A:6:LEU:HB2	17	0.23
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	22	0.23
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	22	0.23
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	22	0.23
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	33	0.23
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	75	0.23
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	2	0.23
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	4	0.23
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	6	0.23
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	16	0.23
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	17	0.23
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	68	0.23
(1,677)	1:A:52:LEU:HA	1:A:52:LEU:HG	62	0.23
(1,67)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:11:CYS:H	34	0.23
(1,67)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:11:CYS:H	50	0.23
(1,67)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:11:CYS:H	61	0.23
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	9	0.23
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	14	0.23
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	15	0.23
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	20	0.23
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	21	0.23
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	32	0.23
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	35	0.23
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	36	0.23
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	40	0.23
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	43	0.23
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	45	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	48	0.23
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	52	0.23
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	55	0.23
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	56	0.23
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	59	0.23
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	64	0.23
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	66	0.23
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	67	0.23
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	70	0.23
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	72	0.23
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	75	0.23
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	77	0.23
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	51	0.23
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	69	0.23
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	84	0.23
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	37	0.23
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	8	0.23
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	13	0.23
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	15	0.23
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	17	0.23
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	20	0.23
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	31	0.23
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	39	0.23
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	46	0.23
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	47	0.23
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	49	0.23
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	50	0.23
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	57	0.23
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	59	0.23
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	62	0.23
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	63	0.23
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	66	0.23
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	70	0.23
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	72	0.23
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	73	0.23
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	74	0.23
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	75	0.23
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	76	0.23
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	77	0.23
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	79	0.23
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	42	0.23
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	69	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	76	0.23
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	8	0.23
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	31	0.23
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	33	0.23
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	59	0.23
(1,361)	1:A:29:LYS:HD2	1:A:30:GLU:HA	49	0.23
(1,361)	1:A:29:LYS:HD2	1:A:30:GLU:HA	51	0.23
(1,329)	1:A:28:PRO:HA	1:A:30:GLU:H	49	0.23
(1,305)	1:A:26:VAL:H	1:A:26:VAL:HB	28	0.23
(1,305)	1:A:26:VAL:H	1:A:26:VAL:HB	52	0.23
(1,305)	1:A:26:VAL:H	1:A:26:VAL:HB	56	0.23
(1,305)	1:A:26:VAL:H	1:A:26:VAL:HB	75	0.23
(1,305)	1:A:26:VAL:H	1:A:26:VAL:HB	76	0.23
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	24	0.23
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	44	0.23
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	64	0.23
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	27	0.23
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	47	0.23
(1,230)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:49:PHE:HB3	31	0.23
(1,230)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:49:PHE:HB3	31	0.23
(1,230)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:49:PHE:HB3	31	0.23
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	20	0.23
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	83	0.22
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	65	0.22
(2,23)	1:A:8:ALA:H	1:A:12:ALA:HA	37	0.22
(2,23)	1:A:8:ALA:H	1:A:12:ALA:HA	65	0.22
(2,23)	1:A:8:ALA:H	1:A:12:ALA:HA	68	0.22
(2,23)	1:A:8:ALA:H	1:A:12:ALA:HA	69	0.22
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG21	13	0.22
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG22	13	0.22
(2,155)	1:A:22:GLY:H	1:A:26:VAL:HG23	13	0.22
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	66	0.22
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	73	0.22
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	74	0.22
(1,83)	1:A:11:CYS:HB2	1:A:37:CYS:HB3	76	0.22
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	46	0.22
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	65	0.22
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	70	0.22
(1,67)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:11:CYS:H	54	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	1	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	2	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	3	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	4	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	5	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	6	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	7	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	8	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	10	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	11	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	12	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	13	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	16	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	17	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	18	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	19	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	22	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	23	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	24	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	25	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	26	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	27	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	28	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	29	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	30	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	31	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	33	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	34	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	37	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	38	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	39	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	41	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	42	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	44	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	46	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	47	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	49	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	50	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	51	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	53	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	54	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	57	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	58	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	60	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	61	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	62	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	63	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	65	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	68	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	69	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	71	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	73	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	74	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	76	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	78	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	79	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	80	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	81	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	82	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	83	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	84	0.22
(1,626)	1:A:47:TRP:HD1	1:A:47:TRP:HE3	85	0.22
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	27	0.22
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	34	0.22
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	65	0.22
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	72	0.22
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	34	0.22
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	60	0.22
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	65	0.22
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	33	0.22
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	36	0.22
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	43	0.22
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	51	0.22
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	54	0.22
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	55	0.22
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	56	0.22
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	60	0.22
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	67	0.22
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	68	0.22
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	69	0.22
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	78	0.22
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	80	0.22
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	81	0.22
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	49	0.22
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	79	0.22
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	82	0.22
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	13	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	35	0.22
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	54	0.22
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	62	0.22
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	73	0.22
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	80	0.22
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	81	0.22
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	29	0.22
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	31	0.22
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	33	0.22
(1,361)	1:A:29:LYS:HD2	1:A:30:GLU:HA	5	0.22
(1,329)	1:A:28:PRO:HA	1:A:30:GLU:H	24	0.22
(1,329)	1:A:28:PRO:HA	1:A:30:GLU:H	39	0.22
(1,329)	1:A:28:PRO:HA	1:A:30:GLU:H	54	0.22
(1,305)	1:A:26:VAL:H	1:A:26:VAL:HB	36	0.22
(1,305)	1:A:26:VAL:H	1:A:26:VAL:HB	48	0.22
(1,305)	1:A:26:VAL:H	1:A:26:VAL:HB	51	0.22
(1,305)	1:A:26:VAL:H	1:A:26:VAL:HB	66	0.22
(1,305)	1:A:26:VAL:H	1:A:26:VAL:HB	68	0.22
(1,305)	1:A:26:VAL:H	1:A:26:VAL:HB	74	0.22
(1,305)	1:A:26:VAL:H	1:A:26:VAL:HB	77	0.22
(1,305)	1:A:26:VAL:H	1:A:26:VAL:HB	80	0.22
(1,305)	1:A:26:VAL:H	1:A:26:VAL:HB	81	0.22
(1,305)	1:A:26:VAL:H	1:A:26:VAL:HB	84	0.22
(1,305)	1:A:26:VAL:H	1:A:26:VAL:HB	85	0.22
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	33	0.22
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	28	0.22
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	63	0.22
(1,26)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:H	53	0.22
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	36	0.22
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	46	0.22
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	52	0.22
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	85	0.22
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	6	0.22
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	48	0.22
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	9	0.22
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	9	0.22
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	9	0.22
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	29	0.22
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	29	0.22
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	29	0.22
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	37	0.22
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	37	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	37	0.22
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	68	0.22
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	68	0.22
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	68	0.22
(1,187)	1:A:18:ARG:HA	1:A:49:PHE:HA	82	0.22
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	67	0.22
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	33	0.21
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	44	0.21
(2,48)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HE	45	0.21
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	11	0.21
(2,23)	1:A:8:ALA:H	1:A:12:ALA:HA	83	0.21
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	36	0.21
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	76	0.21
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	1	0.21
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	24	0.21
(1,73)	1:A:11:CYS:H	1:A:12:ALA:H	69	0.21
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	8	0.21
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	25	0.21
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	49	0.21
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	55	0.21
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	57	0.21
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	58	0.21
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	78	0.21
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	19	0.21
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	28	0.21
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	49	0.21
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	59	0.21
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	64	0.21
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	67	0.21
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	76	0.21
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	28	0.21
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	48	0.21
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	52	0.21
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	58	0.21
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	64	0.21
(1,447)	1:A:36:CYS:HB2	1:A:37:CYS:H	84	0.21
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	13	0.21
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	43	0.21
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	75	0.21
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	8	0.21
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	15	0.21
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	21	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	22	0.21
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	27	0.21
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	30	0.21
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	39	0.21
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	45	0.21
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	49	0.21
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	60	0.21
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	85	0.21
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	22	0.21
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	64	0.21
(1,329)	1:A:28:PRO:HA	1:A:30:GLU:H	45	0.21
(1,329)	1:A:28:PRO:HA	1:A:30:GLU:H	60	0.21
(1,329)	1:A:28:PRO:HA	1:A:30:GLU:H	71	0.21
(1,329)	1:A:28:PRO:HA	1:A:30:GLU:H	77	0.21
(1,305)	1:A:26:VAL:H	1:A:26:VAL:HB	78	0.21
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	33	0.21
(1,264)	1:A:21:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HA	57	0.21
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	7	0.21
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	20	0.21
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	82	0.21
(1,26)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:H	7	0.21
(1,26)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:H	39	0.21
(1,26)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:H	49	0.21
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	55	0.21
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	20	0.21
