



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Jun 3, 2023 – 09:40 AM EDT

PDB ID : 2JUH  
BMRB ID : 15444  
Title : Solution structure of DNA binding domain of ngTRF1  
Authors : Lee, N.; Ko, S.  
Deposited on : 2007-08-27

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

---

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

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

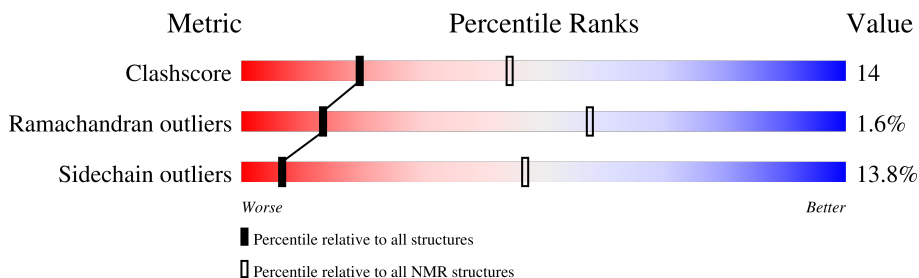
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*SOLUTION NMR*

The overall completeness of chemical shifts assignment is 81%.

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



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

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	121	

## 2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 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:581-A:608, A:616-A:633, A:641-A:659 (65)	0.54	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 5 clusters. No single-model clusters were found.

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

### 3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1802 atoms, of which 822 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Telomere binding protein TBP1.

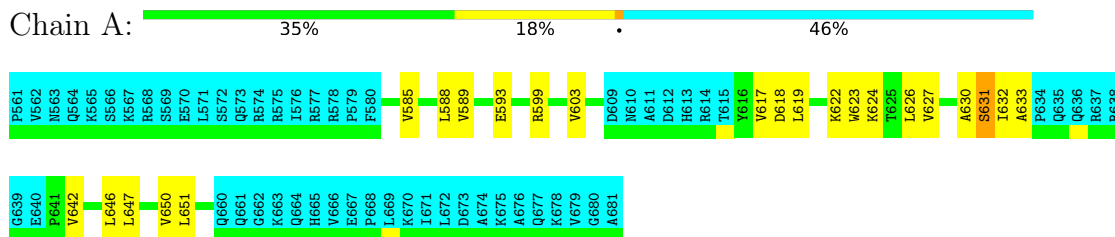
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	121	1802	612	822	192	175	1	0

## 4 Residue-property plots

### 4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

- Molecule 1: Telomere binding protein TBP1

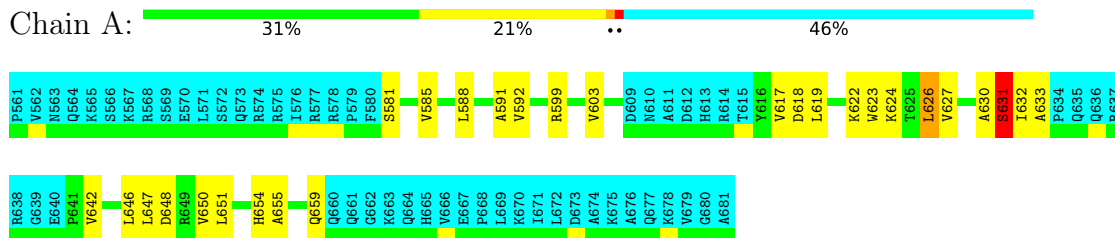


### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

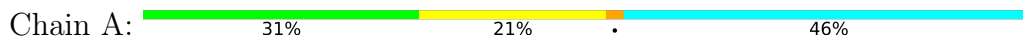
#### 4.2.1 Score per residue for model 1 (medoid)

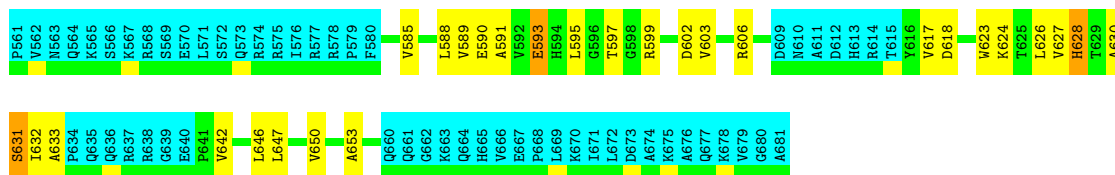
- Molecule 1: Telomere binding protein TBP1



#### 4.2.2 Score per residue for model 2

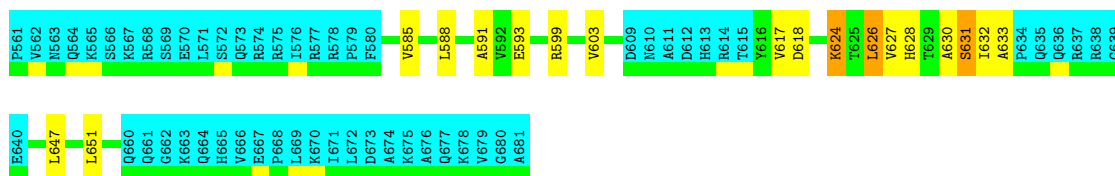
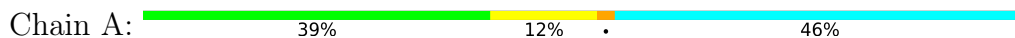
- Molecule 1: Telomere binding protein TBP1





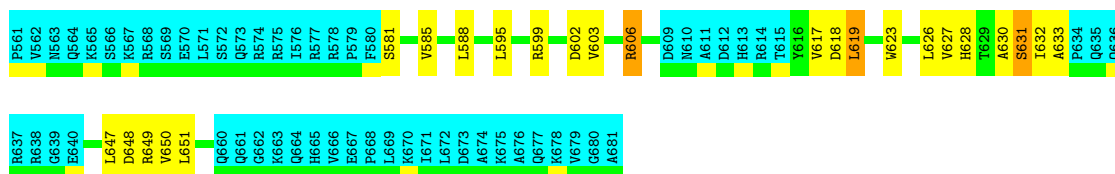
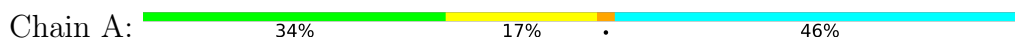
### 4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Telomere binding protein TBP1



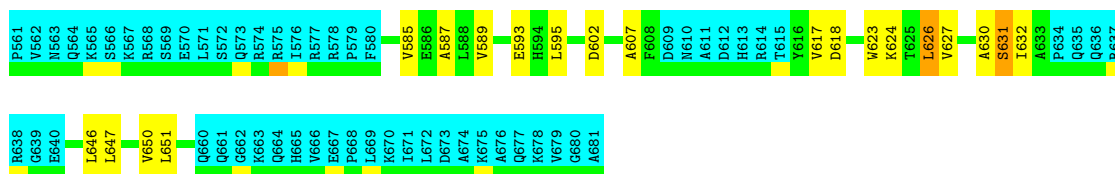
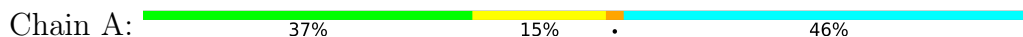
### 4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Telomere binding protein TBP1



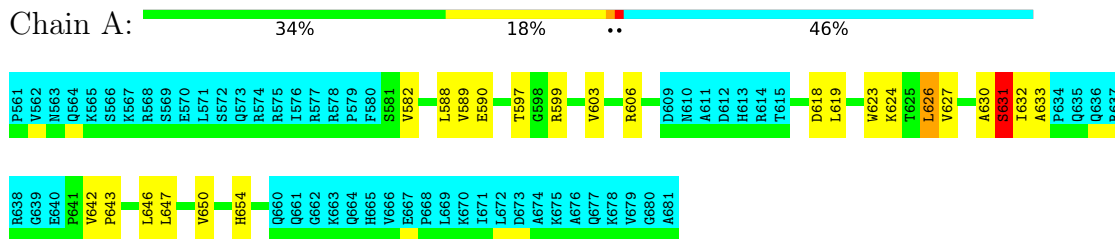
### 4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Telomere binding protein TBP1



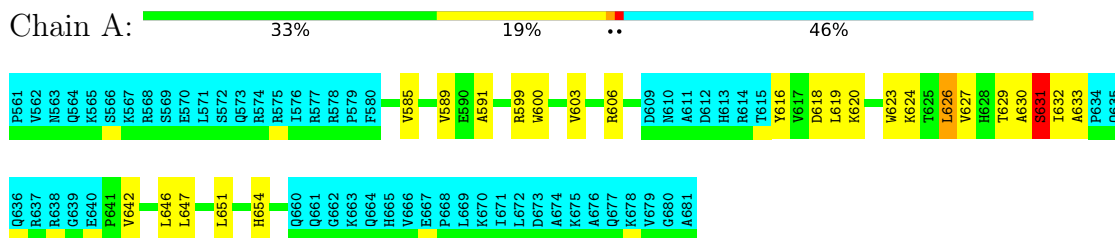
### 4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Telomere binding protein TBP1



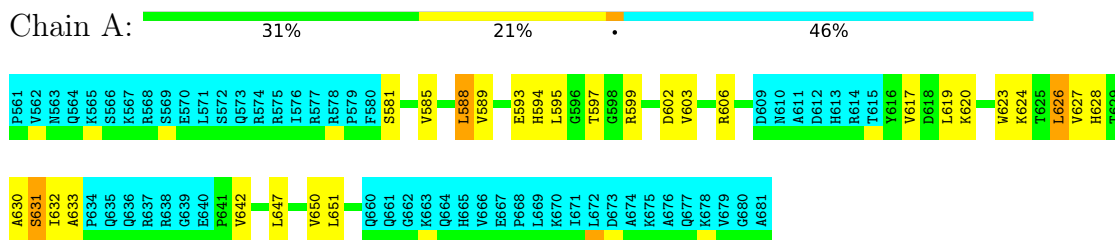
#### 4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Telomere binding protein TBP1



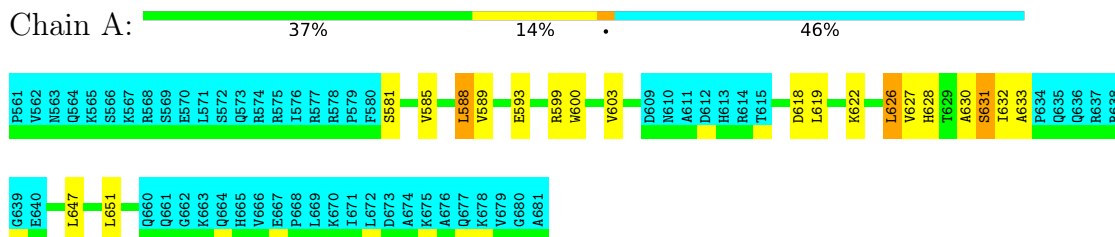
#### 4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Telomere binding protein TBP1



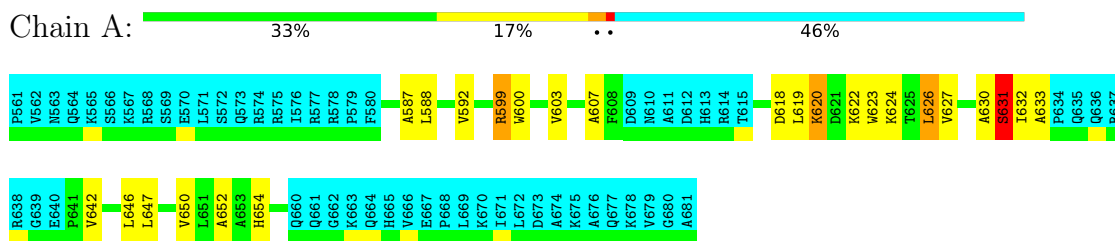
#### 4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Telomere binding protein TBP1



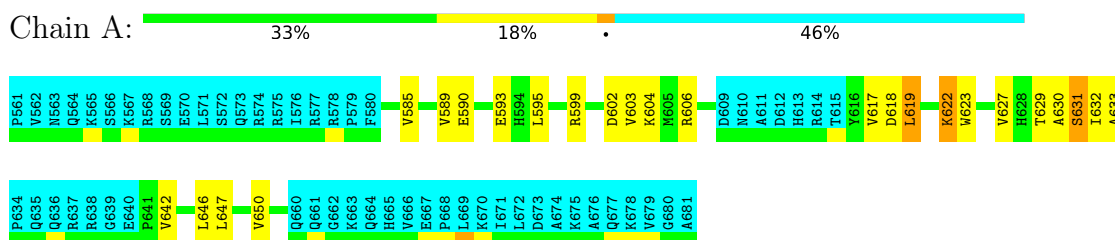
#### 4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Telomere binding protein TBP1



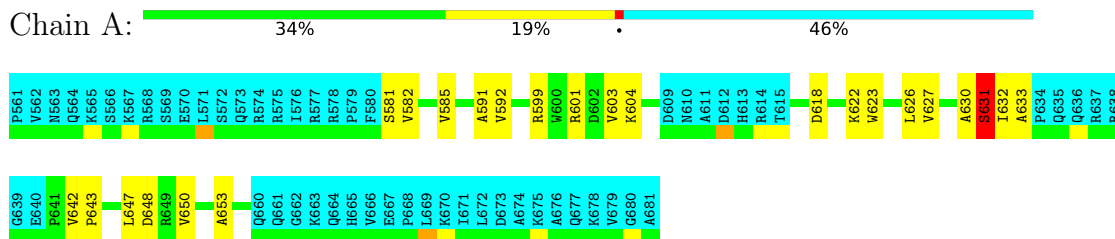
#### 4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Telomere binding protein TBP1



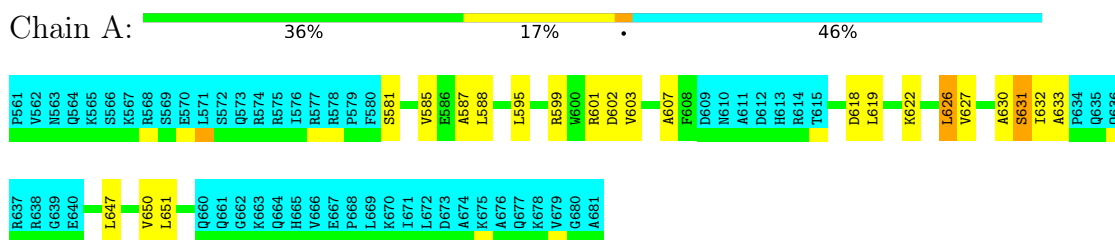
#### 4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Telomere binding protein TBP1



#### 4.2.13 Score per residue for model 13

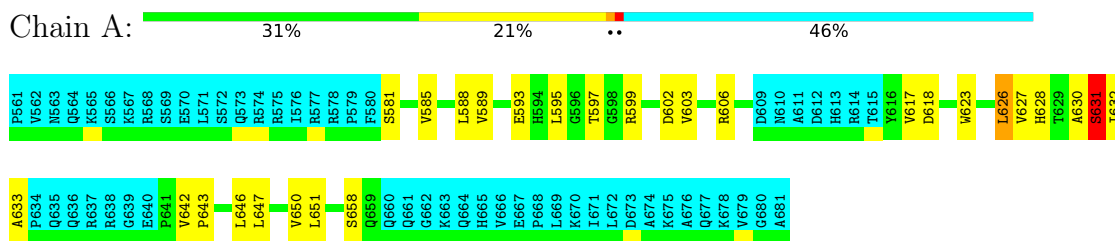
- Molecule 1: Telomere binding protein TBP1