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	20	0.21
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	20	0.21
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	23	0.21
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	23	0.21
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	23	0.21
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	57	0.21
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	57	0.21
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	57	0.21
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	58	0.21
(1,215)	1:A:18:ARG:HD2	1:A:49:PHE:HA	80	0.21
(1,187)	1:A:18:ARG:HA	1:A:49:PHE:HA	85	0.21
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	2	0.21
(1,12)	1:A:4:VAL:H	1:A:4:VAL:HB	30	0.21
(1,100)	1:A:13:VAL:HA	1:A:52:LEU:HB2	41	0.21
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	63	0.2
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	73	0.2
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	2	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	52	0.2
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	58	0.2
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	58	0.2
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	58	0.2
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	75	0.2
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	75	0.2
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	75	0.2
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	6	0.2
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	14	0.2
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	16	0.2
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	42	0.2
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	48	0.2
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	52	0.2
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	68	0.2
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	78	0.2
(1,73)	1:A:11:CYS:H	1:A:12:ALA:H	21	0.2
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	14	0.2
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	18	0.2
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	19	0.2
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	20	0.2
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	23	0.2
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	28	0.2
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	29	0.2
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	30	0.2
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	40	0.2
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	41	0.2
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	47	0.2
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	48	0.2
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	60	0.2
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	82	0.2
(1,67)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:11:CYS:H	10	0.2
(1,67)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:11:CYS:H	19	0.2
(1,67)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:11:CYS:H	43	0.2
(1,67)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:11:CYS:H	73	0.2
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	18	0.2
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	25	0.2
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	32	0.2
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	35	0.2
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	38	0.2
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	61	0.2
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	70	0.2
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	75	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	78	0.2
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	79	0.2
(1,533)	1:A:42:ILE:H	1:A:42:ILE:HB	13	0.2
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	53	0.2
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	76	0.2
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	26	0.2
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	13	0.2
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	3	0.2
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	9	0.2
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	11	0.2
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	24	0.2
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	42	0.2
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	57	0.2
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	64	0.2
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	71	0.2
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	78	0.2
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	82	0.2
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	17	0.2
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	24	0.2
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	11	0.2
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	39	0.2
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	60	0.2
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	74	0.2
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	24	0.2
(1,329)	1:A:28:PRO:HA	1:A:30:GLU:H	65	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	1	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	2	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	3	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	4	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	5	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	6	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	7	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	8	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	9	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	10	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	11	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	12	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	13	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	14	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	15	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	16	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	17	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	18	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	19	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	20	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	21	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	22	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	23	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	24	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	25	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	26	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	27	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	28	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	29	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	30	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	31	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	32	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	33	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	34	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	35	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	36	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	37	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	38	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	39	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	40	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	41	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	42	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	43	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	44	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	45	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	46	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	47	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	48	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	49	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	50	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	51	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	52	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	53	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	54	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	55	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	56	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	57	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	58	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	59	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	60	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	61	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	62	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	63	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	64	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	65	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	66	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	67	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	68	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	69	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	70	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	71	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	72	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	73	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	74	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	75	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	76	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	77	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	78	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	79	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	80	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	81	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	82	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	83	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	84	0.2
(1,328)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HG3	85	0.2
(1,305)	1:A:26:VAL:H	1:A:26:VAL:HB	79	0.2
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	41	0.2
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	5	0.2
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	6	0.2
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	7	0.2
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	10	0.2
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	11	0.2
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	12	0.2
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	14	0.2
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	19	0.2
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	34	0.2
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	38	0.2
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	72	0.2
(1,264)	1:A:21:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HA	36	0.2
(1,264)	1:A:21:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HA	40	0.2
(1,264)	1:A:21:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HA	51	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	4	0.2
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	6	0.2
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	26	0.2
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	47	0.2
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	51	0.2
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	82	0.2
(1,24)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HA	48	0.2
(1,230)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:49:PHE:HB3	49	0.2
(1,230)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:49:PHE:HB3	49	0.2
(1,230)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:49:PHE:HB3	49	0.2
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	75	0.2
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	48	0.2
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	48	0.2
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	48	0.2
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	73	0.2
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	73	0.2
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	73	0.2
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	1	0.2
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	29	0.2
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	43	0.2
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	57	0.2
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	59	0.2
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	83	0.2
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	6	0.19
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	14	0.19
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	26	0.19
(2,48)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HE	7	0.19
(2,48)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HE	26	0.19
(2,48)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HE	30	0.19
(2,48)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HE	52	0.19
(2,48)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HE	73	0.19
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	12	0.19
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	25	0.19
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	15	0.19
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	56	0.19
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	56	0.19
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	56	0.19
(2,16)	1:A:5:GLY:H	1:A:6:LEU:HB2	39	0.19
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	43	0.19
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	58	0.19
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	13	0.19
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	26	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	35	0.19
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	36	0.19
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	52	0.19
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	63	0.19
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	64	0.19
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	72	0.19
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	75	0.19
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	76	0.19
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	77	0.19
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	85	0.19
(1,67)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:11:CYS:H	52	0.19
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	7	0.19
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	16	0.19
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	26	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	1	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	2	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	4	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	5	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	6	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	7	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	8	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	9	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	10	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	11	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	12	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	13	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	14	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	15	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	16	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	17	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	22	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	26	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	28	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	29	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	30	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	36	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	38	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	39	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	41	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	43	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	44	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	46	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	47	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	48	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	51	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	52	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	54	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	55	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	56	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	58	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	62	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	63	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	66	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	68	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	69	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	70	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	76	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	81	0.19
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	83	0.19
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	15	0.19
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	53	0.19
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	60	0.19
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	71	0.19
(1,533)	1:A:42:ILE:H	1:A:42:ILE:HB	4	0.19
(1,533)	1:A:42:ILE:H	1:A:42:ILE:HB	12	0.19
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	50	0.19
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	17	0.19
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	70	0.19
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	35	0.19
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	44	0.19
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	5	0.19
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	12	0.19
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	16	0.19
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	26	0.19
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	32	0.19
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	41	0.19
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	61	0.19
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	66	0.19
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	74	0.19
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	75	0.19
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	77	0.19
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	55	0.19
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	45	0.19
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	54	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	65	0.19
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	75	0.19
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	80	0.19
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	81	0.19
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	85	0.19
(1,305)	1:A:26:VAL:H	1:A:26:VAL:HB	46	0.19
(1,305)	1:A:26:VAL:H	1:A:26:VAL:HB	63	0.19
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	62	0.19
(1,299)	1:A:25:HIS:HB3	1:A:25:HIS:HD2	54	0.19
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	1	0.19
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	2	0.19
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	4	0.19
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	9	0.19
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	16	0.19
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	18	0.19
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	21	0.19
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	26	0.19
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	27	0.19
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	32	0.19
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	35	0.19
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	42	0.19
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	45	0.19
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	61	0.19
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	62	0.19
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	65	0.19
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	55	0.19
(1,264)	1:A:21:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HA	20	0.19
(1,264)	1:A:21:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HA	28	0.19
(1,264)	1:A:21:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HA	43	0.19
(1,264)	1:A:21:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HA	48	0.19
(1,264)	1:A:21:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HA	68	0.19
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	3	0.19
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	14	0.19
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	16	0.19
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	31	0.19
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	69	0.19
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	74	0.19
(1,245)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:22:GLY:H	15	0.19
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	37	0.19
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	21	0.19
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	57	0.19
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	18	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	36	0.19
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	47	0.19
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	49	0.19
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	74	0.19
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	7	0.19
(1,149)	1:A:16:LYS:HA	1:A:16:LYS:HD2	57	0.19
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	23	0.19
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	16	0.18
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	22	0.18
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	23	0.18
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	24	0.18
(2,48)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HE	63	0.18
(2,48)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HE	83	0.18
(2,48)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HE	85	0.18
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	3	0.18
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	4	0.18
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	50	0.18
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	83	0.18
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	9	0.18
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	26	0.18
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	30	0.18
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	45	0.18
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	47	0.18
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	54	0.18
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	56	0.18
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	1	0.18
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	9	0.18
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	22	0.18
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	32	0.18
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	33	0.18
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	43	0.18
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	44	0.18
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	45	0.18
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	61	0.18
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	83	0.18
(1,67)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:11:CYS:H	1	0.18
(1,67)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:11:CYS:H	7	0.18
(1,67)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:11:CYS:H	23	0.18
(1,67)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:11:CYS:H	25	0.18
(1,67)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:11:CYS:H	63	0.18
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	6	0.18
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	9	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	10	0.18
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	23	0.18
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	54	0.18
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	3	0.18
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	18	0.18
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	19	0.18
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	20	0.18
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	21	0.18
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	23	0.18
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	24	0.18
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	25	0.18
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	27	0.18
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	31	0.18
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	32	0.18
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	33	0.18
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	34	0.18
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	35	0.18
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	37	0.18
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	40	0.18
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	42	0.18
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	45	0.18
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	49	0.18
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	50	0.18
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	53	0.18
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	57	0.18
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	59	0.18
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	60	0.18
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	61	0.18
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	64	0.18
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	65	0.18
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	67	0.18
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	71	0.18
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	73	0.18
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	74	0.18
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	75	0.18
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	77	0.18
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	78	0.18
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	79	0.18
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	80	0.18
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	82	0.18
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	84	0.18
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	85	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	60	0.18
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	72	0.18
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	31	0.18
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	41	0.18
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	62	0.18
(1,533)	1:A:42:ILE:H	1:A:42:ILE:HB	25	0.18
(1,533)	1:A:42:ILE:H	1:A:42:ILE:HB	39	0.18
(1,533)	1:A:42:ILE:H	1:A:42:ILE:HB	41	0.18
(1,533)	1:A:42:ILE:H	1:A:42:ILE:HB	65	0.18
(1,533)	1:A:42:ILE:H	1:A:42:ILE:HB	80	0.18
(1,51)	1:A:9:ASN:HA	1:A:12:ALA:H	53	0.18
(1,51)	1:A:9:ASN:HA	1:A:12:ALA:H	65	0.18
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	29	0.18
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	57	0.18
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	84	0.18
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	28	0.18
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	67	0.18
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	68	0.18
(1,391)	1:A:32:ASN:H	1:A:34:ARG:H	63	0.18
(1,391)	1:A:32:ASN:H	1:A:34:ARG:H	67	0.18
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	82	0.18
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	1	0.18
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	7	0.18
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	25	0.18
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	29	0.18
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	44	0.18
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	47	0.18
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	50	0.18
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	65	0.18
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	76	0.18
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	64	0.18
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	5	0.18
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	9	0.18
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	47	0.18
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	82	0.18
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	70	0.18
(1,329)	1:A:28:PRO:HA	1:A:30:GLU:H	47	0.18
(1,329)	1:A:28:PRO:HA	1:A:30:GLU:H	80	0.18
(1,305)	1:A:26:VAL:H	1:A:26:VAL:HB	17	0.18
(1,305)	1:A:26:VAL:H	1:A:26:VAL:HB	55	0.18
(1,305)	1:A:26:VAL:H	1:A:26:VAL:HB	67	0.18
(1,305)	1:A:26:VAL:H	1:A:26:VAL:HB	70	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,305)	1:A:26:VAL:H	1:A:26:VAL:HB	82	0.18
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	73	0.18
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	8	0.18
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	13	0.18
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	23	0.18
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	25	0.18
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	37	0.18
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	39	0.18
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	47	0.18
(1,27)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HA	12	0.18
(1,264)	1:A:21:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HA	52	0.18
(1,264)	1:A:21:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HA	55	0.18
(1,264)	1:A:21:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HA	67	0.18
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	11	0.18
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	15	0.18
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	44	0.18
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	54	0.18
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	67	0.18
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	70	0.18
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	85	0.18
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	54	0.18
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	75	0.18
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	27	0.18
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	67	0.18
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	69	0.18
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	70	0.18
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	15	0.18
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	75	0.18
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	7	0.18
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	14	0.18
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	33	0.18
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	35	0.18
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	42	0.18
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	44	0.18
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	45	0.18
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	68	0.18
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	76	0.18
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	82	0.18
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	54	0.18
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	55	0.18
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	58	0.18
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	63	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	73	0.18
(1,100)	1:A:13:VAL:HA	1:A:52:LEU:HB2	66	0.18
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	1	0.17
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	30	0.17
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	45	0.17
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	47	0.17
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	48	0.17
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	54	0.17
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	55	0.17
(2,48)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HE	9	0.17
(2,48)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HE	23	0.17
(2,48)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HE	68	0.17
(2,278)	1:A:40:SER:HB2	1:A:47:TRP:HA	13	0.17
(2,23)	1:A:8:ALA:H	1:A:12:ALA:HA	12	0.17
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	16	0.17
(2,16)	1:A:5:GLY:H	1:A:6:LEU:HB2	37	0.17
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	1	0.17
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	22	0.17
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	36	0.17
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	44	0.17
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	80	0.17
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	7	0.17
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	34	0.17
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	42	0.17
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	54	0.17
(1,680)	1:A:52:LEU:HB2	1:A:52:LEU:HG	74	0.17
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	35	0.17
(1,677)	1:A:52:LEU:HA	1:A:52:LEU:HG	31	0.17
(1,67)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:11:CYS:H	32	0.17
(1,67)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:11:CYS:H	70	0.17
(1,67)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:11:CYS:H	74	0.17
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	1	0.17
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	14	0.17
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	18	0.17
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	30	0.17
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	32	0.17
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	42	0.17
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	44	0.17
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	47	0.17
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	61	0.17
(1,624)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HZ2	72	0.17
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	19	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	25	0.17
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	27	0.17
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	35	0.17
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	49	0.17
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	50	0.17
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	59	0.17
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	65	0.17
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	74	0.17
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	75	0.17
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	5	0.17
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	12	0.17
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	17	0.17
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	50	0.17
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	74	0.17
(1,533)	1:A:42:ILE:H	1:A:42:ILE:HB	3	0.17
(1,533)	1:A:42:ILE:H	1:A:42:ILE:HB	5	0.17
(1,533)	1:A:42:ILE:H	1:A:42:ILE:HB	8	0.17
(1,533)	1:A:42:ILE:H	1:A:42:ILE:HB	15	0.17
(1,533)	1:A:42:ILE:H	1:A:42:ILE:HB	28	0.17
(1,533)	1:A:42:ILE:H	1:A:42:ILE:HB	31	0.17
(1,533)	1:A:42:ILE:H	1:A:42:ILE:HB	66	0.17
(1,533)	1:A:42:ILE:H	1:A:42:ILE:HB	68	0.17
(1,533)	1:A:42:ILE:H	1:A:42:ILE:HB	84	0.17
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	13	0.17
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	36	0.17
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	39	0.17
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	66	0.17
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	17	0.17
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	55	0.17
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	61	0.17