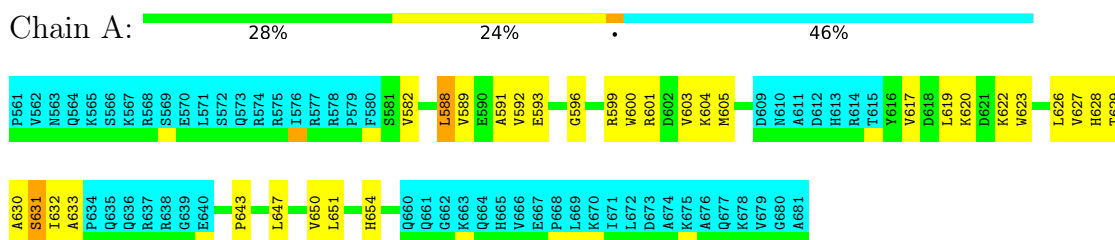
#### 4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Telomere binding protein TBP1



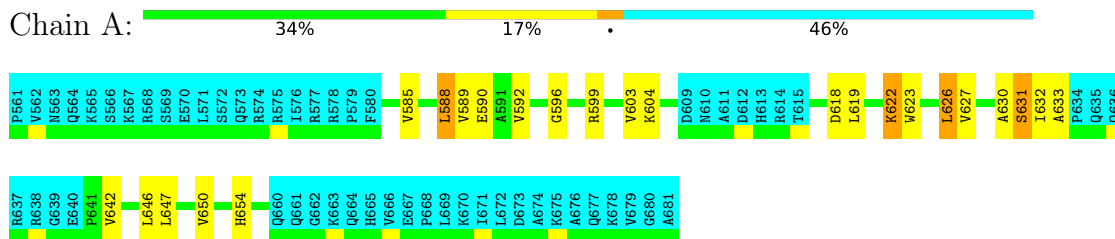
#### 4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Telomere binding protein TBP1



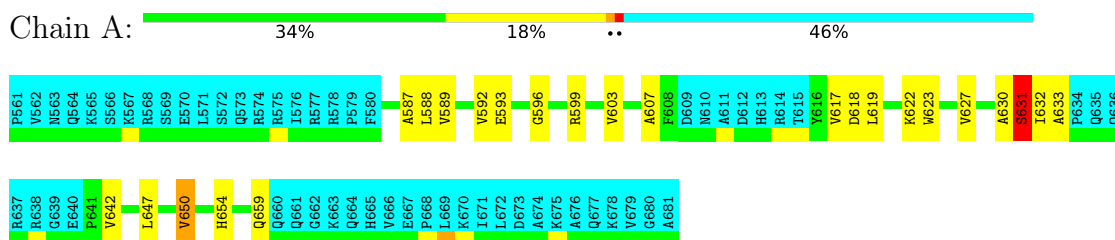
#### 4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Telomere binding protein TBP1



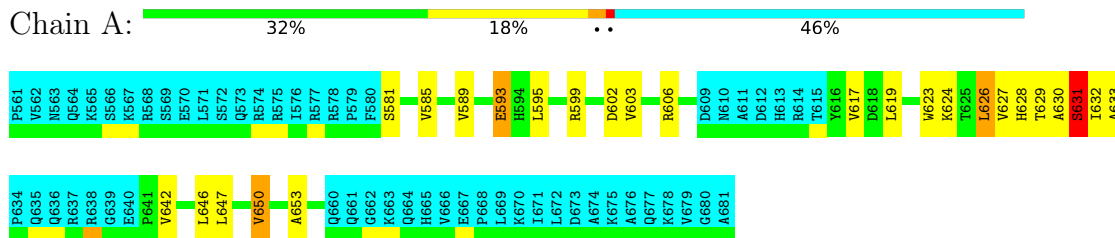
#### 4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Telomere binding protein TBP1



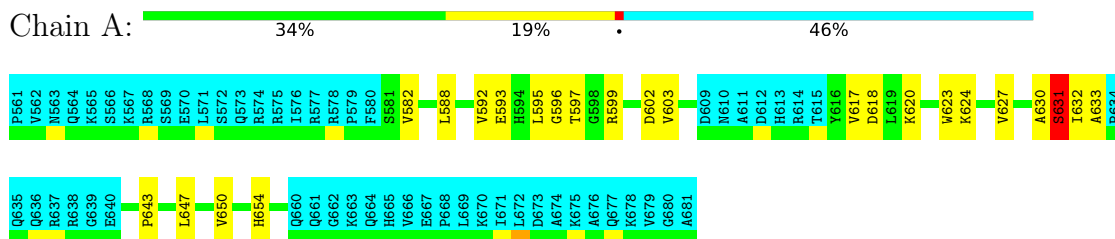
### 4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Telomere binding protein TBP1



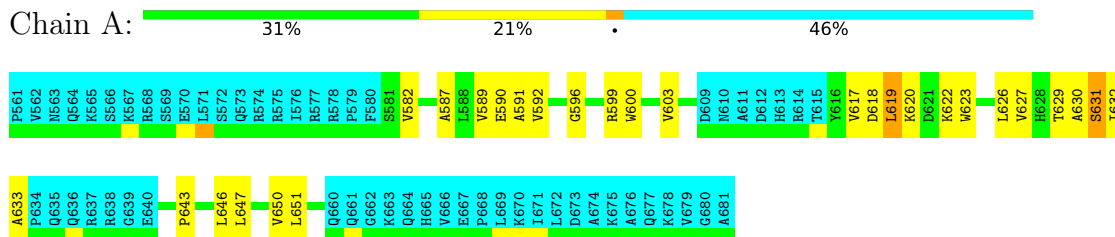
### 4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Telomere binding protein TBP1



### 4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Telomere binding protein TBP1



## 5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 100 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *structures with the least restraint violations*.

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

Software name	Classification	Version
CYANA	refinement	2.2.5
CYANA	structure solution	2.2.5

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	1087
Number of shifts mapped to atoms	1002
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	85
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	81%

## 6 Model quality

### 6.1 Standard geometry

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

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	522	448	521	15±3
All	All	10440	8960	10420	292

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 14.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:626:LEU:HD22	1:A:650:VAL:HG21	0.93	1.37	16	5
1:A:589:VAL:HG11	1:A:646:LEU:HD22	0.81	1.53	11	4
1:A:603:VAL:HG11	1:A:619:LEU:HD13	0.73	1.60	13	6
1:A:629:THR:HG21	1:A:642:VAL:HG21	0.69	1.64	18	1
1:A:627:VAL:HG23	1:A:651:LEU:HD12	0.69	1.65	8	3
1:A:581:SER:O	1:A:585:VAL:HG12	0.66	1.91	1	3
1:A:642:VAL:HG21	1:A:647:LEU:HD11	0.65	1.68	16	11
1:A:627:VAL:HG21	1:A:654:HIS:CG	0.64	2.27	15	4
1:A:585:VAL:HG13	1:A:626:LEU:HD11	0.64	1.70	3	3
1:A:631:SER:C	1:A:632:ILE:HD12	0.64	2.13	8	19
1:A:646:LEU:O	1:A:650:VAL:HG23	0.63	1.93	16	6
1:A:592:VAL:HG11	1:A:623:TRP:CE3	0.63	2.29	10	2
1:A:600:TRP:HB3	1:A:619:LEU:HD11	0.63	1.71	7	3
1:A:599:ARG:O	1:A:603:VAL:HG23	0.62	1.94	2	19

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:585:VAL:HG12	1:A:646:LEU:HD13	0.62	1.68	5	2
1:A:623:TRP:CZ3	1:A:650:VAL:HG23	0.62	2.29	15	2
1:A:603:VAL:CG1	1:A:619:LEU:HD13	0.60	2.26	13	5
1:A:627:VAL:O	1:A:632:ILE:HD13	0.59	1.97	19	20
1:A:650:VAL:HG13	1:A:654:HIS:CE1	0.59	2.33	19	1
1:A:581:SER:O	1:A:585:VAL:HG23	0.58	1.98	4	5
1:A:642:VAL:CG2	1:A:647:LEU:HD11	0.57	2.29	7	7
1:A:627:VAL:HG23	1:A:651:LEU:CD1	0.57	2.28	8	3
1:A:595:LEU:HD11	1:A:606:ARG:CB	0.56	2.30	18	6
1:A:585:VAL:O	1:A:589:VAL:HG23	0.56	2.00	14	2
1:A:630:ALA:HA	1:A:647:LEU:HD13	0.56	1.77	7	19
1:A:587:ALA:HB1	1:A:607:ALA:HA	0.56	1.78	10	4
1:A:627:VAL:HG22	1:A:650:VAL:CG1	0.55	2.31	11	3
1:A:593:GLU:OE2	1:A:653:ALA:HB2	0.55	2.01	18	1
1:A:627:VAL:HG22	1:A:654:HIS:CD2	0.55	2.36	16	1
1:A:629:THR:CG2	1:A:642:VAL:HG21	0.54	2.32	18	1
1:A:595:LEU:HD22	1:A:602:ASP:HB3	0.54	1.79	8	5
1:A:582:VAL:HG13	1:A:643:PRO:HG3	0.54	1.79	19	5
1:A:589:VAL:HG21	1:A:646:LEU:HB3	0.54	1.78	18	1
1:A:623:TRP:CE3	1:A:650:VAL:HG23	0.54	2.37	15	2
1:A:589:VAL:CG2	1:A:650:VAL:HG23	0.53	2.33	17	1
1:A:626:LEU:HD23	1:A:647:LEU:HD23	0.52	1.81	18	1
1:A:600:TRP:HB3	1:A:619:LEU:HD12	0.51	1.81	15	1
1:A:632:ILE:HG22	1:A:633:ALA:N	0.51	2.21	12	14
1:A:630:ALA:CA	1:A:647:LEU:HD22	0.51	2.36	13	1
1:A:589:VAL:HG22	1:A:626:LEU:HD13	0.50	1.83	7	3
1:A:595:LEU:HD13	1:A:602:ASP:C	0.49	2.28	8	7
1:A:585:VAL:HG22	1:A:622:LYS:HE3	0.49	1.83	11	1
1:A:585:VAL:CG1	1:A:626:LEU:HD11	0.49	2.36	7	3
1:A:585:VAL:HG22	1:A:622:LYS:CE	0.49	2.37	11	1
1:A:591:ALA:HB3	1:A:603:VAL:HG13	0.49	1.84	15	6
1:A:626:LEU:HG	1:A:650:VAL:HG21	0.49	1.84	15	1
1:A:627:VAL:HG22	1:A:650:VAL:HG22	0.49	1.82	12	1
1:A:591:ALA:CB	1:A:603:VAL:HG13	0.49	2.38	15	4
1:A:585:VAL:O	1:A:589:VAL:HG12	0.49	2.07	2	2
1:A:592:VAL:HG11	1:A:654:HIS:NE2	0.48	2.22	19	1
1:A:585:VAL:CG2	1:A:626:LEU:HD11	0.48	2.39	1	1
1:A:627:VAL:CG2	1:A:650:VAL:HG22	0.47	2.40	12	1
1:A:626:LEU:CD2	1:A:650:VAL:HG21	0.47	2.27	16	1
1:A:604:LYS:HG3	1:A:619:LEU:HD21	0.47	1.87	15	1
1:A:632:ILE:HD11	1:A:651:LEU:HD21	0.47	1.86	1	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:589:VAL:HG22	1:A:626:LEU:HD21	0.47	1.85	15	1
1:A:630:ALA:HB1	1:A:651:LEU:HD11	0.46	1.86	15	3
1:A:588:LEU:O	1:A:588:LEU:HD13	0.46	2.11	10	2
1:A:627:VAL:HG22	1:A:654:HIS:CE1	0.46	2.45	17	1
1:A:600:TRP:CB	1:A:619:LEU:HD11	0.45	2.41	7	1
1:A:630:ALA:HA	1:A:647:LEU:HD22	0.45	1.88	13	1
1:A:589:VAL:HG13	1:A:590:GLU:N	0.45	2.27	6	5
1:A:588:LEU:HD21	1:A:619:LEU:HA	0.45	1.89	16	2
1:A:588:LEU:HD13	1:A:588:LEU:C	0.44	2.33	14	2
1:A:585:VAL:HG22	1:A:622:LYS:HE2	0.44	1.90	16	1
1:A:630:ALA:HB1	1:A:651:LEU:CD1	0.44	2.43	9	2
1:A:643:PRO:CG	1:A:646:LEU:HD12	0.44	2.42	14	1
1:A:588:LEU:O	1:A:592:VAL:HG23	0.44	2.12	15	1
1:A:589:VAL:CG2	1:A:626:LEU:HD13	0.43	2.43	7	1
1:A:619:LEU:HD12	1:A:620:LYS:N	0.43	2.29	7	2
1:A:632:ILE:HD12	1:A:632:ILE:N	0.43	2.29	16	3
1:A:589:VAL:HG22	1:A:626:LEU:CD1	0.43	2.43	14	1
1:A:592:VAL:HG11	1:A:623:TRP:CZ3	0.42	2.49	15	3
1:A:630:ALA:N	1:A:647:LEU:HD22	0.42	2.28	13	1
1:A:627:VAL:HG23	1:A:651:LEU:HD23	0.42	1.91	15	1
1:A:628:HIS:CE1	1:A:632:ILE:HG21	0.41	2.49	3	1
1:A:628:HIS:HA	1:A:632:ILE:HD13	0.41	1.92	4	3
1:A:595:LEU:HD22	1:A:602:ASP:CB	0.41	2.45	5	2
1:A:592:VAL:O	1:A:596:GLY:CA	0.41	2.68	16	5
1:A:650:VAL:HG12	1:A:654:HIS:CD2	0.41	2.50	16	1
1:A:600:TRP:O	1:A:619:LEU:HD21	0.41	2.15	20	1
1:A:623:TRP:HH2	1:A:653:ALA:HB3	0.41	1.75	12	1
1:A:593:GLU:OE1	1:A:653:ALA:HB2	0.41	2.16	2	1
1:A:627:VAL:HG21	1:A:654:HIS:CD2	0.41	2.51	6	2
1:A:630:ALA:O	1:A:631:SER:CB	0.40	2.70	18	1
1:A:585:VAL:CG1	1:A:626:LEU:HD21	0.40	2.46	3	1
1:A:627:VAL:HG22	1:A:650:VAL:HG13	0.40	1.92	18	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	65/121 (54%)	61±1 (94±1%)	3±1 (5±1%)	1±0 (2±0%)	13	57
All	All	1300/2420 (54%)	1218 (94%)	61 (5%)	21 (2%)	13	57

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

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	631	SER	20
1	A	616	TYR	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	54/103 (52%)	47±1 (86±3%)	7±1 (14±3%)	7	47
All	All	1080/2060 (52%)	931 (86%)	149 (14%)	7	47

All 25 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	618	ASP	17
1	A	626	LEU	16
1	A	623	TRP	13
1	A	588	LEU	12
1	A	593	GLU	11
1	A	622	LYS	10
1	A	624	LYS	10
1	A	631	SER	9
1	A	650	VAL	6
1	A	597	THR	5
1	A	628	HIS	5
1	A	619	LEU	5
1	A	620	LYS	5
1	A	629	THR	4
1	A	648	ASP	3
1	A	606	ARG	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	651	LEU	3
1	A	604	LYS	3
1	A	601	ARG	3
1	A	649	ARG	1
1	A	594	HIS	1
1	A	599	ARG	1
1	A	658	SER	1
1	A	605	MET	1
1	A	659	GLN	1

### 6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

### 6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no monosaccharides in this entry.

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

There are no ligands in this entry.

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

There are no such molecules in this entry.

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

There are no chain breaks in this entry.



## 7 Chemical shift validation i

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 81% for the well-defined parts and 63% 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	1087
Number of shifts mapped to atoms	1002
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	85
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	7

The following assigned chemical shifts were not mapped to the molecules present in the coordinate file.