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	62	0.17
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	68	0.17
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	79	0.17
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	46	0.17
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	63	0.17
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	84	0.17
(1,391)	1:A:32:ASN:H	1:A:34:ARG:H	51	0.17
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	5	0.17
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	11	0.17
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	16	0.17
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	29	0.17
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	55	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	61	0.17
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	4	0.17
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	10	0.17
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	18	0.17
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	23	0.17
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	37	0.17
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	38	0.17
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	53	0.17
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	56	0.17
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	58	0.17
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	68	0.17
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	49	0.17
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	13	0.17
(1,354)	1:A:29:LYS:HA	1:A:32:ASN:H	22	0.17
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	20	0.17
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	29	0.17
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	50	0.17
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	53	0.17
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	59	0.17
(1,264)	1:A:21:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HA	46	0.17
(1,264)	1:A:21:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HA	69	0.17
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	32	0.17
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	41	0.17
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	43	0.17
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	51	0.17
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	79	0.17
(1,25)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:HB3	31	0.17
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	21	0.17
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	32	0.17
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	59	0.17
(1,230)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:49:PHE:HB3	26	0.17
(1,230)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:49:PHE:HB3	26	0.17
(1,230)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:49:PHE:HB3	26	0.17
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	56	0.17
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	74	0.17
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	76	0.17
(1,215)	1:A:18:ARG:HD2	1:A:49:PHE:HA	56	0.17
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	2	0.17
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	19	0.17
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	22	0.17
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	30	0.17
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	37	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	40	0.17
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	48	0.17
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	52	0.17
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	54	0.17
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	77	0.17
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	78	0.17
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	85	0.17
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	16	0.17
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	22	0.17
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	37	0.17
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	40	0.17
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	42	0.17
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	46	0.17
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	52	0.17
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	81	0.17
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	82	0.17
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	46	0.16
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	52	0.16
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	81	0.16
(2,48)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HE	24	0.16
(2,48)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HE	37	0.16
(2,48)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HE	42	0.16
(2,48)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HE	43	0.16
(2,48)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HE	48	0.16
(2,48)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HE	54	0.16
(2,335)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HZ	33	0.16
(2,335)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HZ	42	0.16
(2,335)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HZ	52	0.16
(2,335)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HZ	63	0.16
(2,335)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HZ	73	0.16
(2,335)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HZ	83	0.16
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	79	0.16
(2,23)	1:A:8:ALA:H	1:A:12:ALA:HA	57	0.16
(2,23)	1:A:8:ALA:H	1:A:12:ALA:HA	72	0.16
(2,23)	1:A:8:ALA:H	1:A:12:ALA:HA	81	0.16
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	77	0.16
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	77	0.16
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	77	0.16
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	78	0.16
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	78	0.16
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	78	0.16
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	7	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	23	0.16
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	76	0.16
(1,73)	1:A:11:CYS:H	1:A:12:ALA:H	15	0.16
(1,73)	1:A:11:CYS:H	1:A:12:ALA:H	29	0.16
(1,73)	1:A:11:CYS:H	1:A:12:ALA:H	57	0.16
(1,73)	1:A:11:CYS:H	1:A:12:ALA:H	66	0.16
(1,73)	1:A:11:CYS:H	1:A:12:ALA:H	78	0.16
(1,677)	1:A:52:LEU:HA	1:A:52:LEU:HG	56	0.16
(1,67)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:11:CYS:H	24	0.16
(1,67)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:11:CYS:H	45	0.16
(1,67)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:11:CYS:H	71	0.16
(1,67)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:11:CYS:H	75	0.16
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	4	0.16
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	5	0.16
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	24	0.16
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	29	0.16
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	40	0.16
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	45	0.16
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	70	0.16
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	71	0.16
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	18	0.16
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	21	0.16
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	23	0.16
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	32	0.16
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	34	0.16
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	37	0.16
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	53	0.16
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	61	0.16
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	64	0.16
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	71	0.16
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	77	0.16
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	78	0.16
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	80	0.16
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	2	0.16
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	3	0.16
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	4	0.16
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	36	0.16
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	46	0.16
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	55	0.16
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	77	0.16
(1,533)	1:A:42:ILE:H	1:A:42:ILE:HB	2	0.16
(1,533)	1:A:42:ILE:H	1:A:42:ILE:HB	38	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,533)	1:A:42:ILE:H	1:A:42:ILE:HB	56	0.16
(1,526)	1:A:41:ARG:HB2	1:A:41:ARG:HD2	80	0.16
(1,526)	1:A:41:ARG:HB2	1:A:41:ARG:HD3	80	0.16
(1,51)	1:A:9:ASN:HA	1:A:12:ALA:H	32	0.16
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	1	0.16
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	9	0.16
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	15	0.16
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	18	0.16
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	19	0.16
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	20	0.16
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	23	0.16
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	24	0.16
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	34	0.16
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	37	0.16
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	43	0.16
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	47	0.16
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	50	0.16
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	52	0.16
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	61	0.16
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	63	0.16
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	67	0.16
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	70	0.16
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	72	0.16
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	73	0.16
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	85	0.16
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	17	0.16
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	15	0.16
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	20	0.16
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	26	0.16
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	30	0.16
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	37	0.16
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	40	0.16
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	46	0.16
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	48	0.16
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	69	0.16
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	70	0.16
(1,441)	1:A:36:CYS:H	1:A:36:CYS:HA	48	0.16
(1,441)	1:A:36:CYS:H	1:A:36:CYS:HA	51	0.16
(1,441)	1:A:36:CYS:H	1:A:36:CYS:HA	55	0.16
(1,441)	1:A:36:CYS:H	1:A:36:CYS:HA	67	0.16
(1,424)	1:A:34:ARG:HB2	1:A:34:ARG:HG3	17	0.16
(1,391)	1:A:32:ASN:H	1:A:34:ARG:H	55	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	9	0.16
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	12	0.16
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	15	0.16
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	20	0.16
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	22	0.16
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	26	0.16
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	32	0.16
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	39	0.16
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	52	0.16
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	57	0.16
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	71	0.16
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	81	0.16
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	2	0.16
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	6	0.16
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	14	0.16
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	17	0.16
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	19	0.16
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	20	0.16
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	28	0.16
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	34	0.16
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	40	0.16
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	43	0.16
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	48	0.16
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	51	0.16
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	52	0.16
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	55	0.16
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	63	0.16
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	69	0.16
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	70	0.16
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	79	0.16
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	84	0.16
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	29	0.16
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	72	0.16
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	73	0.16
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	74	0.16
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	77	0.16
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	78	0.16
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	81	0.16
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	85	0.16
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	39	0.16
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	15	0.16
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	22	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	40	0.16
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	57	0.16
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	83	0.16
(1,28)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HB3	17	0.16
(1,27)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:HA	13	0.16
(1,264)	1:A:21:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HA	29	0.16
(1,264)	1:A:21:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HA	61	0.16
(1,264)	1:A:21:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HA	70	0.16
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	59	0.16
(1,26)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:H	10	0.16
(1,230)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:49:PHE:HB3	6	0.16
(1,230)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:49:PHE:HB3	6	0.16
(1,230)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:49:PHE:HB3	6	0.16
(1,230)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:49:PHE:HB3	16	0.16
(1,230)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:49:PHE:HB3	16	0.16
(1,230)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:49:PHE:HB3	16	0.16
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	45	0.16
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	45	0.16
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	45	0.16
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	81	0.16
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	81	0.16
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	81	0.16
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	68	0.16
(1,187)	1:A:18:ARG:HA	1:A:49:PHE:HA	76	0.16
(1,187)	1:A:18:ARG:HA	1:A:49:PHE:HA	77	0.16
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	6	0.16
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	26	0.16
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	46	0.16
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	53	0.16
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	1	0.16
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	6	0.16
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	7	0.16
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	9	0.16
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	10	0.16
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	11	0.16
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	14	0.16
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	24	0.16
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	26	0.16
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	36	0.16
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	45	0.16
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	48	0.16
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	57	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	83	0.16
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	85	0.16
(1,100)	1:A:13:VAL:HA	1:A:52:LEU:HB2	38	0.16
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	7	0.15
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	9	0.15
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	36	0.15
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	43	0.15
(2,48)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HE	16	0.15
(2,48)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HE	33	0.15
(2,48)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HE	40	0.15
(2,48)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HE	57	0.15
(2,335)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HZ	6	0.15
(2,335)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HZ	43	0.15
(2,335)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HZ	48	0.15
(2,335)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HZ	81	0.15
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	43	0.15
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	48	0.15
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	67	0.15
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	69	0.15
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	76	0.15
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	83	0.15
(2,23)	1:A:8:ALA:H	1:A:12:ALA:HA	19	0.15
(2,23)	1:A:8:ALA:H	1:A:12:ALA:HA	40	0.15
(2,23)	1:A:8:ALA:H	1:A:12:ALA:HA	84	0.15
(2,186)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HG2	44	0.15
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	81	0.15
(2,144)	1:A:21:CYS:H	1:A:50:LYS:HB2	69	0.15
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	10	0.15
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	21	0.15
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	37	0.15
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	46	0.15
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	55	0.15
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	82	0.15
(1,73)	1:A:11:CYS:H	1:A:12:ALA:H	27	0.15
(1,73)	1:A:11:CYS:H	1:A:12:ALA:H	40	0.15
(1,73)	1:A:11:CYS:H	1:A:12:ALA:H	53	0.15
(1,73)	1:A:11:CYS:H	1:A:12:ALA:H	56	0.15
(1,73)	1:A:11:CYS:H	1:A:12:ALA:H	68	0.15
(1,73)	1:A:11:CYS:H	1:A:12:ALA:H	76	0.15
(1,73)	1:A:11:CYS:H	1:A:12:ALA:H	82	0.15
(1,677)	1:A:52:LEU:HA	1:A:52:LEU:HG	12	0.15
(1,677)	1:A:52:LEU:HA	1:A:52:LEU:HG	38	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,67)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:11:CYS:H	4	0.15
(1,67)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:11:CYS:H	5	0.15
(1,67)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:11:CYS:H	49	0.15
(1,67)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:11:CYS:H	67	0.15
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	2	0.15
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	3	0.15
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	12	0.15
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	17	0.15
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	19	0.15
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	20	0.15
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	33	0.15
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	34	0.15
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	38	0.15
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	57	0.15
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	59	0.15
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	72	0.15
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	73	0.15
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	80	0.15
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	82	0.15
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	3	0.15
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	10	0.15
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	15	0.15
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	20	0.15
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	22	0.15
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	24	0.15
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	26	0.15
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	29	0.15
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	30	0.15
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	31	0.15
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	33	0.15
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	38	0.15
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	40	0.15
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	42	0.15
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	45	0.15
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	51	0.15
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	54	0.15
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	57	0.15
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	63	0.15
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	67	0.15
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	69	0.15
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	70	0.15
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	73	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	79	0.15
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	81	0.15
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	82	0.15
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	84	0.15
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	85	0.15
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	8	0.15
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	39	0.15
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	56	0.15
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	66	0.15
(1,533)	1:A:42:ILE:H	1:A:42:ILE:HB	17	0.15
(1,533)	1:A:42:ILE:H	1:A:42:ILE:HB	62	0.15
(1,51)	1:A:9:ASN:HA	1:A:12:ALA:H	28	0.15
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	7	0.15
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	11	0.15
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	12	0.15
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	22	0.15
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	25	0.15
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	31	0.15
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	33	0.15
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	42	0.15
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	46	0.15
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	53	0.15
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	56	0.15
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	58	0.15
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	60	0.15
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	77	0.15
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	81	0.15
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	83	0.15
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	28	0.15
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	77	0.15
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	8	0.15
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	11	0.15
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	12	0.15
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	13	0.15
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	21	0.15
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	51	0.15
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	52	0.15
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	67	0.15
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	71	0.15
(1,441)	1:A:36:CYS:H	1:A:36:CYS:HA	52	0.15
(1,441)	1:A:36:CYS:H	1:A:36:CYS:HA	63	0.15
(1,424)	1:A:34:ARG:HB2	1:A:34:ARG:HG3	55	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,424)	1:A:34:ARG:HB2	1:A:34:ARG:HG3	67	0.15
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	85	0.15
(1,391)	1:A:32:ASN:H	1:A:34:ARG:H	17	0.15
(1,391)	1:A:32:ASN:H	1:A:34:ARG:H	48	0.15
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	19	0.15
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	23	0.15
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	30	0.15
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	37	0.15
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	38	0.15
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	40	0.15
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	46	0.15
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	53	0.15
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	79	0.15
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	85	0.15
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	36	0.15
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	67	0.15
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	72	0.15
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	71	0.15
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	8	0.15
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	35	0.15
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	42	0.15
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	61	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	1	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	2	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	3	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	4	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	5	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	6	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	7	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	8	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	9	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	10	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	11	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	12	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	13	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	14	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	15	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	16	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	17	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	18	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	19	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	20	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	21	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	22	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	23	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	24	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	25	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	26	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	27	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	28	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	29	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	30	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	31	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	32	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	33	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	34	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	35	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	36	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	37	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	38	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	39	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	40	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	41	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	42	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	43	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	44	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	45	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	46	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	47	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	48	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	49	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	50	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	51	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	52	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	53	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	54	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	55	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	56	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	57	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	58	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	59	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	60	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	61	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	62	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	63	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	64	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	65	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	66	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	67	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	68	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	69	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	70	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	71	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	72	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	73	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	74	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	75	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	76	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	77	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	78	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	79	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	80	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	81	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	82	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	83	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	84	0.15
(1,327)	1:A:28:PRO:HA	1:A:28:PRO:HB2	85	0.15
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	36	0.15
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	48	0.15
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	51	0.15
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	52	0.15
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	66	0.15
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	68	0.15
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	75	0.15
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	80	0.15
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	84	0.15
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	44	0.15
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	64	0.15
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	83	0.15
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	17	0.15
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	30	0.15
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	31	0.15
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	55	0.15
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	60	0.15
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	70	0.15
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	73	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,264)	1:A:21:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HA	63	0.15
(1,264)	1:A:21:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HA	77	0.15
(1,264)	1:A:21:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HA	84	0.15
(1,264)	1:A:21:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HA	85	0.15
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	27	0.15
(1,26)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:H	12	0.15
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	71	0.15
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	77	0.15
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	79	0.15
(1,230)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:49:PHE:HB3	18	0.15
(1,230)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:49:PHE:HB3	18	0.15
(1,230)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:49:PHE:HB3	18	0.15
(1,230)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:49:PHE:HB3	34	0.15
(1,230)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:49:PHE:HB3	34	0.15
(1,230)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:49:PHE:HB3	34	0.15
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	63	0.15
(1,187)	1:A:18:ARG:HA	1:A:49:PHE:HA	33	0.15
(1,187)	1:A:18:ARG:HA	1:A:49:PHE:HA	43	0.15
(1,187)	1:A:18:ARG:HA	1:A:49:PHE:HA	48	0.15
(1,187)	1:A:18:ARG:HA	1:A:49:PHE:HA	52	0.15
(1,187)	1:A:18:ARG:HA	1:A:49:PHE:HA	63	0.15
(1,187)	1:A:18:ARG:HA	1:A:49:PHE:HA	83	0.15
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	3	0.15
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	4	0.15
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	5	0.15
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	8	0.15
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	9	0.15
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	15	0.15
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	16	0.15
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	38	0.15
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	39	0.15
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	55	0.15
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	61	0.15
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	62	0.15
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	73	0.15
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	75	0.15
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	80	0.15
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	17	0.15
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	20	0.15
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	21	0.15
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	28	0.15
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	29	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	30	0.15
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	44	0.15
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	47	0.15
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	68	0.15
(1,12)	1:A:4:VAL:H	1:A:4:VAL:HB	35	0.15
(1,100)	1:A:13:VAL:HA	1:A:52:LEU:HB2	8	0.15
(1,100)	1:A:13:VAL:HA	1:A:52:LEU:HB2	11	0.15
(1,100)	1:A:13:VAL:HA	1:A:52:LEU:HB2	13	0.15
(1,100)	1:A:13:VAL:HA	1:A:52:LEU:HB2	28	0.15
(1,100)	1:A:13:VAL:HA	1:A:52:LEU:HB2	31	0.15
(1,100)	1:A:13:VAL:HA	1:A:52:LEU:HB2	58	0.15
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	10	0.14
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	37	0.14
(2,48)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HE	1	0.14
(2,48)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HE	10	0.14
(2,48)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HE	20	0.14
(2,48)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HE	21	0.14
(2,48)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HE	36	0.14
(2,48)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HE	47	0.14
(2,48)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HE	82	0.14
(2,335)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HZ	1	0.14
(2,335)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HZ	16	0.14
(2,335)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HZ	44	0.14
(2,335)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HZ	47	0.14
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	19	0.14
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	32	0.14
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	36	0.14
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	46	0.14
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	51	0.14