- No matching atom found in the structure. All 85 occurrences are reported below.

List ID	Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
					Value	Uncertainty	Ambiguity
1	A	580	PHE	HB2	2.918	0.020	2
1	A	581	SER	HB2	4.425	0.020	2
1	A	584	GLU	HB2	2.695	0.020	2
1	A	584	GLU	HG2	2.658	0.020	2
1	A	586	GLU	HB2	2.163	0.020	2
1	A	586	GLU	HG2	2.269	0.020	2
1	A	588	LEU	HB2	1.853	0.020	2
1	A	590	GLU	HB2	2.134	0.020	2
1	A	590	GLU	HG2	2.484	0.020	2
1	A	593	GLU	HB2	2.646	0.020	2
1	A	593	GLU	HG2	2.597	0.020	2
1	A	594	HIS	HB2	3.037	0.020	2
1	A	595	LEU	HB2	1.416	0.020	2
1	A	599	ARG	HB2	1.932	0.020	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

List ID	Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
					Value	Uncertainty	Ambiguity
1	A	599	ARG	HD2	2.969	0.020	2
1	A	599	ARG	HG2	1.372	0.020	2
1	A	600	TRP	HB2	3.6	0.020	2
1	A	601	ARG	HB2	1.215	0.020	2
1	A	601	ARG	HD2	2.86	0.020	2
1	A	601	ARG	HG2	1.58	0.020	2
1	A	602	ASP	HB2	2.656	0.020	2
1	A	604	LYS	HB2	2.365	0.020	2
1	A	605	MET	HB2	2.067	0.020	2
1	A	605	MET	HG2	2.667	0.020	2
1	A	606	ARG	HB2	1.611	0.020	2
1	A	606	ARG	HD2	2.835	0.020	2
1	A	606	ARG	HG2	1.595	0.020	2
1	A	608	PHE	HB2	3.569	0.020	2
1	A	609	ASP	HB2	2.951	0.020	2
1	A	610	ASN	HB2	2.808	0.020	2
1	A	612	ASP	HB2	2.608	0.020	2
1	A	613	HIS	HB2	3.182	0.020	2
1	A	616	TYR	HB2	3.001	0.020	2
1	A	618	ASP	HB2	2.897	0.020	2
1	A	619	LEU	HB2	1.981	0.020	2
1	A	621	ASP	HB2	2.509	0.020	2
1	A	622	LYS	HB2	1.517	0.020	2
1	A	623	TRP	HB2	3.255	0.020	2
1	A	624	LYS	HB2	1.884	0.020	2
1	A	624	LYS	HD2	1.617	0.020	2
1	A	624	LYS	HE2	2.905	0.020	2
1	A	624	LYS	HG2	1.351	0.020	2
1	A	626	LEU	HB2	0.882	0.020	2
1	A	628	HIS	HB2	3.117	0.020	2
1	A	631	SER	HB2	3.897	0.020	2
1	A	632	ILE	HG12	1.17	0.020	2
1	A	634	PRO	HB2	2.3	0.020	2
1	A	634	PRO	HD2	3.805	0.020	2
1	A	634	PRO	HG2	2.148	0.020	2
1	A	635	GLN	HB2	2.034	0.020	2
1	A	635	GLN	HG2	2.426	0.020	2
1	A	636	GLN	HB2	2.24	0.020	2
1	A	636	GLN	HG2	2.271	0.020	2
1	A	638	ARG	HB2	1.799	0.020	2
1	A	638	ARG	HD2	3.156	0.020	2

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

List ID	Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
					Value	Uncertainty	Ambiguity
1	A	638	ARG	HG2	1.556	0.020	2
1	A	640	GLU	HB2	1.936	0.020	2
1	A	640	GLU	HG2	2.28	0.020	2
1	A	641	PRO	HB2	2.331	0.020	2
1	A	641	PRO	HD2	3.797	0.020	2
1	A	641	PRO	HG2	1.968	0.020	2
1	A	643	PRO	HB2	2.443	0.020	2
1	A	643	PRO	HD2	3.893	0.020	2
1	A	643	PRO	HG2	2.116	0.020	2
1	A	644	GLN	HB2	2.281	0.020	2
1	A	644	GLN	HG2	2.359	0.020	2
1	A	645	ASP	HB2	2.644	0.020	2
1	A	646	LEU	HB2	1.287	0.020	2
1	A	647	LEU	HB2	1.225	0.020	2
1	A	648	ASP	HB2	2.763	0.020	2
1	A	649	ARG	HB2	1.972	0.020	2
1	A	649	ARG	HD2	3.331	0.020	2
1	A	649	ARG	HG2	1.999	0.020	2
1	A	651	LEU	HB2	1.764	0.020	2
1	A	654	HIS	HB2	3.381	0.020	2
1	A	656	TYR	HB2	2.764	0.020	2
1	A	657	TRP	HB2	3.48	0.020	2
1	A	658	SER	HB2	3.793	0.020	2
1	A	659	GLN	HB2	2.073	0.020	2
1	A	659	GLN	HG2	2.351	0.020	2
1	A	660	GLN	HB2	2.079	0.020	2
1	A	660	GLN	HG2	1.938	0.020	2
1	A	665	HIS	HB2	3.045	0.020	2
1	A	667	GLU	HB2	1.967	0.020	2
1	A	667	GLU	HG2	2.236	0.020	2

### 7.1.2 Chemical shift referencing [i](#)

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction $\pm$ precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	117	$-0.29 \pm 0.19$	None needed ( $< 0.5$ ppm)
$^{13}\text{C}_\beta$	113	$0.40 \pm 0.10$	None needed ( $< 0.5$ ppm)
$^{13}\text{C}'$	121	$-0.32 \pm 0.16$	None needed ( $< 0.5$ ppm)
$^{15}\text{N}$	111	$-0.39 \pm 0.30$	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 81%, i.e. 743 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 912. 0 out of 16 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	<sup>1</sup> H	<sup>13</sup> C	<sup>15</sup> N
Backbone	322/323 (100%)	129/130 (99%)	130/130 (100%)	63/63 (100%)
Sidechain	409/504 (81%)	284/331 (86%)	125/155 (81%)	0/18 (0%)
Aromatic	12/85 (14%)	9/43 (21%)	0/36 (0%)	3/6 (50%)
Overall	743/912 (81%)	422/504 (84%)	255/321 (79%)	66/87 (76%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 63%, i.e. 1087 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1731. 0 out of 22 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	<sup>1</sup> H	<sup>13</sup> C	<sup>15</sup> N
Backbone	547/598 (91%)	198/241 (82%)	238/242 (98%)	111/115 (97%)
Sidechain	527/1024 (51%)	342/659 (52%)	185/307 (60%)	0/58 (0%)
Aromatic	13/109 (12%)	10/56 (18%)	0/45 (0%)	3/8 (38%)
Overall	1087/1731 (63%)	550/956 (58%)	423/594 (71%)	114/181 (63%)

### 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.

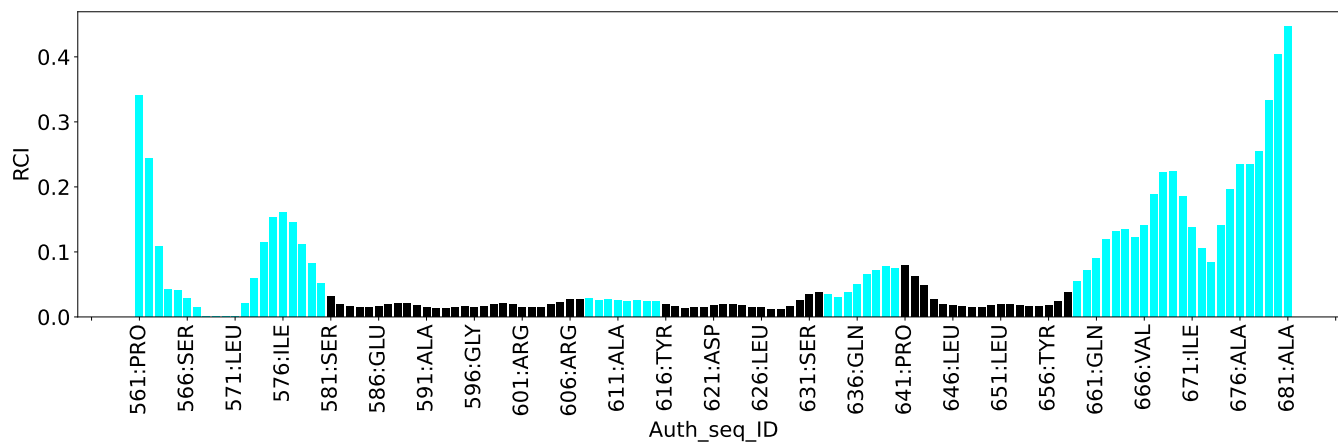
List Id	Chain	Res	Type	Atom	Shift, ppm	Expected range, ppm	Z-score
1	A	569	SER	HA	58.74	2.50 – 6.44	137.8
1	A	596	GLY	HA3	1.17	2.08 – 5.71	-7.5
1	A	637	ARG	CG	33.74	21.24 – 33.19	5.5
1	A	596	GLY	HA2	2.06	2.15 – 5.77	-5.3
1	A	592	VAL	HG11	-0.54	-0.48 – 2.12	-5.2
1	A	592	VAL	HG12	-0.54	-0.48 – 2.12	-5.2
1	A	592	VAL	HG13	-0.54	-0.48 – 2.12	-5.2

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

The image below reports *random coil index* values for the protein chains in the structure. The height of each bar gives a probability of a given residue to be disordered, as predicted from the available chemical shifts and the amino acid sequence. A value above 0.2 is an indication of significant predicted disorder. The colour of the bar shows whether the residue is in the well-

defined core (black) or in the ill-defined residue ranges (cyan), as described in section 2 on ensemble composition. If well-defined core and ill-defined regions are not identified then it is shown as gray bars.

Random coil index (RCI) for chain A:



## 8 NMR restraints analysis

### 8.1 Conformationally restricting restraints

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

Description	Value
Total distance restraints	1259
Intra-residue ( $ i-j =0$ )	300
Sequential ( $ i-j =1$ )	315
Medium range ( $ i-j >1$ and $ i-j <5$ )	323
Long range ( $ i-j \geq 5$ )	259
Inter-chain	0
Hydrogen bond restraints	62
Disulfide bond restraints	0
Total dihedral-angle restraints	0
Number of unmapped restraints	365
Number of restraints per residue	10.4
Number of long range restraints per residue <sup>1</sup>	2.1

<sup>1</sup>Long range hydrogen bonds and disulfide bonds are counted as long range restraints while calculating the number of long range restraints per residue

### 8.2 Residual restraint violations

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

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

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

Bins (Å)	Average number of violations per model	Max (Å)
0.1-0.2 (Small)	20.9	0.2
0.2-0.5 (Medium)	34.4	0.5
>0.5 (Large)	38.8	3.9

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

Dihedral-angle violations less than  $1^\circ$  are not included in the calculation. There are no dihedral-angle violations

## 9 Distance violation analysis [i](#)

### 9.1 Summary of distance violations [i](#)

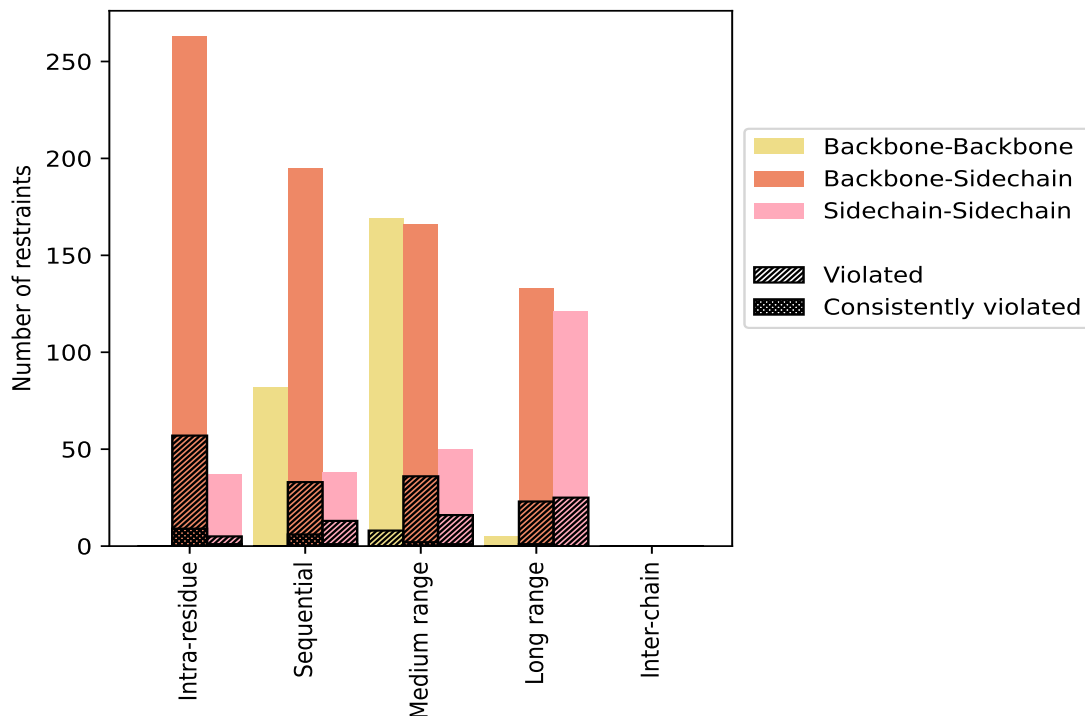
The following table shows the summary of distance violations in different restraint categories based on the sequence separation of the atoms involved. Each category is further sub-divided into three sub-categories based on the atoms involved. Violations less than 0.1 Å are not included in the statistics.