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	52	0.14
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	55	0.14
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	64	0.14
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	70	0.14
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	78	0.14
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	82	0.14
(2,23)	1:A:8:ALA:H	1:A:12:ALA:HA	41	0.14
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	50	0.14
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	74	0.14
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	74	0.14
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	74	0.14
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	80	0.14
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	80	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	80	0.14
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	19	0.14
(2,169)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:24:PRO:HD2	72	0.14
(2,169)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:24:PRO:HD3	72	0.14
(2,144)	1:A:21:CYS:H	1:A:50:LYS:HB2	67	0.14
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	64	0.14
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	85	0.14
(1,73)	1:A:11:CYS:H	1:A:12:ALA:H	11	0.14
(1,73)	1:A:11:CYS:H	1:A:12:ALA:H	41	0.14
(1,73)	1:A:11:CYS:H	1:A:12:ALA:H	77	0.14
(1,73)	1:A:11:CYS:H	1:A:12:ALA:H	81	0.14
(1,677)	1:A:52:LEU:HA	1:A:52:LEU:HG	11	0.14
(1,677)	1:A:52:LEU:HA	1:A:52:LEU:HG	39	0.14
(1,677)	1:A:52:LEU:HA	1:A:52:LEU:HG	59	0.14
(1,677)	1:A:52:LEU:HA	1:A:52:LEU:HG	80	0.14
(1,67)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:11:CYS:H	3	0.14
(1,67)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:11:CYS:H	20	0.14
(1,67)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:11:CYS:H	76	0.14
(1,67)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:11:CYS:H	81	0.14
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	8	0.14
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	13	0.14
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	22	0.14
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	25	0.14
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	27	0.14
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	28	0.14
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	31	0.14
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	36	0.14
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	37	0.14
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	41	0.14
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	49	0.14
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	60	0.14
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	64	0.14
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	65	0.14
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	67	0.14
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	74	0.14
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	75	0.14
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	85	0.14
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	1	0.14
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	2	0.14
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	4	0.14
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	7	0.14
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	9	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	14	0.14
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	16	0.14
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	36	0.14
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	39	0.14
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	44	0.14
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	47	0.14
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	55	0.14
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	56	0.14
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	62	0.14
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	66	0.14
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	68	0.14
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	76	0.14
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	83	0.14
(1,62)	1:A:10:GLN:HA	1:A:12:ALA:H	57	0.14
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	13	0.14
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	21	0.14
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	24	0.14
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	37	0.14
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	47	0.14
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	48	0.14
(1,533)	1:A:42:ILE:H	1:A:42:ILE:HB	11	0.14
(1,533)	1:A:42:ILE:H	1:A:42:ILE:HB	58	0.14
(1,533)	1:A:42:ILE:H	1:A:42:ILE:HB	85	0.14
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	28	0.14
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	44	0.14
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	64	0.14
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	71	0.14
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	75	0.14
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	76	0.14
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	58	0.14
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	3	0.14
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	5	0.14
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	9	0.14
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	14	0.14
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	16	0.14
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	22	0.14
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	31	0.14
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	36	0.14
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	41	0.14
(1,441)	1:A:36:CYS:H	1:A:36:CYS:HA	17	0.14
(1,441)	1:A:36:CYS:H	1:A:36:CYS:HA	28	0.14
(1,441)	1:A:36:CYS:H	1:A:36:CYS:HA	36	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,441)	1:A:36:CYS:H	1:A:36:CYS:HA	46	0.14
(1,441)	1:A:36:CYS:H	1:A:36:CYS:HA	84	0.14
(1,424)	1:A:34:ARG:HB2	1:A:34:ARG:HG3	63	0.14
(1,424)	1:A:34:ARG:HB2	1:A:34:ARG:HG3	70	0.14
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	36	0.14
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	71	0.14
(1,391)	1:A:32:ASN:H	1:A:34:ARG:H	46	0.14
(1,391)	1:A:32:ASN:H	1:A:34:ARG:H	60	0.14
(1,391)	1:A:32:ASN:H	1:A:34:ARG:H	70	0.14
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	2	0.14
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	6	0.14
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	41	0.14
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	42	0.14
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	48	0.14
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	49	0.14
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	72	0.14
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	76	0.14
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	46	0.14
(1,379)	1:A:31:CYS:HA	1:A:32:ASN:H	83	0.14
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	26	0.14
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	48	0.14
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	51	0.14
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	62	0.14
(1,354)	1:A:29:LYS:HA	1:A:32:ASN:H	3	0.14
(1,354)	1:A:29:LYS:HA	1:A:32:ASN:H	41	0.14
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	30	0.14
(1,352)	1:A:29:LYS:HA	1:A:29:LYS:HD2	72	0.14
(1,329)	1:A:28:PRO:HA	1:A:30:GLU:H	72	0.14
(1,329)	1:A:28:PRO:HA	1:A:30:GLU:H	81	0.14
(1,329)	1:A:28:PRO:HA	1:A:30:GLU:H	85	0.14
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	4	0.14
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	7	0.14
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	9	0.14
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	10	0.14
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	11	0.14
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	20	0.14
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	21	0.14
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	22	0.14
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	24	0.14
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	25	0.14
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	27	0.14
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	28	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	29	0.14
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	30	0.14
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	33	0.14
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	35	0.14
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	42	0.14
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	45	0.14
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	49	0.14
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	54	0.14
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	56	0.14
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	57	0.14
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	58	0.14
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	59	0.14
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	60	0.14
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	61	0.14
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	62	0.14
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	65	0.14
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	71	0.14
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	73	0.14
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	76	0.14
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	20	0.14
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	40	0.14
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	3	0.14
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	24	0.14
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	33	0.14
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	44	0.14
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	46	0.14
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	49	0.14
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	63	0.14
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	64	0.14
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	67	0.14
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	71	0.14
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	79	0.14
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	82	0.14
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	33	0.14
(1,26)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:H	29	0.14
(1,26)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:H	31	0.14
(1,245)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:22:GLY:H	80	0.14
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	60	0.14
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	61	0.14
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	72	0.14
(1,230)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:49:PHE:HB3	72	0.14
(1,230)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:49:PHE:HB3	72	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,230)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:49:PHE:HB3	72	0.14
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	50	0.14
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	36	0.14
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	36	0.14
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	36	0.14
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	15	0.14
(1,224)	1:A:19:VAL:HA	1:A:20:ASP:HB2	78	0.14
(1,215)	1:A:18:ARG:HD2	1:A:49:PHE:HA	17	0.14
(1,187)	1:A:18:ARG:HA	1:A:49:PHE:HA	42	0.14
(1,187)	1:A:18:ARG:HA	1:A:49:PHE:HA	68	0.14
(1,187)	1:A:18:ARG:HA	1:A:49:PHE:HA	75	0.14
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	10	0.14
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	12	0.14
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	17	0.14
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	28	0.14
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	51	0.14
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	56	0.14
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	60	0.14
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	63	0.14
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	64	0.14
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	65	0.14
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	69	0.14
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	70	0.14
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	71	0.14
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	84	0.14
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	33	0.14
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	43	0.14
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	75	0.14
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	80	0.14
(1,100)	1:A:13:VAL:HA	1:A:52:LEU:HB2	15	0.14
(1,100)	1:A:13:VAL:HA	1:A:52:LEU:HB2	36	0.14
(1,100)	1:A:13:VAL:HA	1:A:52:LEU:HB2	39	0.14
(1,100)	1:A:13:VAL:HA	1:A:52:LEU:HB2	56	0.14
(1,100)	1:A:13:VAL:HA	1:A:52:LEU:HB2	64	0.14
(1,100)	1:A:13:VAL:HA	1:A:52:LEU:HB2	80	0.14
(2,96)	1:A:17:ASP:HA	1:A:53:GLN:HE22	71	0.13
(2,49)	1:A:13:VAL:HB	1:A:19:VAL:H	34	0.13
(2,48)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HE	11	0.13
(2,48)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HE	14	0.13
(2,48)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HE	22	0.13
(2,48)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HE	29	0.13
(2,48)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HE	44	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,48)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HE	46	0.13
(2,48)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HE	55	0.13
(2,48)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HE	58	0.13
(2,48)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HE	81	0.13
(2,335)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HZ	7	0.13
(2,335)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HZ	14	0.13
(2,335)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HZ	22	0.13
(2,335)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HZ	30	0.13
(2,335)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HZ	37	0.13
(2,335)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HZ	54	0.13
(2,335)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HZ	68	0.13
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	6	0.13
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	14	0.13
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	17	0.13
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	18	0.13
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	23	0.13
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	37	0.13
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	44	0.13
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	47	0.13
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	50	0.13
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	53	0.13
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	56	0.13
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	63	0.13
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	72	0.13
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	74	0.13
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	75	0.13
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	77	0.13
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	81	0.13
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	85	0.13
(2,239)	1:A:34:ARG:HA	1:A:36:CYS:H	6	0.13
(2,239)	1:A:34:ARG:HA	1:A:36:CYS:H	14	0.13
(2,23)	1:A:8:ALA:H	1:A:12:ALA:HA	66	0.13
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	66	0.13
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	66	0.13
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	66	0.13
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	81	0.13
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	81	0.13
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	81	0.13
(2,189)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:28:PRO:HA	85	0.13
(2,189)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:28:PRO:HA	85	0.13
(2,189)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:28:PRO:HA	85	0.13
(2,186)	1:A:25:HIS:HE1	1:A:34:ARG:HG2	33	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,16)	1:A:5:GLY:H	1:A:6:LEU:HB2	71	0.13
(2,156)	1:A:22:GLY:H	1:A:48:CYS:HB2	83	0.13
(2,151)	1:A:21:CYS:HB2	1:A:49:PHE:H	57	0.13
(2,144)	1:A:21:CYS:H	1:A:50:LYS:HB2	51	0.13
(2,144)	1:A:21:CYS:H	1:A:50:LYS:HB2	70	0.13
(2,144)	1:A:21:CYS:H	1:A:50:LYS:HB2	74	0.13
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	11	0.13
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	15	0.13
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	61	0.13
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	71	0.13
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	79	0.13
(2,117)	1:A:18:ARG:HD2	1:A:47:TRP:HA	51	0.13
(1,73)	1:A:11:CYS:H	1:A:12:ALA:H	12	0.13
(1,73)	1:A:11:CYS:H	1:A:12:ALA:H	13	0.13
(1,73)	1:A:11:CYS:H	1:A:12:ALA:H	36	0.13
(1,73)	1:A:11:CYS:H	1:A:12:ALA:H	38	0.13
(1,73)	1:A:11:CYS:H	1:A:12:ALA:H	44	0.13
(1,73)	1:A:11:CYS:H	1:A:12:ALA:H	51	0.13
(1,73)	1:A:11:CYS:H	1:A:12:ALA:H	58	0.13
(1,73)	1:A:11:CYS:H	1:A:12:ALA:H	67	0.13
(1,677)	1:A:52:LEU:HA	1:A:52:LEU:HG	37	0.13
(1,67)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:11:CYS:H	11	0.13
(1,67)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:11:CYS:H	33	0.13
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	11	0.13
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	15	0.13
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	39	0.13
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	48	0.13
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	51	0.13
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	55	0.13
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	56	0.13
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	58	0.13
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	63	0.13
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	66	0.13