Restrains type	Count	% <sup>1</sup>	Violated <sup>3</sup>			Consistently Violated <sup>4</sup>		
			Count	% <sup>2</sup>	% <sup>1</sup>	Count	% <sup>2</sup>	% <sup>1</sup>
<b>Intra-residue (<math> i-j =0</math>)</b>	<b>300</b>	<b>23.8</b>	<b>62</b>	<b>20.7</b>	<b>4.9</b>	<b>10</b>	<b>3.3</b>	<b>0.8</b>
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	263	20.9	57	21.7	4.5	9	3.4	0.7
Sidechain-Sidechain	37	2.9	5	13.5	0.4	1	2.7	0.1
<b>Sequential (<math> i-j =1</math>)</b>	<b>315</b>	<b>25.0</b>	<b>46</b>	<b>14.6</b>	<b>3.7</b>	<b>7</b>	<b>2.2</b>	<b>0.6</b>
Backbone-Backbone	82	6.5	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	195	15.5	33	16.9	2.6	6	3.1	0.5
Sidechain-Sidechain	38	3.0	13	34.2	1.0	1	2.6	0.1
<b>Medium range (<math> i-j &gt;1</math> &amp; <math> i-j &lt;5</math>)</b>	<b>323</b>	<b>25.7</b>	<b>56</b>	<b>17.3</b>	<b>4.4</b>	<b>3</b>	<b>0.9</b>	<b>0.2</b>
Backbone-Backbone	107	8.5	4	3.7	0.3	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	166	13.2	36	21.7	2.9	2	1.2	0.2
Sidechain-Sidechain	50	4.0	16	32.0	1.3	1	2.0	0.1
<b>Long range (<math> i-j \geq 5</math>)</b>	<b>259</b>	<b>20.6</b>	<b>48</b>	<b>18.5</b>	<b>3.8</b>	<b>1</b>	<b>0.4</b>	<b>0.1</b>
Backbone-Backbone	5	0.4	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	133	10.6	23	17.3	1.8	1	0.8	0.1
Sidechain-Sidechain	121	9.6	25	20.7	2.0	0	0.0	0.0
<b>Inter-chain</b>	<b>0</b>	<b>0.0</b>	<b>0</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>	<b>0</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
<b>Hydrogen bond</b>	<b>62</b>	<b>4.9</b>	<b>4</b>	<b>6.5</b>	<b>0.3</b>	<b>0</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>
<b>Disulfide bond</b>	<b>0</b>	<b>0.0</b>	<b>0</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>	<b>0</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>
<b>Total</b>	<b>1259</b>	<b>100.0</b>	<b>216</b>	<b>17.2</b>	<b>17.2</b>	<b>21</b>	<b>1.7</b>	<b>1.7</b>
Backbone-Backbone	256	20.3	8	3.1	0.6	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	757	60.1	149	19.7	11.8	18	2.4	1.4
Sidechain-Sidechain	246	19.5	59	24.0	4.7	3	1.2	0.2

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



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



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

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

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

Model ID	Number of violations						Mean (Å)	Max (Å)	SD <sup>6</sup> (Å)	Median (Å)
	IR <sup>1</sup>	SQ <sup>2</sup>	MR <sup>3</sup>	LR <sup>4</sup>	IC <sup>5</sup>	Total				
1	33	25	22	15	0	95	0.54	3.14	0.44	0.48
2	33	24	24	22	0	103	0.56	3.08	0.45	0.47
3	30	26	17	17	0	90	0.53	3.18	0.46	0.39
4	32	22	18	23	0	95	0.52	3.05	0.45	0.38
5	31	21	21	14	0	87	0.57	3.12	0.49	0.4
6	34	27	25	15	0	101	0.55	3.62	0.48	0.38
7	32	25	14	11	0	82	0.53	3.07	0.47	0.38
8	32	24	22	21	0	99	0.49	2.99	0.42	0.38
9	29	22	20	19	0	90	0.54	3.11	0.46	0.42
10	36	25	22	23	0	106	0.52	3.01	0.45	0.38
11	28	20	17	20	0	85	0.54	3.16	0.44	0.44

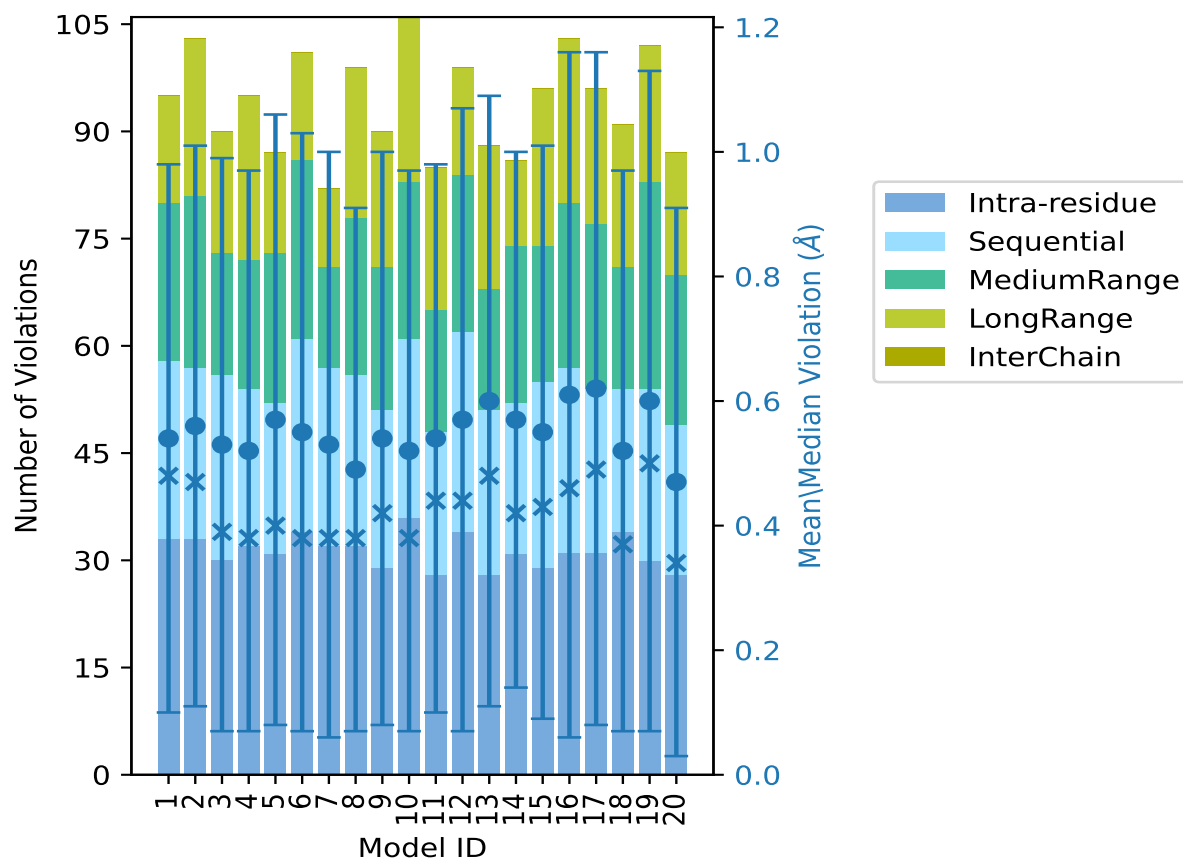
*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Model ID	Number of violations					Total	Mean (Å)	Max (Å)	SD <sup>6</sup> (Å)	Median (Å)
	IR <sup>1</sup>	SQ <sup>2</sup>	MR <sup>3</sup>	LR <sup>4</sup>	IC <sup>5</sup>					
12	34	28	22	15	0	99	0.57	3.34	0.5	0.44
13	28	23	17	20	0	88	0.6	3.03	0.49	0.48
14	31	21	22	12	0	86	0.57	3.01	0.43	0.42
15	29	26	19	22	0	96	0.55	3.11	0.46	0.43
16	31	26	23	23	0	103	0.61	3.84	0.55	0.46
17	31	23	23	19	0	96	0.62	3.9	0.54	0.49
18	34	20	17	20	0	91	0.52	3.02	0.45	0.37
19	30	24	29	19	0	102	0.6	3.89	0.53	0.5
20	28	21	21	17	0	87	0.47	2.81	0.44	0.34

<sup>1</sup>Intra-residue restraints, <sup>2</sup>Sequential restraints, <sup>3</sup>Medium range restraints, <sup>4</sup>Long range restraints, <sup>5</sup>Inter-chain restraints, <sup>6</sup>Standard deviation

### 9.2.1 Bar graph : Distance Violation statistics for each model



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

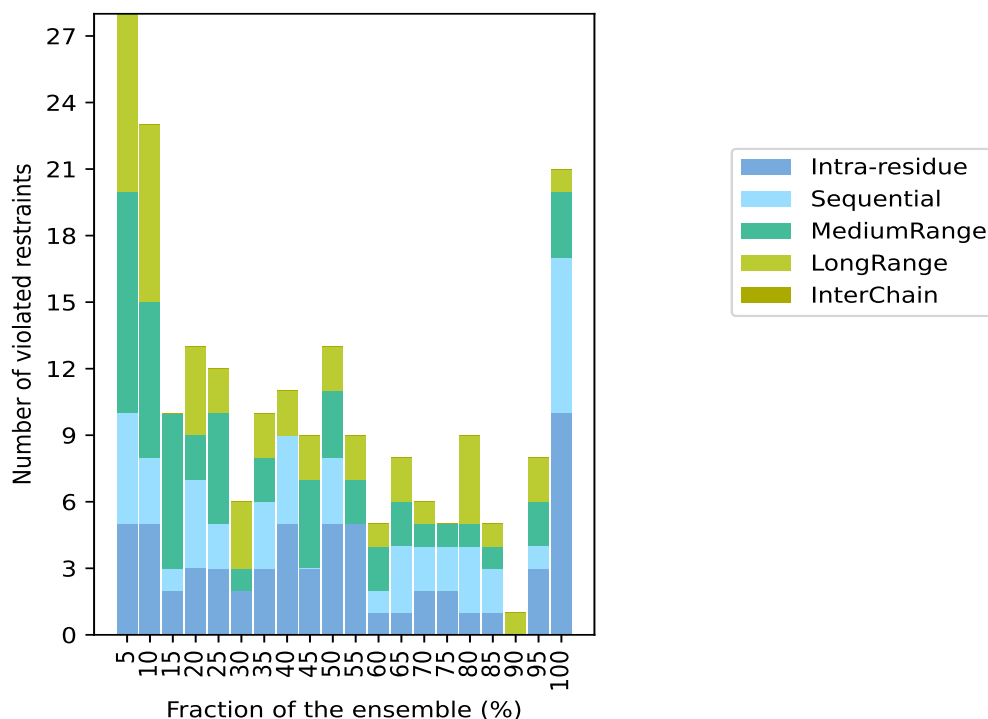
### 9.3 Distance violation statistics for the ensemble

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, 985(IR:238, SQ:269, MR:267, LR:211, IC:0) restraints are not violated in the ensemble.

Number of violated restraints						Fraction of the ensemble	
IR <sup>1</sup>	SQ <sup>2</sup>	MR <sup>3</sup>	LR <sup>4</sup>	IC <sup>5</sup>	Total	Count <sup>6</sup>	%
5	5	10	8	0	28	1	5.0
5	3	7	8	0	23	2	10.0
2	1	7	0	0	10	3	15.0
3	4	2	4	0	13	4	20.0
3	2	5	2	0	12	5	25.0
2	0	1	3	0	6	6	30.0
3	3	2	2	0	10	7	35.0
5	4	0	2	0	11	8	40.0
3	0	4	2	0	9	9	45.0
5	3	3	2	0	13	10	50.0
5	0	2	2	0	9	11	55.0
1	1	2	1	0	5	12	60.0
1	3	2	2	0	8	13	65.0
2	2	1	1	0	6	14	70.0
2	2	1	0	0	5	15	75.0
1	3	1	4	0	9	16	80.0
1	2	1	1	0	5	17	85.0
0	0	0	1	0	1	18	90.0
3	1	2	2	0	8	19	95.0
10	7	3	1	0	21	20	100.0

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

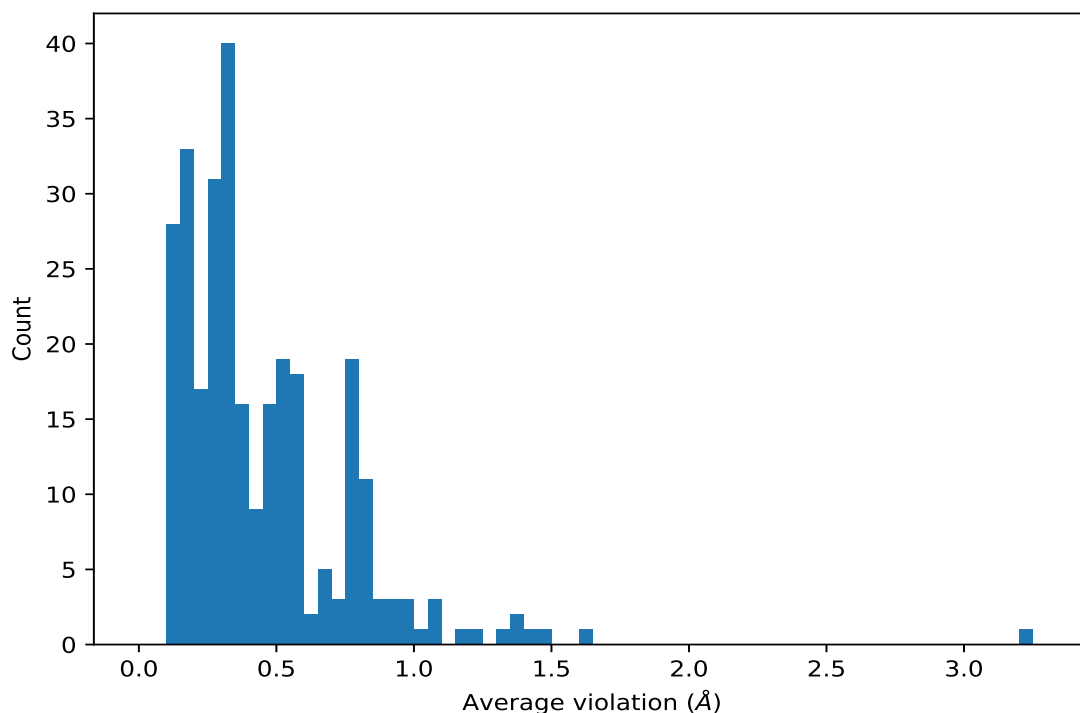
### 9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble [i](#)



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

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

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Models <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)	Median (Å)
(1,822)	1:A:656:TYR:HD1	1:A:657:TRP:HE1	20	3.22	0.31	3.11
(1,702)	1:A:656:TYR:HD1	1:A:657:TRP:H	20	1.63	0.08	1.65
(1,1015)	1:A:604:LYS:HA	1:A:608:PHE:HB3	20	1.05	0.19	1.0
(1,1117)	1:A:633:ALA:HA	1:A:636:GLN:HB3	20	0.82	0.29	0.7
(1,81)	1:A:611:ALA:HA	1:A:612:ASP:HB3	20	0.79	0.39	0.88
(1,965)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:652:ALA:H	20	0.78	0.18	0.72
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG21	1:A:636:GLN:HB3	20	0.76	0.34	0.76
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG22	1:A:636:GLN:HB3	20	0.76	0.34	0.76
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG23	1:A:636:GLN:HB3	20	0.76	0.34	0.76
(1,860)	1:A:585:VAL:HA	1:A:586:GLU:HB3	20	0.76	0.43	1.06
(1,807)	1:A:633:ALA:H	1:A:634:PRO:HD3	20	0.55	0.07	0.56
(1,999)	1:A:600:TRP:H	1:A:600:TRP:HB3	20	0.54	0.01	0.54
(1,970)	1:A:595:LEU:H	1:A:595:LEU:HB3	20	0.53	0.03	0.55
(1,1121)	1:A:636:GLN:H	1:A:636:GLN:HB3	20	0.53	0.02	0.53
(1,998)	1:A:599:ARG:HG3	1:A:600:TRP:H	20	0.5	0.17	0.52
(1,975)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:596:GLY:H	20	0.48	0.17	0.52