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	69	0.13
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	78	0.13
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	81	0.13
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	83	0.13
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	5	0.13
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	6	0.13
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	8	0.13
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	11	0.13
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	12	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	13	0.13
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	17	0.13
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	28	0.13
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	41	0.13
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	46	0.13
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	48	0.13
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	52	0.13
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	58	0.13
(1,62)	1:A:10:GLN:HA	1:A:12:ALA:H	68	0.13
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	6	0.13
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	14	0.13
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	23	0.13
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	43	0.13
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	52	0.13
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	68	0.13
(1,51)	1:A:9:ASN:HA	1:A:12:ALA:H	30	0.13
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	10	0.13
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	14	0.13
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	45	0.13
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	54	0.13
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	84	0.13
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	81	0.13
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	1	0.13
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	6	0.13
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	7	0.13
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	19	0.13
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	27	0.13
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	28	0.13
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	35	0.13
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	43	0.13
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	44	0.13
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	50	0.13
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	63	0.13
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	77	0.13
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	80	0.13
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	83	0.13
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	85	0.13
(1,441)	1:A:36:CYS:H	1:A:36:CYS:HA	68	0.13
(1,441)	1:A:36:CYS:H	1:A:36:CYS:HA	70	0.13
(1,424)	1:A:34:ARG:HB2	1:A:34:ARG:HG3	46	0.13
(1,422)	1:A:34:ARG:HA	1:A:35:GLY:H	34	0.13
(1,422)	1:A:34:ARG:HA	1:A:35:GLY:H	46	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,422)	1:A:34:ARG:HA	1:A:35:GLY:H	55	0.13
(1,422)	1:A:34:ARG:HA	1:A:35:GLY:H	63	0.13
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	5	0.13
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	11	0.13
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	55	0.13
(1,391)	1:A:32:ASN:H	1:A:34:ARG:H	36	0.13
(1,391)	1:A:32:ASN:H	1:A:34:ARG:H	49	0.13
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	3	0.13
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	14	0.13
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	17	0.13
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	27	0.13
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	47	0.13
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	50	0.13
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	62	0.13
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	73	0.13
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	25	0.13
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	30	0.13
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	36	0.13
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	69	0.13
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	78	0.13
(1,354)	1:A:29:LYS:HA	1:A:32:ASN:H	73	0.13
(1,329)	1:A:28:PRO:HA	1:A:30:GLU:H	74	0.13
(1,329)	1:A:28:PRO:HA	1:A:30:GLU:H	75	0.13
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	1	0.13
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	2	0.13
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	3	0.13
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	5	0.13
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	6	0.13
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	8	0.13
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	12	0.13
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	13	0.13
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	14	0.13
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	15	0.13
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	16	0.13
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	18	0.13
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	19	0.13
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	23	0.13
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	26	0.13
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	31	0.13
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	32	0.13
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	34	0.13
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	37	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	39	0.13
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	40	0.13
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	41	0.13
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	43	0.13
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	44	0.13
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	47	0.13
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	50	0.13
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	53	0.13
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	69	0.13
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	72	0.13
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	8	0.13
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	16	0.13
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	27	0.13
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	33	0.13
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	35	0.13
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	57	0.13
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	41	0.13
(1,264)	1:A:21:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HA	71	0.13
(1,264)	1:A:21:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HA	75	0.13
(1,26)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:H	4	0.13
(1,26)	1:A:5:GLY:HA2	1:A:6:LEU:H	34	0.13
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	40	0.13
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	40	0.13
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	40	0.13
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	42	0.13
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	42	0.13
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	42	0.13
(1,215)	1:A:18:ARG:HD2	1:A:49:PHE:HA	62	0.13
(1,187)	1:A:18:ARG:HA	1:A:49:PHE:HA	23	0.13
(1,187)	1:A:18:ARG:HA	1:A:49:PHE:HA	36	0.13
(1,187)	1:A:18:ARG:HA	1:A:49:PHE:HA	47	0.13
(1,187)	1:A:18:ARG:HA	1:A:49:PHE:HA	53	0.13
(1,187)	1:A:18:ARG:HA	1:A:49:PHE:HA	67	0.13
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	13	0.13
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	20	0.13
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	21	0.13
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	23	0.13
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	25	0.13
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	27	0.13
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	31	0.13
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	32	0.13
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	34	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	41	0.13
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	50	0.13
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	72	0.13
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	79	0.13
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	41	0.13
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	50	0.13
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	56	0.13
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	61	0.13
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	66	0.13
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	70	0.13
(1,100)	1:A:13:VAL:HA	1:A:52:LEU:HB2	5	0.13
(1,100)	1:A:13:VAL:HA	1:A:52:LEU:HB2	17	0.13
(1,100)	1:A:13:VAL:HA	1:A:52:LEU:HB2	34	0.13
(1,100)	1:A:13:VAL:HA	1:A:52:LEU:HB2	68	0.13
(1,100)	1:A:13:VAL:HA	1:A:52:LEU:HB2	83	0.13
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	20	0.12
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	29	0.12
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	40	0.12
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	85	0.12
(2,49)	1:A:13:VAL:HB	1:A:19:VAL:H	64	0.12
(2,48)	1:A:13:VAL:H	1:A:18:ARG:HE	6	0.12
(2,335)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HZ	9	0.12
(2,335)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HZ	24	0.12
(2,335)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HZ	26	0.12
(2,335)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HZ	45	0.12
(2,335)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HZ	46	0.12
(2,335)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HZ	55	0.12
(2,335)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HZ	85	0.12
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	1	0.12
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	2	0.12
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	5	0.12
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	21	0.12
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	24	0.12
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	27	0.12
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	28	0.12
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	34	0.12
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	35	0.12
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	40	0.12
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	49	0.12
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	58	0.12
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	61	0.12
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	71	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,239)	1:A:34:ARG:HA	1:A:36:CYS:H	19	0.12
(2,23)	1:A:8:ALA:H	1:A:12:ALA:HA	30	0.12
(2,23)	1:A:8:ALA:H	1:A:12:ALA:HA	73	0.12
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	61	0.12
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	73	0.12
(2,22)	1:A:7:SER:HB3	1:A:10:GLN:H	78	0.12
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	24	0.12
(2,16)	1:A:5:GLY:H	1:A:6:LEU:HB2	19	0.12
(2,151)	1:A:21:CYS:HB2	1:A:49:PHE:H	40	0.12
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	34	0.12
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	72	0.12
(2,123)	1:A:19:VAL:H	1:A:52:LEU:HA	22	0.12
(2,117)	1:A:18:ARG:HD2	1:A:47:TRP:HA	32	0.12
(2,117)	1:A:18:ARG:HD2	1:A:47:TRP:HA	50	0.12
(2,117)	1:A:18:ARG:HD2	1:A:47:TRP:HA	69	0.12
(1,90)	1:A:12:ALA:H	1:A:51:PRO:HA	80	0.12
(1,73)	1:A:11:CYS:H	1:A:12:ALA:H	1	0.12
(1,73)	1:A:11:CYS:H	1:A:12:ALA:H	64	0.12
(1,73)	1:A:11:CYS:H	1:A:12:ALA:H	80	0.12
(1,690)	1:A:53:GLN:HA	1:A:54:GLU:H	81	0.12
(1,677)	1:A:52:LEU:HA	1:A:52:LEU:HG	51	0.12
(1,67)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:11:CYS:H	8	0.12
(1,67)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:11:CYS:H	9	0.12
(1,67)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:11:CYS:H	12	0.12
(1,67)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:11:CYS:H	13	0.12
(1,67)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:11:CYS:H	42	0.12
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	35	0.12
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	46	0.12
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	62	0.12
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	68	0.12
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	77	0.12
(1,622)	1:A:47:TRP:HB2	1:A:47:TRP:HD1	43	0.12
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	1	0.12
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	10	0.12
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	11	0.12
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	16	0.12
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	45	0.12
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	58	0.12
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	80	0.12
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	1	0.12
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	6	0.12
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	7	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	9	0.12
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	10	0.12
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	14	0.12
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	16	0.12
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	18	0.12
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	21	0.12
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	22	0.12
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	24	0.12
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	25	0.12
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	26	0.12
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	29	0.12
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	30	0.12
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	37	0.12
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	42	0.12
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	43	0.12
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	44	0.12
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	45	0.12
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	47	0.12
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	48	0.12
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	50	0.12
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	52	0.12
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	53	0.12
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	54	0.12
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	55	0.12
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	63	0.12
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	65	0.12
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	68	0.12
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	70	0.12
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	73	0.12
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	77	0.12
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	81	0.12
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	82	0.12
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	83	0.12
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	85	0.12
(1,533)	1:A:42:ILE:H	1:A:42:ILE:HB	10	0.12
(1,533)	1:A:42:ILE:H	1:A:42:ILE:HB	53	0.12
(1,533)	1:A:42:ILE:H	1:A:42:ILE:HB	82	0.12
(1,51)	1:A:9:ASN:HA	1:A:12:ALA:H	26	0.12
(1,51)	1:A:9:ASN:HA	1:A:12:ALA:H	63	0.12
(1,51)	1:A:9:ASN:HA	1:A:12:ALA:H	68	0.12
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	5	0.12
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	62	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	74	0.12
(1,464)	1:A:37:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HZ	83	0.12
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	2	0.12
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	4	0.12
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	10	0.12
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	23	0.12
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	32	0.12
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	42	0.12
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	49	0.12
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	59	0.12
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	73	0.12
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	81	0.12
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	82	0.12
(1,450)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:50:LYS:HA	20	0.12
(1,450)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:50:LYS:HA	40	0.12
(1,450)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:50:LYS:HA	57	0.12
(1,450)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:50:LYS:HA	64	0.12
(1,450)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:50:LYS:HA	82	0.12
(1,441)	1:A:36:CYS:H	1:A:36:CYS:HA	43	0.12
(1,441)	1:A:36:CYS:H	1:A:36:CYS:HA	58	0.12
(1,441)	1:A:36:CYS:H	1:A:36:CYS:HA	75	0.12
(1,441)	1:A:36:CYS:H	1:A:36:CYS:HA	79	0.12
(1,441)	1:A:36:CYS:H	1:A:36:CYS:HA	85	0.12
(1,422)	1:A:34:ARG:HA	1:A:35:GLY:H	17	0.12
(1,422)	1:A:34:ARG:HA	1:A:35:GLY:H	67	0.12
(1,422)	1:A:34:ARG:HA	1:A:35:GLY:H	70	0.12
(1,410)	1:A:33:ASN:HA	1:A:36:CYS:H	51	0.12
(1,396)	1:A:32:ASN:HA	1:A:35:GLY:HA2	9	0.12
(1,391)	1:A:32:ASN:H	1:A:34:ARG:H	5	0.12
(1,391)	1:A:32:ASN:H	1:A:34:ARG:H	9	0.12
(1,391)	1:A:32:ASN:H	1:A:34:ARG:H	28	0.12
(1,391)	1:A:32:ASN:H	1:A:34:ARG:H	80	0.12
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	1	0.12
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	10	0.12
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	18	0.12
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	31	0.12
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	33	0.12
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	34	0.12
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	43	0.12
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	51	0.12
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	59	0.12