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)	Median (Å)
(1,454)	1:A:602:ASP:H	1:A:602:ASP:HB3	20	0.48	0.02	0.48
(1,836)	1:A:581:SER:H	1:A:581:SER:HB3	20	0.44	0.06	0.42
(1,1125)	1:A:638:ARG:HB3	1:A:638:ARG:HG3	20	0.4	0.18	0.39
(1,1026)	1:A:608:PHE:H	1:A:608:PHE:HB3	20	0.38	0.01	0.38
(1,1022)	1:A:606:ARG:H	1:A:606:ARG:HG3	20	0.35	0.13	0.29
(1,788)	1:A:644:GLN:H	1:A:644:GLN:HG3	20	0.3	0.07	0.31
(1,318)	1:A:632:ILE:H	1:A:632:ILE:HG13	20	0.25	0.07	0.24
(1,1062)	1:A:626:LEU:H	1:A:628:HIS:HB3	19	1.35	0.18	1.35
(1,614)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:586:GLU:H	19	1.09	0.78	1.79
(1,926)	1:A:590:GLU:H	1:A:590:GLU:HB3	19	0.84	0.02	0.85
(1,651)	1:A:593:GLU:H	1:A:594:HIS:HB3	19	0.77	0.49	0.53
(1,1097)	1:A:628:HIS:H	1:A:628:HIS:HB3	19	0.71	0.03	0.71
(1,170)	1:A:636:GLN:HA	1:A:636:GLN:HG3	19	0.55	0.02	0.55
(1,966)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:H	19	0.53	0.2	0.58
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD11	1:A:636:GLN:HB3	19	0.5	0.21	0.4
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD12	1:A:636:GLN:HB3	19	0.5	0.21	0.4
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD13	1:A:636:GLN:HB3	19	0.5	0.21	0.4
(1,130)	1:A:623:TRP:HD1	1:A:654:HIS:HB3	18	0.95	0.46	0.86
(1,252)	1:A:597:THR:HG21	1:A:654:HIS:HB3	17	0.93	0.34	0.99
(1,252)	1:A:597:THR:HG22	1:A:654:HIS:HB3	17	0.93	0.34	0.99
(1,252)	1:A:597:THR:HG23	1:A:654:HIS:HB3	17	0.93	0.34	0.99
(1,853)	1:A:583:ALA:H	1:A:584:GLU:HG3	17	0.55	0.15	0.54
(1,1146)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:H	17	0.27	0.1	0.24
(1,524)	1:A:624:LYS:H	1:A:624:LYS:HG3	17	0.26	0.09	0.25
(1,128)	1:A:655:ALA:HB1	1:A:656:TYR:HB3	17	0.16	0.02	0.16
(1,128)	1:A:655:ALA:HB2	1:A:656:TYR:HB3	17	0.16	0.02	0.16
(1,128)	1:A:655:ALA:HB3	1:A:656:TYR:HB3	17	0.16	0.02	0.16
(1,393)	1:A:591:ALA:H	1:A:606:ARG:HD3	16	0.86	0.43	1.01
(1,1001)	1:A:600:TRP:HA	1:A:616:TYR:HB3	16	0.78	0.45	0.76
(1,589)	1:A:636:GLN:HG3	1:A:637:ARG:H	16	0.45	0.21	0.57
(1,827)	1:A:649:ARG:H	1:A:649:ARG:HD3	16	0.42	0.18	0.36
(1,277)	1:A:588:LEU:HD21	1:A:623:TRP:HB3	16	0.34	0.17	0.36
(1,277)	1:A:588:LEU:HD22	1:A:623:TRP:HB3	16	0.34	0.17	0.36
(1,277)	1:A:588:LEU:HD23	1:A:623:TRP:HB3	16	0.34	0.17	0.36
(1,427)	1:A:605:MET:HB3	1:A:606:ARG:H	16	0.32	0.07	0.32
(1,135)	1:A:653:ALA:HB1	1:A:654:HIS:HB3	16	0.31	0.28	0.16
(1,135)	1:A:653:ALA:HB2	1:A:654:HIS:HB3	16	0.31	0.28	0.16
(1,135)	1:A:653:ALA:HB3	1:A:654:HIS:HB3	16	0.31	0.28	0.16
(1,1099)	1:A:628:HIS:HB3	1:A:630:ALA:H	16	0.25	0.06	0.23
(1,268)	1:A:629:THR:HG21	1:A:647:LEU:HG	16	0.18	0.05	0.18
(1,268)	1:A:629:THR:HG22	1:A:647:LEU:HG	16	0.18	0.05	0.18
(1,268)	1:A:629:THR:HG23	1:A:647:LEU:HG	16	0.18	0.05	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)	Median (Å)
(1,515)	1:A:624:LYS:HD3	1:A:625:THR:H	15	0.79	0.57	0.45
(1,1126)	1:A:638:ARG:HB3	1:A:638:ARG:HD3	15	0.76	0.32	0.77
(1,881)	1:A:587:ALA:HA	1:A:590:GLU:HB3	15	0.32	0.17	0.32
(1,794)	1:A:659:GLN:H	1:A:659:GLN:HG3	15	0.3	0.1	0.28
(1,1119)	1:A:634:PRO:HB3	1:A:635:GLN:H	15	0.23	0.08	0.21
(1,759)	1:A:644:GLN:HG3	1:A:648:ASP:H	14	0.64	0.39	0.56
(1,1163)	1:A:648:ASP:H	1:A:649:ARG:HG3	14	0.58	0.18	0.5
(1,574)	1:A:599:ARG:H	1:A:599:ARG:HD3	14	0.54	0.19	0.59
(1,1168)	1:A:649:ARG:H	1:A:649:ARG:HG3	14	0.51	0.14	0.54
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB1	14	0.36	0.2	0.36
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB2	14	0.36	0.2	0.36
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB3	14	0.36	0.2	0.36
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB1	14	0.33	0.11	0.34
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB2	14	0.33	0.11	0.34
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB3	14	0.33	0.11	0.34
(2,9)	1:A:589:VAL:O	1:A:592:VAL:H	14	0.2	0.07	0.19
(1,1130)	1:A:640:GLU:HG3	1:A:641:PRO:HD3	13	0.82	0.39	0.83
(1,92)	1:A:597:THR:HG21	1:A:623:TRP:HB3	13	0.58	0.34	0.48
(1,92)	1:A:597:THR:HG22	1:A:623:TRP:HB3	13	0.58	0.34	0.48
(1,92)	1:A:597:THR:HG23	1:A:623:TRP:HB3	13	0.58	0.34	0.48
(1,1038)	1:A:617:VAL:HG21	1:A:621:ASP:HB3	13	0.54	0.31	0.55
(1,1038)	1:A:617:VAL:HG22	1:A:621:ASP:HB3	13	0.54	0.31	0.55
(1,1038)	1:A:617:VAL:HG23	1:A:621:ASP:HB3	13	0.54	0.31	0.55
(1,539)	1:A:622:LYS:H	1:A:624:LYS:HB3	13	0.49	0.34	0.44
(1,1192)	1:A:658:SER:H	1:A:659:GLN:HB3	13	0.49	0.46	0.21
(1,797)	1:A:659:GLN:HG3	1:A:660:GLN:H	13	0.43	0.15	0.43
(1,976)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:H	13	0.37	0.13	0.35
(1,583)	1:A:636:GLN:H	1:A:636:GLN:HG3	13	0.27	0.11	0.24
(1,1135)	1:A:642:VAL:HB	1:A:643:PRO:HG3	12	1.18	0.09	1.13
(1,979)	1:A:595:LEU:HG	1:A:599:ARG:HB3	12	0.74	0.05	0.76
(1,131)	1:A:627:VAL:HB	1:A:654:HIS:HB3	12	0.52	0.17	0.56
(1,973)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:595:LEU:HG	12	0.38	0.01	0.38
(1,1112)	1:A:632:ILE:HB	1:A:636:GLN:HB3	12	0.29	0.14	0.29
(1,428)	1:A:606:ARG:H	1:A:606:ARG:HD3	11	0.97	0.26	1.1
(1,419)	1:A:605:MET:H	1:A:605:MET:HB3	11	0.76	0.02	0.77
(1,877)	1:A:586:GLU:H	1:A:586:GLU:HB3	11	0.67	0.05	0.66
(1,879)	1:A:586:GLU:HB3	1:A:646:LEU:HD11	11	0.55	0.15	0.59
(1,879)	1:A:586:GLU:HB3	1:A:646:LEU:HD12	11	0.55	0.15	0.59
(1,879)	1:A:586:GLU:HB3	1:A:646:LEU:HD13	11	0.55	0.15	0.59
(1,953)	1:A:592:VAL:HG11	1:A:623:TRP:HB3	11	0.48	0.27	0.37
(1,953)	1:A:592:VAL:HG12	1:A:623:TRP:HB3	11	0.48	0.27	0.37
(1,953)	1:A:592:VAL:HG13	1:A:623:TRP:HB3	11	0.48	0.27	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)	Median (Å)
(1,953)	1:A:592:VAL:HG21	1:A:623:TRP:HB3	11	0.48	0.27	0.37
(1,953)	1:A:592:VAL:HG22	1:A:623:TRP:HB3	11	0.48	0.27	0.37
(1,953)	1:A:592:VAL:HG23	1:A:623:TRP:HB3	11	0.48	0.27	0.37
(1,159)	1:A:644:GLN:HA	1:A:647:LEU:HB3	11	0.21	0.06	0.2
(1,3)	1:A:592:VAL:HG21	1:A:596:GLY:HA2	11	0.18	0.03	0.17
(1,3)	1:A:592:VAL:HG22	1:A:596:GLY:HA2	11	0.18	0.03	0.17
(1,3)	1:A:592:VAL:HG23	1:A:596:GLY:HA2	11	0.18	0.03	0.17
(1,1170)	1:A:649:ARG:HA	1:A:649:ARG:HG3	11	0.16	0.04	0.14
(1,545)	1:A:656:TYR:H	1:A:656:TYR:HD1	11	0.12	0.01	0.13
(1,599)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:584:GLU:H	10	1.07	0.29	1.07
(1,1129)	1:A:640:GLU:HB3	1:A:641:PRO:HD3	10	0.8	0.36	0.98
(1,52)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG11	10	0.8	0.37	0.66
(1,52)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG12	10	0.8	0.37	0.66
(1,52)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG13	10	0.8	0.37	0.66
(1,854)	1:A:583:ALA:HA	1:A:586:GLU:HB3	10	0.59	0.26	0.56
(1,1050)	1:A:622:LYS:H	1:A:622:LYS:HB3	10	0.54	0.15	0.57
(1,372)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:581:SER:H	10	0.48	0.06	0.48
(1,1147)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:HD11	10	0.32	0.12	0.34
(1,1147)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:HD12	10	0.32	0.12	0.34
(1,1147)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:HD13	10	0.32	0.12	0.34
(1,1033)	1:A:610:ASN:H	1:A:610:ASN:HB3	10	0.27	0.06	0.26
(1,523)	1:A:624:LYS:H	1:A:624:LYS:HB3	10	0.26	0.22	0.16
(1,1110)	1:A:631:SER:H	1:A:631:SER:HB3	10	0.26	0.02	0.26
(1,962)	1:A:593:GLU:HA	1:A:593:GLU:HG3	10	0.17	0.02	0.17
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG11	1:A:632:ILE:H	10	0.15	0.03	0.15
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG12	1:A:632:ILE:H	10	0.15	0.03	0.15
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG13	1:A:632:ILE:H	10	0.15	0.03	0.15
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG21	1:A:632:ILE:H	10	0.15	0.03	0.15
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG22	1:A:632:ILE:H	10	0.15	0.03	0.15
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG23	1:A:632:ILE:H	10	0.15	0.03	0.15
(1,1111)	1:A:631:SER:HB3	1:A:632:ILE:H	10	0.13	0.02	0.12
(1,41)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HA	9	1.47	0.34	1.43
(1,620)	1:A:586:GLU:H	1:A:586:GLU:HG3	9	1.03	0.06	1.05
(1,735)	1:A:652:ALA:H	1:A:654:HIS:HB3	9	0.88	0.8	0.23
(1,768)	1:A:644:GLN:HG3	1:A:647:LEU:H	9	0.5	0.36	0.43
(1,66)	1:A:602:ASP:HA	1:A:605:MET:HB3	9	0.47	0.24	0.47
(1,1124)	1:A:638:ARG:HA	1:A:638:ARG:HD3	9	0.39	0.16	0.4
(1,320)	1:A:632:ILE:HG21	1:A:636:GLN:HG3	9	0.29	0.48	0.13
(1,320)	1:A:632:ILE:HG22	1:A:636:GLN:HG3	9	0.29	0.48	0.13
(1,320)	1:A:632:ILE:HG23	1:A:636:GLN:HG3	9	0.29	0.48	0.13
(1,1196)	1:A:660:GLN:H	1:A:660:GLN:HB3	9	0.29	0.17	0.28
(1,978)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:HG21	9	0.23	0.07	0.23

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Models <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)	Median (Å)
(1,978)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:HG22	9	0.23	0.07	0.23
(1,978)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:HG23	9	0.23	0.07	0.23
(1,661)	1:A:594:HIS:H	1:A:594:HIS:HB3	8	0.73	0.24	0.81
(1,125)	1:A:591:ALA:HA	1:A:606:ARG:HD3	8	0.65	0.06	0.62
(1,1024)	1:A:606:ARG:HG3	1:A:607:ALA:H	8	0.62	0.24	0.56
(1,1025)	1:A:606:ARG:HG3	1:A:607:ALA:HA	8	0.5	0.42	0.38
(1,1154)	1:A:647:LEU:H	1:A:648:ASP:HB3	8	0.4	0.39	0.18
(1,1006)	1:A:601:ARG:HA	1:A:601:ARG:HG3	8	0.39	0.04	0.4
(1,94)	1:A:624:LYS:HA	1:A:624:LYS:HD3	8	0.35	0.12	0.37
(1,44)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HA	8	0.31	0.1	0.29
(1,961)	1:A:593:GLU:H	1:A:593:GLU:HG3	8	0.22	0.06	0.22
(1,1127)	1:A:640:GLU:H	1:A:640:GLU:HB3	8	0.2	0.18	0.14
(1,119)	1:A:633:ALA:HB1	1:A:634:PRO:HD3	8	0.18	0.04	0.18
(1,119)	1:A:633:ALA:HB2	1:A:634:PRO:HD3	8	0.18	0.04	0.18
(1,119)	1:A:633:ALA:HB3	1:A:634:PRO:HD3	8	0.18	0.04	0.18
(1,21)	1:A:591:ALA:HA	1:A:594:HIS:HB3	7	0.99	0.11	1.0
(1,370)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:581:SER:H	7	0.79	0.26	0.88
(1,664)	1:A:594:HIS:HB3	1:A:595:LEU:H	7	0.35	0.09	0.33
(1,872)	1:A:585:VAL:HG11	1:A:643:PRO:HG3	7	0.33	0.13	0.33
(1,872)	1:A:585:VAL:HG12	1:A:643:PRO:HG3	7	0.33	0.13	0.33
(1,872)	1:A:585:VAL:HG13	1:A:643:PRO:HG3	7	0.33	0.13	0.33
(1,872)	1:A:585:VAL:HG21	1:A:643:PRO:HG3	7	0.33	0.13	0.33
(1,872)	1:A:585:VAL:HG22	1:A:643:PRO:HG3	7	0.33	0.13	0.33
(1,872)	1:A:585:VAL:HG23	1:A:643:PRO:HG3	7	0.33	0.13	0.33
(1,358)	1:A:586:GLU:HG3	1:A:646:LEU:HD21	7	0.32	0.1	0.33
(1,358)	1:A:586:GLU:HG3	1:A:646:LEU:HD22	7	0.32	0.1	0.33
(1,358)	1:A:586:GLU:HG3	1:A:646:LEU:HD23	7	0.32	0.1	0.33
(1,98)	1:A:624:LYS:HB3	1:A:624:LYS:HD3	7	0.28	0.04	0.26
(1,928)	1:A:590:GLU:HA	1:A:590:GLU:HG3	7	0.19	0.04	0.2
(1,1009)	1:A:601:ARG:HB3	1:A:601:ARG:HD3	7	0.18	0.07	0.14
(1,963)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:594:HIS:H	7	0.14	0.02	0.14
(1,468)	1:A:630:ALA:H	1:A:632:ILE:H	7	0.12	0.01	0.11
(1,357)	1:A:640:GLU:HA	1:A:640:GLU:HG3	6	0.45	0.25	0.52
(1,228)	1:A:627:VAL:HG11	1:A:654:HIS:HB3	6	0.33	0.09	0.36
(1,228)	1:A:627:VAL:HG12	1:A:654:HIS:HB3	6	0.33	0.09	0.36
(1,228)	1:A:627:VAL:HG13	1:A:654:HIS:HB3	6	0.33	0.09	0.36
(1,1047)	1:A:621:ASP:H	1:A:621:ASP:HB3	6	0.3	0.04	0.29
(1,15)	1:A:591:ALA:HB1	1:A:606:ARG:HD3	6	0.2	0.08	0.18
(1,15)	1:A:591:ALA:HB2	1:A:606:ARG:HD3	6	0.2	0.08	0.18
(1,15)	1:A:591:ALA:HB3	1:A:606:ARG:HD3	6	0.2	0.08	0.18
(1,485)	1:A:630:ALA:H	1:A:647:LEU:HG	6	0.18	0.05	0.17
(1,938)	1:A:592:VAL:HA	1:A:595:LEU:HB3	6	0.14	0.03	0.15