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	66	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	69	0.12
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	70	0.12
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	36	0.12
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	75	0.12
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	76	0.12
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	12	0.12
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	28	0.12
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	52	0.12
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	56	0.12
(1,361)	1:A:29:LYS:HD2	1:A:30:GLU:HA	26	0.12
(1,354)	1:A:29:LYS:HA	1:A:32:ASN:H	15	0.12
(1,329)	1:A:28:PRO:HA	1:A:30:GLU:H	78	0.12
(1,329)	1:A:28:PRO:HA	1:A:30:GLU:H	82	0.12
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	38	0.12
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	55	0.12
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	63	0.12
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	64	0.12
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	70	0.12
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	83	0.12
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	21	0.12
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	23	0.12
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	31	0.12
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	59	0.12
(1,297)	1:A:25:HIS:HA	1:A:25:HIS:HE1	54	0.12
(1,264)	1:A:21:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HA	17	0.12
(1,264)	1:A:21:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HA	74	0.12
(1,264)	1:A:21:CYS:HB3	1:A:49:PHE:HA	76	0.12
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	25	0.12
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	28	0.12
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	38	0.12
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	84	0.12
(1,230)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:49:PHE:HB3	44	0.12
(1,230)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:49:PHE:HB3	44	0.12
(1,230)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:49:PHE:HB3	44	0.12
(1,230)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:49:PHE:HB3	61	0.12
(1,230)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:49:PHE:HB3	61	0.12
(1,230)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:49:PHE:HB3	61	0.12
(1,23)	1:A:5:GLY:HA3	1:A:6:LEU:H	80	0.12
(1,229)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:21:CYS:HA	55	0.12
(1,229)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:21:CYS:HA	55	0.12
(1,229)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:21:CYS:HA	55	0.12
(1,215)	1:A:18:ARG:HD2	1:A:49:PHE:HA	28	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,215)	1:A:18:ARG:HD2	1:A:49:PHE:HA	66	0.12
(1,187)	1:A:18:ARG:HA	1:A:49:PHE:HA	1	0.12
(1,187)	1:A:18:ARG:HA	1:A:49:PHE:HA	6	0.12
(1,187)	1:A:18:ARG:HA	1:A:49:PHE:HA	37	0.12
(1,187)	1:A:18:ARG:HA	1:A:49:PHE:HA	46	0.12
(1,187)	1:A:18:ARG:HA	1:A:49:PHE:HA	54	0.12
(1,187)	1:A:18:ARG:HA	1:A:49:PHE:HA	55	0.12
(1,187)	1:A:18:ARG:HA	1:A:49:PHE:HA	74	0.12
(1,187)	1:A:18:ARG:HA	1:A:49:PHE:HA	78	0.12
(1,18)	1:A:4:VAL:HA	1:A:5:GLY:H	72	0.12
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	11	0.12
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	24	0.12
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	66	0.12
(1,156)	1:A:16:LYS:HB2	1:A:17:ASP:HA	81	0.12
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	5	0.12
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	13	0.12
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	15	0.12
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	51	0.12
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	53	0.12
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	67	0.12
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	69	0.12
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	74	0.12
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	76	0.12
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	77	0.12
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	78	0.12
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	79	0.12
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	84	0.12
(1,100)	1:A:13:VAL:HA	1:A:52:LEU:HB2	2	0.12
(1,100)	1:A:13:VAL:HA	1:A:52:LEU:HB2	59	0.12
(1,100)	1:A:13:VAL:HA	1:A:52:LEU:HB2	62	0.12
(1,100)	1:A:13:VAL:HA	1:A:52:LEU:HB2	70	0.12
(2,93)	1:A:16:LYS:HG2	1:A:17:ASP:HA	18	0.11
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	57	0.11
(2,79)	1:A:15:ALA:HA	1:A:49:PHE:HZ	68	0.11
(2,335)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HZ	21	0.11
(2,335)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HZ	29	0.11
(2,335)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HZ	35	0.11
(2,335)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HZ	36	0.11
(2,335)	1:A:47:TRP:HA	1:A:49:PHE:HZ	77	0.11
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	3	0.11
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	7	0.11
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	8	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	9	0.11
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	10	0.11
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	12	0.11
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	15	0.11
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	16	0.11
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	20	0.11
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	22	0.11
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	41	0.11
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	42	0.11
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	45	0.11
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	54	0.11
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	57	0.11
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	60	0.11
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	62	0.11
(2,297)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:47:TRP:HD1	66	0.11
(2,239)	1:A:34:ARG:HA	1:A:36:CYS:H	1	0.11
(2,239)	1:A:34:ARG:HA	1:A:36:CYS:H	4	0.11
(2,239)	1:A:34:ARG:HA	1:A:36:CYS:H	7	0.11
(2,239)	1:A:34:ARG:HA	1:A:36:CYS:H	26	0.11
(2,239)	1:A:34:ARG:HA	1:A:36:CYS:H	83	0.11
(2,231)	1:A:31:CYS:HA	1:A:48:CYS:HA	72	0.11
(2,23)	1:A:8:ALA:H	1:A:12:ALA:HA	56	0.11
(2,23)	1:A:8:ALA:H	1:A:12:ALA:HA	70	0.11
(2,228)	1:A:31:CYS:HA	1:A:36:CYS:H	49	0.11
(2,18)	1:A:5:GLY:H	1:A:10:GLN:HB3	65	0.11
(2,169)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:24:PRO:HD2	34	0.11
(2,169)	1:A:23:TYR:HE1	1:A:24:PRO:HD3	34	0.11
(2,151)	1:A:21:CYS:HB2	1:A:49:PHE:H	20	0.11
(2,151)	1:A:21:CYS:HB2	1:A:49:PHE:H	29	0.11
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	38	0.11
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	40	0.11
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	49	0.11
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	51	0.11
(2,135)	1:A:20:ASP:HB3	1:A:46:PRO:HA	57	0.11
(2,117)	1:A:18:ARG:HD2	1:A:47:TRP:HA	19	0.11
(2,117)	1:A:18:ARG:HD2	1:A:47:TRP:HA	34	0.11
(2,117)	1:A:18:ARG:HD2	1:A:47:TRP:HA	49	0.11
(2,117)	1:A:18:ARG:HD2	1:A:47:TRP:HA	53	0.11
(2,117)	1:A:18:ARG:HD2	1:A:47:TRP:HA	61	0.11
(2,117)	1:A:18:ARG:HD2	1:A:47:TRP:HA	67	0.11
(2,117)	1:A:18:ARG:HD2	1:A:47:TRP:HA	70	0.11
(2,117)	1:A:18:ARG:HD2	1:A:47:TRP:HA	71	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,117)	1:A:18:ARG:HD2	1:A:47:TRP:HA	75	0.11
(2,111)	1:A:18:ARG:HG3	1:A:49:PHE:HZ	50	0.11
(1,73)	1:A:11:CYS:H	1:A:12:ALA:H	5	0.11
(1,73)	1:A:11:CYS:H	1:A:12:ALA:H	14	0.11
(1,73)	1:A:11:CYS:H	1:A:12:ALA:H	16	0.11
(1,73)	1:A:11:CYS:H	1:A:12:ALA:H	17	0.11
(1,73)	1:A:11:CYS:H	1:A:12:ALA:H	20	0.11
(1,73)	1:A:11:CYS:H	1:A:12:ALA:H	28	0.11
(1,73)	1:A:11:CYS:H	1:A:12:ALA:H	49	0.11
(1,73)	1:A:11:CYS:H	1:A:12:ALA:H	52	0.11
(1,73)	1:A:11:CYS:H	1:A:12:ALA:H	55	0.11
(1,73)	1:A:11:CYS:H	1:A:12:ALA:H	61	0.11
(1,700)	1:A:54:GLU:HA	1:A:55:ALA:H	73	0.11
(1,68)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:52:LEU:H	64	0.11
(1,677)	1:A:52:LEU:HA	1:A:52:LEU:HG	69	0.11
(1,67)	1:A:10:GLN:HB3	1:A:11:CYS:H	17	0.11
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	21	0.11
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	50	0.11
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	53	0.11
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	76	0.11
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	79	0.11
(1,654)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:50:LYS:H	84	0.11
(1,62)	1:A:10:GLN:HA	1:A:12:ALA:H	40	0.11
(1,598)	1:A:46:PRO:HB2	1:A:49:PHE:HB2	20	0.11
(1,598)	1:A:46:PRO:HB2	1:A:49:PHE:HB3	20	0.11
(1,598)	1:A:46:PRO:HB2	1:A:49:PHE:HB2	61	0.11
(1,598)	1:A:46:PRO:HB2	1:A:49:PHE:HB3	61	0.11
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	7	0.11
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	9	0.11
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	26	0.11
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	29	0.11
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	30	0.11
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	63	0.11
(1,594)	1:A:46:PRO:HA	1:A:48:CYS:H	85	0.11
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	5	0.11
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	11	0.11
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	12	0.11
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	13	0.11
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	15	0.11
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	19	0.11
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	20	0.11
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	23	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	27	0.11
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	32	0.11
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	33	0.11
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	34	0.11
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	35	0.11
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	36	0.11
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	40	0.11
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	41	0.11
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	46	0.11
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	49	0.11
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	51	0.11
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	57	0.11
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	58	0.11
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	59	0.11
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	60	0.11
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	61	0.11
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	64	0.11
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	67	0.11
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	69	0.11
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	71	0.11
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	72	0.11
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	74	0.11
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	75	0.11
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	76	0.11
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	78	0.11
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	79	0.11
(1,558)	1:A:43:PRO:HA	1:A:44:GLY:H	84	0.11
(1,533)	1:A:42:ILE:H	1:A:42:ILE:HB	1	0.11
(1,533)	1:A:42:ILE:H	1:A:42:ILE:HB	7	0.11
(1,533)	1:A:42:ILE:H	1:A:42:ILE:HB	18	0.11
(1,533)	1:A:42:ILE:H	1:A:42:ILE:HB	33	0.11
(1,533)	1:A:42:ILE:H	1:A:42:ILE:HB	42	0.11
(1,533)	1:A:42:ILE:H	1:A:42:ILE:HB	46	0.11
(1,533)	1:A:42:ILE:H	1:A:42:ILE:HB	59	0.11
(1,533)	1:A:42:ILE:H	1:A:42:ILE:HB	73	0.11
(1,51)	1:A:9:ASN:HA	1:A:12:ALA:H	39	0.11
(1,51)	1:A:9:ASN:HA	1:A:12:ALA:H	57	0.11
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	4	0.11
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	8	0.11
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	21	0.11
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	35	0.11
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	59	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	69	0.11
(1,50)	1:A:9:ASN:HA	1:A:10:GLN:H	79	0.11
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	24	0.11
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	25	0.11
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	38	0.11
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	53	0.11
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	56	0.11
(1,458)	1:A:37:CYS:HB2	1:A:38:PHE:H	64	0.11
(1,450)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:50:LYS:HA	29	0.11
(1,450)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:50:LYS:HA	71	0.11
(1,450)	1:A:36:CYS:HB3	1:A:50:LYS:HA	79	0.11
(1,441)	1:A:36:CYS:H	1:A:36:CYS:HA	5	0.11
(1,441)	1:A:36:CYS:H	1:A:36:CYS:HA	20	0.11
(1,441)	1:A:36:CYS:H	1:A:36:CYS:HA	29	0.11
(1,441)	1:A:36:CYS:H	1:A:36:CYS:HA	56	0.11
(1,441)	1:A:36:CYS:H	1:A:36:CYS:HA	61	0.11
(1,441)	1:A:36:CYS:H	1:A:36:CYS:HA	69	0.11
(1,441)	1:A:36:CYS:H	1:A:36:CYS:HA	71	0.11
(1,441)	1:A:36:CYS:H	1:A:36:CYS:HA	76	0.11
(1,441)	1:A:36:CYS:H	1:A:36:CYS:HA	77	0.11
(1,441)	1:A:36:CYS:H	1:A:36:CYS:HA	80	0.11
(1,441)	1:A:36:CYS:H	1:A:36:CYS:HA	81	0.11
(1,441)	1:A:36:CYS:H	1:A:36:CYS:HA	82	0.11
(1,422)	1:A:34:ARG:HA	1:A:35:GLY:H	18	0.11
(1,422)	1:A:34:ARG:HA	1:A:35:GLY:H	19	0.11
(1,422)	1:A:34:ARG:HA	1:A:35:GLY:H	25	0.11
(1,422)	1:A:34:ARG:HA	1:A:35:GLY:H	72	0.11
(1,410)	1:A:33:ASN:HA	1:A:36:CYS:H	48	0.11
(1,391)	1:A:32:ASN:H	1:A:34:ARG:H	4	0.11
(1,391)	1:A:32:ASN:H	1:A:34:ARG:H	10	0.11
(1,391)	1:A:32:ASN:H	1:A:34:ARG:H	11	0.11
(1,391)	1:A:32:ASN:H	1:A:34:ARG:H	12	0.11
(1,391)	1:A:32:ASN:H	1:A:34:ARG:H	61	0.11
(1,391)	1:A:32:ASN:H	1:A:34:ARG:H	68	0.11
(1,391)	1:A:32:ASN:H	1:A:34:ARG:H	75	0.11
(1,391)	1:A:32:ASN:H	1:A:34:ARG:H	84	0.11
(1,391)	1:A:32:ASN:H	1:A:34:ARG:H	85	0.11
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	7	0.11
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	21	0.11
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	63	0.11
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	65	0.11
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	67	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	68	0.11
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	80	0.11
(1,380)	1:A:31:CYS:HA	1:A:33:ASN:H	83	0.11
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	51	0.11
(1,373)	1:A:30:GLU:HB3	1:A:33:ASN:H	68	0.11
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	21	0.11
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	32	0.11
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	38	0.11
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	76	0.11
(1,366)	1:A:30:GLU:H	1:A:31:CYS:HA	84	0.11
(1,361)	1:A:29:LYS:HD2	1:A:30:GLU:HA	85	0.11
(1,354)	1:A:29:LYS:HA	1:A:32:ASN:H	27	0.11
(1,354)	1:A:29:LYS:HA	1:A:32:ASN:H	44	0.11
(1,354)	1:A:29:LYS:HA	1:A:32:ASN:H	57	0.11
(1,354)	1:A:29:LYS:HA	1:A:32:ASN:H	62	0.11
(1,329)	1:A:28:PRO:HA	1:A:30:GLU:H	11	0.11
(1,314)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:31:CYS:H	58	0.11
(1,314)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:31:CYS:H	58	0.11
(1,314)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:31:CYS:H	58	0.11
(1,314)	1:A:26:VAL:HG11	1:A:31:CYS:H	83	0.11
(1,314)	1:A:26:VAL:HG12	1:A:31:CYS:H	83	0.11
(1,314)	1:A:26:VAL:HG13	1:A:31:CYS:H	83	0.11
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	17	0.11
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	46	0.11
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	67	0.11
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	79	0.11
(1,307)	1:A:26:VAL:HA	1:A:26:VAL:HB	82	0.11
(1,305)	1:A:26:VAL:H	1:A:26:VAL:HB	62	0.11
(1,305)	1:A:26:VAL:H	1:A:26:VAL:HB	64	0.11
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	13	0.11
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	22	0.11
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	37	0.11
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	41	0.11
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	53	0.11
(1,303)	1:A:25:HIS:HD2	1:A:34:ARG:HG2	76	0.11
(1,261)	1:A:21:CYS:HA	1:A:50:LYS:HE3	29	0.11
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	34	0.11
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	35	0.11
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	39	0.11
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	50	0.11
(1,244)	1:A:20:ASP:HB2	1:A:21:CYS:H	64	0.11
(1,230)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:49:PHE:HB3	54	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,230)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:49:PHE:HB3	54	0.11
(1,230)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:49:PHE:HB3	54	0.11
(1,215)	1:A:18:ARG:HD2	1:A:49:PHE:HA	38	0.11
(1,187)	1:A:18:ARG:HA	1:A:49:PHE:HA	22	0.11
(1,187)	1:A:18:ARG:HA	1:A:49:PHE:HA	28	0.11
(1,187)	1:A:18:ARG:HA	1:A:49:PHE:HA	40	0.11
(1,187)	1:A:18:ARG:HA	1:A:49:PHE:HA	44	0.11
(1,187)	1:A:18:ARG:HA	1:A:49:PHE:HA	45	0.11
(1,187)	1:A:18:ARG:HA	1:A:49:PHE:HA	50	0.11
(1,187)	1:A:18:ARG:HA	1:A:49:PHE:HA	84	0.11
(1,18)	1:A:4:VAL:HA	1:A:5:GLY:H	30	0.11
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	83	0.11
(1,145)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:ASP:HB3	85	0.11
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	2	0.11
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	3	0.11
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	8	0.11
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	12	0.11
(1,131)	1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ARG:H	65	0.11
(1,100)	1:A:13:VAL:HA	1:A:52:LEU:HB2	3	0.11
(1,100)	1:A:13:VAL:HA	1:A:52:LEU:HB2	19	0.11
(1,100)	1:A:13:VAL:HA	1:A:52:LEU:HB2	21	0.11
(1,100)	1:A:13:VAL:HA	1:A:52:LEU:HB2	43	0.11
(1,100)	1:A:13:VAL:HA	1:A:52:LEU:HB2	51	0.11
(1,100)	1:A:13:VAL:HA	1:A:52:LEU:HB2	57	0.11
(1,100)	1:A:13:VAL:HA	1:A:52:LEU:HB2	75	0.11
(1,100)	1:A:13:VAL:HA	1:A:52:LEU:HB2	76	0.11
(1,100)	1:A:13:VAL:HA	1:A:52:LEU:HB2	85	0.11

10 Dihedral-angle violation analysis (i)

No dihedral-angle restraints found