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Models <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)	Median (Å)
(1,740)	1:A:651:LEU:H	1:A:654:HIS:HB3	5	1.39	0.63	1.52
(1,729)	1:A:653:ALA:H	1:A:654:HIS:HB3	5	1.2	0.55	1.43
(1,6)	1:A:594:HIS:HB3	1:A:595:LEU:HG	5	0.86	0.4	0.91
(1,835)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HG11	5	0.75	0.43	0.45
(1,835)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HG12	5	0.75	0.43	0.45
(1,835)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HG13	5	0.75	0.43	0.45
(1,835)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HG21	5	0.75	0.43	0.45
(1,835)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HG22	5	0.75	0.43	0.45
(1,835)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HG23	5	0.75	0.43	0.45
(1,1188)	1:A:655:ALA:HB1	1:A:658:SER:HB3	5	0.67	0.43	0.58
(1,1188)	1:A:655:ALA:HB2	1:A:658:SER:HB3	5	0.67	0.43	0.58
(1,1188)	1:A:655:ALA:HB3	1:A:658:SER:HB3	5	0.67	0.43	0.58
(1,1123)	1:A:638:ARG:H	1:A:638:ARG:HG3	5	0.44	0.27	0.32
(1,1004)	1:A:600:TRP:HB3	1:A:616:TYR:HB3	5	0.44	0.34	0.25
(1,55)	1:A:601:ARG:HA	1:A:601:ARG:HD3	5	0.43	0.28	0.21
(1,464)	1:A:633:ALA:H	1:A:636:GLN:HG3	5	0.37	0.33	0.23
(1,1010)	1:A:603:VAL:HA	1:A:606:ARG:HG3	5	0.32	0.12	0.33
(1,927)	1:A:590:GLU:H	1:A:590:GLU:HG3	5	0.25	0.08	0.28
(1,100)	1:A:626:LEU:HA	1:A:629:THR:HA	5	0.11	0.01	0.11
(1,1189)	1:A:656:TYR:H	1:A:658:SER:HB3	4	1.4	0.2	1.37
(1,1190)	1:A:657:TRP:H	1:A:658:SER:HB3	4	1.31	0.1	1.31
(1,127)	1:A:654:HIS:HB3	1:A:655:ALA:HB1	4	0.84	0.1	0.86
(1,127)	1:A:654:HIS:HB3	1:A:655:ALA:HB2	4	0.84	0.1	0.86
(1,127)	1:A:654:HIS:HB3	1:A:655:ALA:HB3	4	0.84	0.1	0.86
(1,723)	1:A:654:HIS:H	1:A:654:HIS:HB3	4	0.82	0.01	0.83
(1,714)	1:A:654:HIS:HB3	1:A:655:ALA:H	4	0.76	0.06	0.78
(1,1195)	1:A:659:GLN:H	1:A:659:GLN:HB3	4	0.56	0.02	0.56
(1,834)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG11	4	0.55	0.29	0.5
(1,834)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG12	4	0.55	0.29	0.5
(1,834)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG13	4	0.55	0.29	0.5
(1,834)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG21	4	0.55	0.29	0.5
(1,834)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG22	4	0.55	0.29	0.5
(1,834)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG23	4	0.55	0.29	0.5
(1,1191)	1:A:658:SER:H	1:A:658:SER:HB3	4	0.5	0.03	0.5
(1,932)	1:A:590:GLU:HG3	1:A:591:ALA:H	4	0.29	0.09	0.32
(1,1043)	1:A:619:LEU:HA	1:A:622:LYS:HB3	4	0.28	0.06	0.3
(1,1003)	1:A:600:TRP:HB3	1:A:616:TYR:HA	4	0.26	0.08	0.28
(1,964)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:650:VAL:H	4	0.2	0.08	0.18
(1,229)	1:A:627:VAL:HG11	1:A:651:LEU:HA	4	0.18	0.02	0.18
(1,229)	1:A:627:VAL:HG12	1:A:651:LEU:HA	4	0.18	0.02	0.18
(1,229)	1:A:627:VAL:HG13	1:A:651:LEU:HA	4	0.18	0.02	0.18
(1,67)	1:A:651:LEU:HA	1:A:654:HIS:HB3	3	0.37	0.05	0.36

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Models <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)	Median (Å)
(1,1118)	1:A:633:ALA:HB1	1:A:635:GLN:HG3	3	0.36	0.17	0.33
(1,1118)	1:A:633:ALA:HB2	1:A:635:GLN:HG3	3	0.36	0.17	0.33
(1,1118)	1:A:633:ALA:HB3	1:A:635:GLN:HG3	3	0.36	0.17	0.33
(1,1185)	1:A:651:LEU:HD11	1:A:654:HIS:HB3	3	0.34	0.03	0.36
(1,1185)	1:A:651:LEU:HD12	1:A:654:HIS:HB3	3	0.34	0.03	0.36
(1,1185)	1:A:651:LEU:HD13	1:A:654:HIS:HB3	3	0.34	0.03	0.36
(1,1185)	1:A:651:LEU:HD21	1:A:654:HIS:HB3	3	0.34	0.03	0.36
(1,1185)	1:A:651:LEU:HD22	1:A:654:HIS:HB3	3	0.34	0.03	0.36
(1,1185)	1:A:651:LEU:HD23	1:A:654:HIS:HB3	3	0.34	0.03	0.36
(1,931)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:594:HIS:H	3	0.34	0.31	0.12
(1,843)	1:A:581:SER:HB3	1:A:583:ALA:HB1	3	0.29	0.06	0.25
(1,843)	1:A:581:SER:HB3	1:A:583:ALA:HB2	3	0.29	0.06	0.25
(1,843)	1:A:581:SER:HB3	1:A:583:ALA:HB3	3	0.29	0.06	0.25
(1,910)	1:A:589:VAL:HA	1:A:593:GLU:HG3	3	0.26	0.11	0.32
(1,842)	1:A:581:SER:HB3	1:A:583:ALA:H	3	0.2	0.03	0.21
(1,536)	1:A:622:LYS:H	1:A:623:TRP:HB3	3	0.19	0.02	0.19
(1,37)	1:A:586:GLU:HA	1:A:586:GLU:HG3	3	0.13	0.01	0.13
(1,1197)	1:A:667:GLU:H	1:A:667:GLU:HB3	3	0.13	0.02	0.12
(1,1162)	1:A:648:ASP:H	1:A:648:ASP:HB3	2	0.53	0.05	0.53
(1,1036)	1:A:616:TYR:HA	1:A:619:LEU:HB3	2	0.48	0.3	0.48
(1,1007)	1:A:601:ARG:HA	1:A:604:LYS:HB3	2	0.47	0.01	0.47
(1,564)	1:A:616:TYR:H	1:A:616:TYR:HD1	2	0.42	0.22	0.42
(1,810)	1:A:640:GLU:H	1:A:640:GLU:HG3	2	0.31	0.0	0.31
(1,97)	1:A:621:ASP:HA	1:A:624:LYS:HB3	2	0.3	0.08	0.3
(1,1020)	1:A:604:LYS:HB3	1:A:619:LEU:HD11	2	0.27	0.13	0.27
(1,1020)	1:A:604:LYS:HB3	1:A:619:LEU:HD12	2	0.27	0.13	0.27
(1,1020)	1:A:604:LYS:HB3	1:A:619:LEU:HD13	2	0.27	0.13	0.27
(1,1020)	1:A:604:LYS:HB3	1:A:619:LEU:HD21	2	0.27	0.13	0.27
(1,1020)	1:A:604:LYS:HB3	1:A:619:LEU:HD22	2	0.27	0.13	0.27
(1,1020)	1:A:604:LYS:HB3	1:A:619:LEU:HD23	2	0.27	0.13	0.27
(1,1011)	1:A:603:VAL:HG11	1:A:619:LEU:HB3	2	0.25	0.03	0.25
(1,1011)	1:A:603:VAL:HG12	1:A:619:LEU:HB3	2	0.25	0.03	0.25
(1,1011)	1:A:603:VAL:HG13	1:A:619:LEU:HB3	2	0.25	0.03	0.25
(1,263)	1:A:624:LYS:HB3	1:A:625:THR:HG21	2	0.2	0.04	0.2
(1,263)	1:A:624:LYS:HB3	1:A:625:THR:HG22	2	0.2	0.04	0.2
(1,263)	1:A:624:LYS:HB3	1:A:625:THR:HG23	2	0.2	0.04	0.2
(1,1013)	1:A:604:LYS:H	1:A:604:LYS:HB3	2	0.2	0.04	0.2
(1,977)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:HA	2	0.19	0.04	0.19
(1,741)	1:A:650:VAL:HB	1:A:651:LEU:H	2	0.17	0.01	0.17
(1,504)	1:A:627:VAL:H	1:A:650:VAL:HB	2	0.16	0.01	0.16
(1,722)	1:A:650:VAL:HA	1:A:654:HIS:H	2	0.16	0.01	0.16
(1,1019)	1:A:604:LYS:HB3	1:A:606:ARG:H	2	0.16	0.01	0.16

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

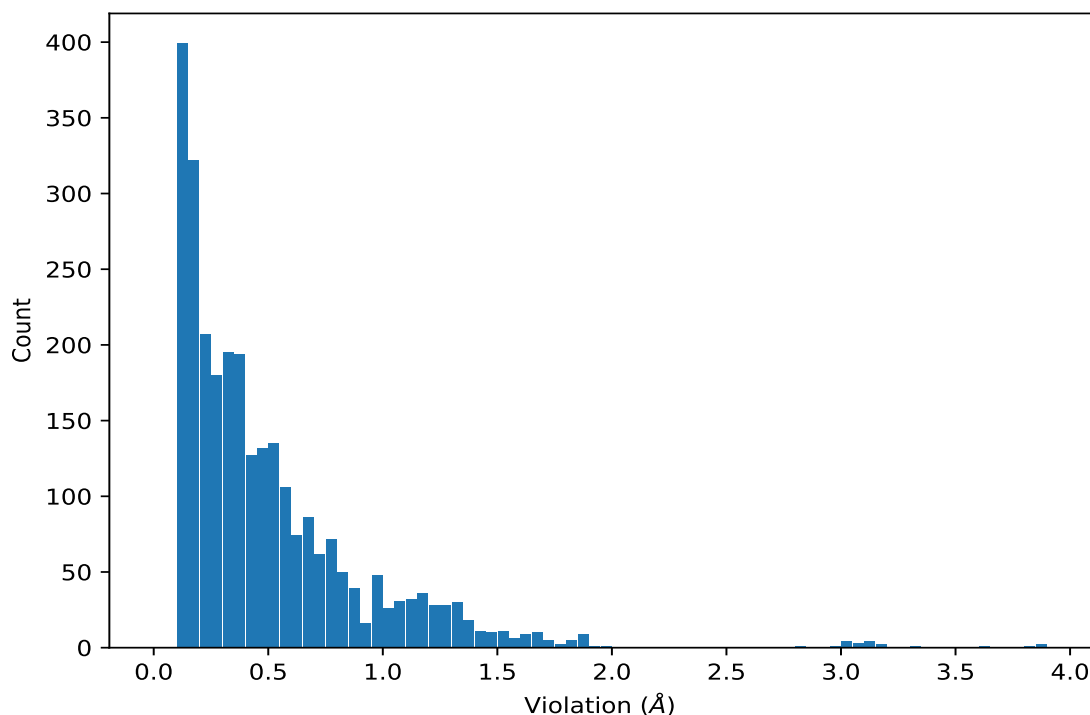
Key	Atom-1	Atom-2	Models <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)	Median (Å)
(1,455)	1:A:612:ASP:H	1:A:612:ASP:HB3	2	0.15	0.03	0.15
(1,137)	1:A:596:GLY:HA3	1:A:653:ALA:HB1	2	0.14	0.03	0.14
(1,137)	1:A:596:GLY:HA3	1:A:653:ALA:HB2	2	0.14	0.03	0.14
(1,137)	1:A:596:GLY:HA3	1:A:653:ALA:HB3	2	0.14	0.03	0.14
(1,1145)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:645:ASP:HB3	2	0.14	0.02	0.14
(2,45)	1:A:647:LEU:O	1:A:651:LEU:H	2	0.14	0.02	0.14
(1,112)	1:A:630:ALA:HB1	1:A:650:VAL:HB	2	0.13	0.01	0.13
(1,112)	1:A:630:ALA:HB2	1:A:650:VAL:HB	2	0.13	0.01	0.13
(1,112)	1:A:630:ALA:HB3	1:A:650:VAL:HB	2	0.13	0.01	0.13
(1,230)	1:A:627:VAL:HG11	1:A:654:HIS:HA	2	0.13	0.01	0.13
(1,230)	1:A:627:VAL:HG12	1:A:654:HIS:HA	2	0.13	0.01	0.13
(1,230)	1:A:627:VAL:HG13	1:A:654:HIS:HA	2	0.13	0.01	0.13
(1,820)	1:A:596:GLY:H	1:A:657:TRP:HE1	2	0.13	0.0	0.13
(1,1151)	1:A:646:LEU:H	1:A:647:LEU:HD11	2	0.12	0.01	0.12
(1,1151)	1:A:646:LEU:H	1:A:647:LEU:HD12	2	0.12	0.01	0.12
(1,1151)	1:A:646:LEU:H	1:A:647:LEU:HD13	2	0.12	0.01	0.12
(1,1151)	1:A:646:LEU:H	1:A:647:LEU:HD21	2	0.12	0.01	0.12
(1,1151)	1:A:646:LEU:H	1:A:647:LEU:HD22	2	0.12	0.01	0.12
(1,1151)	1:A:646:LEU:H	1:A:647:LEU:HD23	2	0.12	0.01	0.12
(2,39)	1:A:626:LEU:O	1:A:630:ALA:H	2	0.12	0.0	0.12
(1,49)	1:A:585:VAL:HB	1:A:587:ALA:H	2	0.11	0.0	0.11

<sup>1</sup>Number of violated models, <sup>2</sup>Standard deviation

## 9.5 All violated distance restraints [i](#)

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

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,822)	1:A:656:TYR:HD1	1:A:657:TRP:HE1	17	3.9
(1,822)	1:A:656:TYR:HD1	1:A:657:TRP:HE1	19	3.89
(1,822)	1:A:656:TYR:HD1	1:A:657:TRP:HE1	16	3.84
(1,822)	1:A:656:TYR:HD1	1:A:657:TRP:HE1	6	3.62
(1,822)	1:A:656:TYR:HD1	1:A:657:TRP:HE1	12	3.34
(1,822)	1:A:656:TYR:HD1	1:A:657:TRP:HE1	3	3.18
(1,822)	1:A:656:TYR:HD1	1:A:657:TRP:HE1	11	3.16
(1,822)	1:A:656:TYR:HD1	1:A:657:TRP:HE1	1	3.14
(1,822)	1:A:656:TYR:HD1	1:A:657:TRP:HE1	5	3.12
(1,822)	1:A:656:TYR:HD1	1:A:657:TRP:HE1	9	3.11
(1,822)	1:A:656:TYR:HD1	1:A:657:TRP:HE1	15	3.11
(1,822)	1:A:656:TYR:HD1	1:A:657:TRP:HE1	2	3.08
(1,822)	1:A:656:TYR:HD1	1:A:657:TRP:HE1	7	3.07
(1,822)	1:A:656:TYR:HD1	1:A:657:TRP:HE1	4	3.05
(1,822)	1:A:656:TYR:HD1	1:A:657:TRP:HE1	13	3.03
(1,822)	1:A:656:TYR:HD1	1:A:657:TRP:HE1	18	3.02

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,822)	1:A:656:TYR:HD1	1:A:657:TRP:HE1	10	3.01
(1,822)	1:A:656:TYR:HD1	1:A:657:TRP:HE1	14	3.01
(1,822)	1:A:656:TYR:HD1	1:A:657:TRP:HE1	8	2.99
(1,822)	1:A:656:TYR:HD1	1:A:657:TRP:HE1	20	2.81
(1,41)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HA	3	1.98
(1,41)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HA	10	1.93
(1,740)	1:A:651:LEU:H	1:A:654:HIS:HB3	16	1.88
(1,740)	1:A:651:LEU:H	1:A:654:HIS:HB3	17	1.88
(1,614)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:586:GLU:H	12	1.88
(1,614)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:586:GLU:H	19	1.88
(1,130)	1:A:623:TRP:HD1	1:A:654:HIS:HB3	13	1.88
(1,735)	1:A:652:ALA:H	1:A:654:HIS:HB3	17	1.87
(1,614)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:586:GLU:H	5	1.86
(1,614)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:586:GLU:H	16	1.86
(1,735)	1:A:652:ALA:H	1:A:654:HIS:HB3	16	1.85
(1,614)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:586:GLU:H	11	1.83
(1,614)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:586:GLU:H	9	1.82
(1,614)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:586:GLU:H	17	1.82
(1,614)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:586:GLU:H	20	1.81
(1,702)	1:A:656:TYR:HD1	1:A:657:TRP:H	19	1.8
(1,614)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:586:GLU:H	2	1.79
(1,614)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:586:GLU:H	4	1.79
(1,1001)	1:A:600:TRP:HA	1:A:616:TYR:HB3	13	1.73
(1,702)	1:A:656:TYR:HD1	1:A:657:TRP:H	12	1.72
(1,41)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HA	13	1.71
(1,735)	1:A:652:ALA:H	1:A:654:HIS:HB3	19	1.7
(1,702)	1:A:656:TYR:HD1	1:A:657:TRP:H	4	1.7
(1,1189)	1:A:656:TYR:H	1:A:658:SER:HB3	16	1.69
(1,702)	1:A:656:TYR:HD1	1:A:657:TRP:H	8	1.68
(1,702)	1:A:656:TYR:HD1	1:A:657:TRP:H	9	1.67
(1,702)	1:A:656:TYR:HD1	1:A:657:TRP:H	16	1.67
(1,702)	1:A:656:TYR:HD1	1:A:657:TRP:H	18	1.67
(1,702)	1:A:656:TYR:HD1	1:A:657:TRP:H	2	1.66
(1,702)	1:A:656:TYR:HD1	1:A:657:TRP:H	7	1.66
(1,702)	1:A:656:TYR:HD1	1:A:657:TRP:H	10	1.66
(1,515)	1:A:624:LYS:HD3	1:A:625:THR:H	19	1.66
(1,702)	1:A:656:TYR:HD1	1:A:657:TRP:H	13	1.65
(1,735)	1:A:652:ALA:H	1:A:654:HIS:HB3	6	1.64
(1,702)	1:A:656:TYR:HD1	1:A:657:TRP:H	3	1.64
(1,702)	1:A:656:TYR:HD1	1:A:657:TRP:H	14	1.64
(1,320)	1:A:632:ILE:HG21	1:A:636:GLN:HG3	12	1.64
(1,320)	1:A:632:ILE:HG22	1:A:636:GLN:HG3	12	1.64

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,320)	1:A:632:ILE:HG23	1:A:636:GLN:HG3	12	1.64
(1,1062)	1:A:626:LEU:H	1:A:628:HIS:HB3	16	1.64
(1,702)	1:A:656:TYR:HD1	1:A:657:TRP:H	20	1.62
(1,599)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:584:GLU:H	12	1.61
(1,1062)	1:A:626:LEU:H	1:A:628:HIS:HB3	11	1.59
(1,1062)	1:A:626:LEU:H	1:A:628:HIS:HB3	13	1.59
(1,702)	1:A:656:TYR:HD1	1:A:657:TRP:H	6	1.58
(1,729)	1:A:653:ALA:H	1:A:654:HIS:HB3	17	1.57
(1,702)	1:A:656:TYR:HD1	1:A:657:TRP:H	15	1.57
(1,1062)	1:A:626:LEU:H	1:A:628:HIS:HB3	4	1.56
(1,130)	1:A:623:TRP:HD1	1:A:654:HIS:HB3	10	1.54
(1,130)	1:A:623:TRP:HD1	1:A:654:HIS:HB3	15	1.54
(1,702)	1:A:656:TYR:HD1	1:A:657:TRP:H	5	1.53
(1,515)	1:A:624:LYS:HD3	1:A:625:THR:H	7	1.53
(1,41)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HA	18	1.53
(1,740)	1:A:651:LEU:H	1:A:654:HIS:HB3	19	1.52
(1,702)	1:A:656:TYR:HD1	1:A:657:TRP:H	11	1.52
(1,393)	1:A:591:ALA:H	1:A:606:ARG:HD3	4	1.52
(1,729)	1:A:653:ALA:H	1:A:654:HIS:HB3	16	1.51
(1,702)	1:A:656:TYR:HD1	1:A:657:TRP:H	17	1.51
(1,515)	1:A:624:LYS:HD3	1:A:625:THR:H	5	1.5
(1,740)	1:A:651:LEU:H	1:A:654:HIS:HB3	6	1.49
(1,1062)	1:A:626:LEU:H	1:A:628:HIS:HB3	12	1.48
(1,1062)	1:A:626:LEU:H	1:A:628:HIS:HB3	19	1.48
(1,1025)	1:A:606:ARG:HG3	1:A:607:ALA:HA	7	1.48
(1,759)	1:A:644:GLN:HG3	1:A:648:ASP:H	2	1.47
(1,130)	1:A:623:TRP:HD1	1:A:654:HIS:HB3	1	1.47
(1,1062)	1:A:626:LEU:H	1:A:628:HIS:HB3	6	1.47
(1,1190)	1:A:657:TRP:H	1:A:658:SER:HB3	16	1.46
(1,651)	1:A:593:GLU:H	1:A:594:HIS:HB3	15	1.45
(1,1189)	1:A:656:TYR:H	1:A:658:SER:HB3	6	1.45
(1,702)	1:A:656:TYR:HD1	1:A:657:TRP:H	1	1.44
(1,729)	1:A:653:ALA:H	1:A:654:HIS:HB3	19	1.43
(1,651)	1:A:593:GLU:H	1:A:594:HIS:HB3	19	1.43
(1,41)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HA	1	1.43
(1,515)	1:A:624:LYS:HD3	1:A:625:THR:H	18	1.42
(1,1130)	1:A:640:GLU:HG3	1:A:641:PRO:HD3	10	1.42
(1,651)	1:A:593:GLU:H	1:A:594:HIS:HB3	5	1.41
(1,651)	1:A:593:GLU:H	1:A:594:HIS:HB3	8	1.41
(1,1130)	1:A:640:GLU:HG3	1:A:641:PRO:HD3	7	1.41
(1,651)	1:A:593:GLU:H	1:A:594:HIS:HB3	16	1.4
(1,1062)	1:A:626:LEU:H	1:A:628:HIS:HB3	5	1.4

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,768)	1:A:644:GLN:HG3	1:A:647:LEU:H	2	1.39
(1,515)	1:A:624:LYS:HD3	1:A:625:THR:H	2	1.39
(1,1130)	1:A:640:GLU:HG3	1:A:641:PRO:HD3	15	1.39
(1,729)	1:A:653:ALA:H	1:A:654:HIS:HB3	6	1.38
(1,41)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HA	15	1.38
(1,651)	1:A:593:GLU:H	1:A:594:HIS:HB3	1	1.37
(1,651)	1:A:593:GLU:H	1:A:594:HIS:HB3	6	1.36
(1,1062)	1:A:626:LEU:H	1:A:628:HIS:HB3	2	1.36
(1,1001)	1:A:600:TRP:HA	1:A:616:TYR:HB3	18	1.36
(1,252)	1:A:597:THR:HG21	1:A:654:HIS:HB3	5	1.35
(1,252)	1:A:597:THR:HG22	1:A:654:HIS:HB3	5	1.35
(1,252)	1:A:597:THR:HG23	1:A:654:HIS:HB3	5	1.35
(1,252)	1:A:597:THR:HG21	1:A:654:HIS:HB3	12	1.35
(1,252)	1:A:597:THR:HG22	1:A:654:HIS:HB3	12	1.35
(1,252)	1:A:597:THR:HG23	1:A:654:HIS:HB3	12	1.35
(1,1190)	1:A:657:TRP:H	1:A:658:SER:HB3	6	1.35
(1,1062)	1:A:626:LEU:H	1:A:628:HIS:HB3	9	1.35
(1,1062)	1:A:626:LEU:H	1:A:628:HIS:HB3	17	1.35
(1,835)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HG11	18	1.33
(1,835)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HG12	18	1.33
(1,835)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HG13	18	1.33
(1,835)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HG21	18	1.33
(1,835)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HG22	18	1.33
(1,835)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HG23	18	1.33
(1,599)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:584:GLU:H	5	1.33
(1,1188)	1:A:655:ALA:HB1	1:A:658:SER:HB3	16	1.33
(1,1188)	1:A:655:ALA:HB2	1:A:658:SER:HB3	16	1.33
(1,1188)	1:A:655:ALA:HB3	1:A:658:SER:HB3	16	1.33
(1,1015)	1:A:604:LYS:HA	1:A:608:PHE:HB3	10	1.33
(1,1117)	1:A:633:ALA:HA	1:A:636:GLN:HB3	14	1.32
(1,81)	1:A:611:ALA:HA	1:A:612:ASP:HB3	1	1.31
(1,252)	1:A:597:THR:HG21	1:A:654:HIS:HB3	10	1.31
(1,252)	1:A:597:THR:HG22	1:A:654:HIS:HB3	10	1.31
(1,252)	1:A:597:THR:HG23	1:A:654:HIS:HB3	10	1.31
(1,1135)	1:A:642:VAL:HB	1:A:643:PRO:HG3	9	1.31
(1,1135)	1:A:642:VAL:HB	1:A:643:PRO:HG3	18	1.31
(1,1015)	1:A:604:LYS:HA	1:A:608:PHE:HB3	13	1.31
(1,1015)	1:A:604:LYS:HA	1:A:608:PHE:HB3	16	1.31
(1,81)	1:A:611:ALA:HA	1:A:612:ASP:HB3	15	1.3
(1,52)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG11	20	1.3
(1,52)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG12	20	1.3
(1,52)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG13	20	1.3

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,252)	1:A:597:THR:HG21	1:A:654:HIS:HB3	13	1.3
(1,252)	1:A:597:THR:HG22	1:A:654:HIS:HB3	13	1.3
(1,252)	1:A:597:THR:HG23	1:A:654:HIS:HB3	13	1.3
(1,130)	1:A:623:TRP:HD1	1:A:654:HIS:HB3	12	1.3
(1,1126)	1:A:638:ARG:HB3	1:A:638:ARG:HD3	2	1.3
(1,1062)	1:A:626:LEU:H	1:A:628:HIS:HB3	20	1.3
(1,599)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:584:GLU:H	17	1.29
(1,599)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:584:GLU:H	19	1.29
(1,1189)	1:A:656:TYR:H	1:A:658:SER:HB3	3	1.29
(1,1135)	1:A:642:VAL:HB	1:A:643:PRO:HG3	19	1.29
(1,1117)	1:A:633:ALA:HA	1:A:636:GLN:HB3	12	1.29
(1,1015)	1:A:604:LYS:HA	1:A:608:PHE:HB3	9	1.29
(1,52)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG11	4	1.28
(1,52)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG12	4	1.28
(1,52)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG13	4	1.28
(1,81)	1:A:611:ALA:HA	1:A:612:ASP:HB3	2	1.27
(1,81)	1:A:611:ALA:HA	1:A:612:ASP:HB3	17	1.27
(1,81)	1:A:611:ALA:HA	1:A:612:ASP:HB3	18	1.27
(1,1135)	1:A:642:VAL:HB	1:A:643:PRO:HG3	13	1.27
(1,393)	1:A:591:ALA:H	1:A:606:ARG:HD3	18	1.26
(1,1190)	1:A:657:TRP:H	1:A:658:SER:HB3	3	1.26
(1,1135)	1:A:642:VAL:HB	1:A:643:PRO:HG3	20	1.26
(1,1126)	1:A:638:ARG:HB3	1:A:638:ARG:HD3	7	1.26
(1,1015)	1:A:604:LYS:HA	1:A:608:PHE:HB3	7	1.26
(1,759)	1:A:644:GLN:HG3	1:A:648:ASP:H	5	1.25
(1,539)	1:A:622:LYS:H	1:A:624:LYS:HB3	13	1.25
(1,52)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG11	16	1.25
(1,52)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG12	16	1.25
(1,52)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG13	16	1.25
(1,515)	1:A:624:LYS:HD3	1:A:625:THR:H	8	1.25
(1,1192)	1:A:658:SER:H	1:A:659:GLN:HB3	3	1.25
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG21	1:A:636:GLN:HB3	14	1.25
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG22	1:A:636:GLN:HB3	14	1.25
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG23	1:A:636:GLN:HB3	14	1.25
(1,393)	1:A:591:ALA:H	1:A:606:ARG:HD3	11	1.24
(1,252)	1:A:597:THR:HG21	1:A:654:HIS:HB3	15	1.24
(1,252)	1:A:597:THR:HG22	1:A:654:HIS:HB3	15	1.24
(1,252)	1:A:597:THR:HG23	1:A:654:HIS:HB3	15	1.24
(1,6)	1:A:594:HIS:HB3	1:A:595:LEU:HG	15	1.23
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG21	1:A:636:GLN:HB3	12	1.23
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG22	1:A:636:GLN:HB3	12	1.23
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG23	1:A:636:GLN:HB3	12	1.23

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1015)	1:A:604:LYS:HA	1:A:608:PHE:HB3	12	1.23
(1,835)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HG11	1	1.22
(1,835)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HG12	1	1.22
(1,835)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HG13	1	1.22
(1,835)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HG21	1	1.22
(1,835)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HG22	1	1.22
(1,835)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HG23	1	1.22
(1,130)	1:A:623:TRP:HD1	1:A:654:HIS:HB3	4	1.22
(1,1062)	1:A:626:LEU:H	1:A:628:HIS:HB3	3	1.22
(1,393)	1:A:591:ALA:H	1:A:606:ARG:HD3	8	1.21
(1,393)	1:A:591:ALA:H	1:A:606:ARG:HD3	9	1.21
(1,393)	1:A:591:ALA:H	1:A:606:ARG:HD3	10	1.21
(1,120)	1:A:633:ALA:HB1	1:A:636:GLN:HG3	12	1.21
(1,120)	1:A:633:ALA:HB2	1:A:636:GLN:HG3	12	1.21
(1,120)	1:A:633:ALA:HB3	1:A:636:GLN:HG3	12	1.21
(1,860)	1:A:585:VAL:HA	1:A:586:GLU:HB3	14	1.2
(1,1129)	1:A:640:GLU:HB3	1:A:641:PRO:HD3	2	1.2
(1,1129)	1:A:640:GLU:HB3	1:A:641:PRO:HD3	9	1.2
(1,1062)	1:A:626:LEU:H	1:A:628:HIS:HB3	8	1.2
(1,1001)	1:A:600:TRP:HA	1:A:616:TYR:HB3	3	1.2
(1,860)	1:A:585:VAL:HA	1:A:586:GLU:HB3	13	1.19
(1,539)	1:A:622:LYS:H	1:A:624:LYS:HB3	12	1.19
(1,92)	1:A:597:THR:HG21	1:A:623:TRP:HB3	19	1.18
(1,92)	1:A:597:THR:HG22	1:A:623:TRP:HB3	19	1.18
(1,92)	1:A:597:THR:HG23	1:A:623:TRP:HB3	19	1.18
(1,860)	1:A:585:VAL:HA	1:A:586:GLU:HB3	20	1.18
(1,393)	1:A:591:ALA:H	1:A:606:ARG:HD3	5	1.18
(1,393)	1:A:591:ALA:H	1:A:606:ARG:HD3	16	1.18
(1,1190)	1:A:657:TRP:H	1:A:658:SER:HB3	14	1.18
(1,1117)	1:A:633:ALA:HA	1:A:636:GLN:HB3	15	1.18
(1,1062)	1:A:626:LEU:H	1:A:628:HIS:HB3	7	1.18
(1,1015)	1:A:604:LYS:HA	1:A:608:PHE:HB3	4	1.18
(1,860)	1:A:585:VAL:HA	1:A:586:GLU:HB3	5	1.17
(1,6)	1:A:594:HIS:HB3	1:A:595:LEU:HG	16	1.17
(1,428)	1:A:606:ARG:H	1:A:606:ARG:HD3	2	1.17
(1,428)	1:A:606:ARG:H	1:A:606:ARG:HD3	15	1.17
(1,1192)	1:A:658:SER:H	1:A:659:GLN:HB3	2	1.17
(1,1117)	1:A:633:ALA:HA	1:A:636:GLN:HB3	9	1.17
(1,860)	1:A:585:VAL:HA	1:A:586:GLU:HB3	3	1.16
(1,428)	1:A:606:ARG:H	1:A:606:ARG:HD3	1	1.16
(1,1192)	1:A:658:SER:H	1:A:659:GLN:HB3	10	1.16
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG21	1:A:636:GLN:HB3	9	1.16

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG22	1:A:636:GLN:HB3	9	1.16
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG23	1:A:636:GLN:HB3	9	1.16
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG21	1:A:636:GLN:HB3	15	1.16
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG22	1:A:636:GLN:HB3	15	1.16
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG23	1:A:636:GLN:HB3	15	1.16
(1,1024)	1:A:606:ARG:HG3	1:A:607:ALA:H	7	1.16
(1,1015)	1:A:604:LYS:HA	1:A:608:PHE:HB3	5	1.16
(1,860)	1:A:585:VAL:HA	1:A:586:GLU:HB3	7	1.15
(1,860)	1:A:585:VAL:HA	1:A:586:GLU:HB3	11	1.15
(1,41)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HA	7	1.15
(1,252)	1:A:597:THR:HG21	1:A:654:HIS:HB3	14	1.15
(1,252)	1:A:597:THR:HG22	1:A:654:HIS:HB3	14	1.15
(1,252)	1:A:597:THR:HG23	1:A:654:HIS:HB3	14	1.15
(1,1189)	1:A:656:TYR:H	1:A:658:SER:HB3	14	1.15
(1,860)	1:A:585:VAL:HA	1:A:586:GLU:HB3	10	1.14
(1,252)	1:A:597:THR:HG21	1:A:654:HIS:HB3	1	1.14
(1,252)	1:A:597:THR:HG22	1:A:654:HIS:HB3	1	1.14
(1,252)	1:A:597:THR:HG23	1:A:654:HIS:HB3	1	1.14
(1,1135)	1:A:642:VAL:HB	1:A:643:PRO:HG3	3	1.14
(1,1062)	1:A:626:LEU:H	1:A:628:HIS:HB3	14	1.14
(1,1001)	1:A:600:TRP:HA	1:A:616:TYR:HB3	17	1.14
(1,965)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:652:ALA:H	10	1.13
(1,1135)	1:A:642:VAL:HB	1:A:643:PRO:HG3	4	1.13
(1,1117)	1:A:633:ALA:HA	1:A:636:GLN:HB3	17	1.13
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG21	1:A:636:GLN:HB3	8	1.13
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG22	1:A:636:GLN:HB3	8	1.13
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG23	1:A:636:GLN:HB3	8	1.13
(1,1062)	1:A:626:LEU:H	1:A:628:HIS:HB3	1	1.13
(1,1015)	1:A:604:LYS:HA	1:A:608:PHE:HB3	3	1.13
(1,860)	1:A:585:VAL:HA	1:A:586:GLU:HB3	2	1.12
(1,21)	1:A:591:ALA:HA	1:A:594:HIS:HB3	15	1.12
(1,1135)	1:A:642:VAL:HB	1:A:643:PRO:HG3	15	1.12
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG21	1:A:636:GLN:HB3	17	1.12
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG22	1:A:636:GLN:HB3	17	1.12
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG23	1:A:636:GLN:HB3	17	1.12
(1,1001)	1:A:600:TRP:HA	1:A:616:TYR:HB3	4	1.12
(1,428)	1:A:606:ARG:H	1:A:606:ARG:HD3	17	1.11
(1,1117)	1:A:633:ALA:HA	1:A:636:GLN:HB3	8	1.11
(1,92)	1:A:597:THR:HG21	1:A:623:TRP:HB3	17	1.1
(1,92)	1:A:597:THR:HG22	1:A:623:TRP:HB3	17	1.1
(1,92)	1:A:597:THR:HG23	1:A:623:TRP:HB3	17	1.1
(1,428)	1:A:606:ARG:H	1:A:606:ARG:HD3	13	1.1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,428)	1:A:606:ARG:H	1:A:606:ARG:HD3	14	1.1
(1,1192)	1:A:658:SER:H	1:A:659:GLN:HB3	12	1.1
(1,1135)	1:A:642:VAL:HB	1:A:643:PRO:HG3	8	1.1
(1,1135)	1:A:642:VAL:HB	1:A:643:PRO:HG3	17	1.1
(1,428)	1:A:606:ARG:H	1:A:606:ARG:HD3	19	1.09
(1,428)	1:A:606:ARG:H	1:A:606:ARG:HD3	20	1.09
(1,41)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HA	14	1.09
(1,21)	1:A:591:ALA:HA	1:A:594:HIS:HB3	8	1.09
(1,1135)	1:A:642:VAL:HB	1:A:643:PRO:HG3	5	1.09
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG21	1:A:636:GLN:HB3	5	1.09
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG22	1:A:636:GLN:HB3	5	1.09
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG23	1:A:636:GLN:HB3	5	1.09
(1,1062)	1:A:626:LEU:H	1:A:628:HIS:HB3	10	1.09
(1,860)	1:A:585:VAL:HA	1:A:586:GLU:HB3	9	1.08
(1,599)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:584:GLU:H	2	1.08
(1,1126)	1:A:638:ARG:HB3	1:A:638:ARG:HD3	20	1.08
(1,620)	1:A:586:GLU:H	1:A:586:GLU:HG3	19	1.07
(1,1154)	1:A:647:LEU:H	1:A:648:ASP:HB3	12	1.07
(1,1135)	1:A:642:VAL:HB	1:A:643:PRO:HG3	14	1.07
(1,965)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:652:ALA:H	19	1.06
(1,620)	1:A:586:GLU:H	1:A:586:GLU:HG3	12	1.06
(1,620)	1:A:586:GLU:H	1:A:586:GLU:HG3	17	1.06
(1,620)	1:A:586:GLU:H	1:A:586:GLU:HG3	18	1.06
(1,599)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:584:GLU:H	9	1.06
(1,52)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG11	11	1.06
(1,52)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG12	11	1.06
(1,52)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG13	11	1.06
(1,370)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:581:SER:H	7	1.06
(1,252)	1:A:597:THR:HG21	1:A:654:HIS:HB3	11	1.06
(1,252)	1:A:597:THR:HG22	1:A:654:HIS:HB3	11	1.06
(1,252)	1:A:597:THR:HG23	1:A:654:HIS:HB3	11	1.06
(1,21)	1:A:591:ALA:HA	1:A:594:HIS:HB3	19	1.06
(1,1154)	1:A:647:LEU:H	1:A:648:ASP:HB3	1	1.06
(1,1062)	1:A:626:LEU:H	1:A:628:HIS:HB3	15	1.06
(1,620)	1:A:586:GLU:H	1:A:586:GLU:HG3	16	1.05
(1,860)	1:A:585:VAL:HA	1:A:586:GLU:HB3	1	1.04
(1,81)	1:A:611:ALA:HA	1:A:612:ASP:HB3	5	1.04
(1,370)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:581:SER:H	8	1.04
(1,1001)	1:A:600:TRP:HA	1:A:616:TYR:HB3	2	1.04
(1,965)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:652:ALA:H	17	1.03
(1,92)	1:A:597:THR:HG21	1:A:623:TRP:HB3	6	1.03
(1,92)	1:A:597:THR:HG22	1:A:623:TRP:HB3	6	1.03

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,92)	1:A:597:THR:HG23	1:A:623:TRP:HB3	6	1.03
(1,759)	1:A:644:GLN:HG3	1:A:648:ASP:H	14	1.03
(1,620)	1:A:586:GLU:H	1:A:586:GLU:HG3	6	1.03
(1,464)	1:A:633:ALA:H	1:A:636:GLN:HG3	12	1.03
(1,130)	1:A:623:TRP:HD1	1:A:654:HIS:HB3	11	1.03
(1,1117)	1:A:633:ALA:HA	1:A:636:GLN:HB3	5	1.03
(1,81)	1:A:611:ALA:HA	1:A:612:ASP:HB3	10	1.02
(1,620)	1:A:586:GLU:H	1:A:586:GLU:HG3	15	1.02
(1,1129)	1:A:640:GLU:HB3	1:A:641:PRO:HD3	10	1.02
(1,1038)	1:A:617:VAL:HG21	1:A:621:ASP:HB3	13	1.02
(1,1038)	1:A:617:VAL:HG22	1:A:621:ASP:HB3	13	1.02
(1,1038)	1:A:617:VAL:HG23	1:A:621:ASP:HB3	13	1.02
(1,620)	1:A:586:GLU:H	1:A:586:GLU:HG3	8	1.01
(1,41)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HA	8	1.0
(1,21)	1:A:591:ALA:HA	1:A:594:HIS:HB3	5	1.0
(1,1129)	1:A:640:GLU:HB3	1:A:641:PRO:HD3	1	1.0
(1,1129)	1:A:640:GLU:HB3	1:A:641:PRO:HD3	13	1.0
(1,1015)	1:A:604:LYS:HA	1:A:608:PHE:HB3	17	1.0
(1,1004)	1:A:600:TRP:HB3	1:A:616:TYR:HB3	13	1.0
(1,965)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:652:ALA:H	16	0.99
(1,252)	1:A:597:THR:HG21	1:A:654:HIS:HB3	3	0.99
(1,252)	1:A:597:THR:HG22	1:A:654:HIS:HB3	3	0.99
(1,252)	1:A:597:THR:HG23	1:A:654:HIS:HB3	3	0.99
(1,1015)	1:A:604:LYS:HA	1:A:608:PHE:HB3	1	0.99
(1,953)	1:A:592:VAL:HG11	1:A:623:TRP:HB3	6	0.98
(1,953)	1:A:592:VAL:HG12	1:A:623:TRP:HB3	6	0.98
(1,953)	1:A:592:VAL:HG13	1:A:623:TRP:HB3	6	0.98
(1,953)	1:A:592:VAL:HG21	1:A:623:TRP:HB3	6	0.98
(1,953)	1:A:592:VAL:HG22	1:A:623:TRP:HB3	6	0.98
(1,953)	1:A:592:VAL:HG23	1:A:623:TRP:HB3	6	0.98
(1,81)	1:A:611:ALA:HA	1:A:612:ASP:HB3	11	0.98
(1,834)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG11	12	0.97
(1,834)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG12	12	0.97
(1,834)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG13	12	0.97
(1,834)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG21	12	0.97
(1,834)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG22	12	0.97
(1,834)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG23	12	0.97
(1,370)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:581:SER:H	14	0.97
(1,1015)	1:A:604:LYS:HA	1:A:608:PHE:HB3	18	0.97
(1,854)	1:A:583:ALA:HA	1:A:586:GLU:HB3	13	0.96
(1,1126)	1:A:638:ARG:HB3	1:A:638:ARG:HD3	17	0.96
(1,1038)	1:A:617:VAL:HG21	1:A:621:ASP:HB3	2	0.96

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1038)	1:A:617:VAL:HG22	1:A:621:ASP:HB3	2	0.96
(1,1038)	1:A:617:VAL:HG23	1:A:621:ASP:HB3	2	0.96
(1,1038)	1:A:617:VAL:HG21	1:A:621:ASP:HB3	6	0.96
(1,1038)	1:A:617:VAL:HG22	1:A:621:ASP:HB3	6	0.96
(1,1038)	1:A:617:VAL:HG23	1:A:621:ASP:HB3	6	0.96
(1,965)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:652:ALA:H	9	0.95
(1,953)	1:A:592:VAL:HG11	1:A:623:TRP:HB3	19	0.95
(1,953)	1:A:592:VAL:HG12	1:A:623:TRP:HB3	19	0.95
(1,953)	1:A:592:VAL:HG13	1:A:623:TRP:HB3	19	0.95
(1,953)	1:A:592:VAL:HG21	1:A:623:TRP:HB3	19	0.95
(1,953)	1:A:592:VAL:HG22	1:A:623:TRP:HB3	19	0.95
(1,953)	1:A:592:VAL:HG23	1:A:623:TRP:HB3	19	0.95
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB1	4	0.95
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB2	4	0.95
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB3	4	0.95
(1,759)	1:A:644:GLN:HG3	1:A:648:ASP:H	17	0.95
(1,127)	1:A:654:HIS:HB3	1:A:655:ALA:HB1	17	0.95
(1,127)	1:A:654:HIS:HB3	1:A:655:ALA:HB2	17	0.95
(1,127)	1:A:654:HIS:HB3	1:A:655:ALA:HB3	17	0.95
(1,1188)	1:A:655:ALA:HB1	1:A:658:SER:HB3	6	0.95
(1,1188)	1:A:655:ALA:HB2	1:A:658:SER:HB3	6	0.95
(1,1188)	1:A:655:ALA:HB3	1:A:658:SER:HB3	6	0.95
(1,1130)	1:A:640:GLU:HG3	1:A:641:PRO:HD3	18	0.95
(1,1129)	1:A:640:GLU:HB3	1:A:641:PRO:HD3	12	0.95
(1,1126)	1:A:638:ARG:HB3	1:A:638:ARG:HD3	12	0.95
(1,81)	1:A:611:ALA:HA	1:A:612:ASP:HB3	7	0.94
(1,21)	1:A:591:ALA:HA	1:A:594:HIS:HB3	6	0.94
(1,998)	1:A:599:ARG:HG3	1:A:600:TRP:H	10	0.93
(1,1130)	1:A:640:GLU:HG3	1:A:641:PRO:HD3	16	0.93
(1,1130)	1:A:640:GLU:HG3	1:A:641:PRO:HD3	17	0.93
(1,965)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:652:ALA:H	15	0.92
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD11	1:A:636:GLN:HB3	18	0.92
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD12	1:A:636:GLN:HB3	18	0.92
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD13	1:A:636:GLN:HB3	18	0.92
(1,1015)	1:A:604:LYS:HA	1:A:608:PHE:HB3	11	0.92
(1,6)	1:A:594:HIS:HB3	1:A:595:LEU:HG	1	0.91
(1,130)	1:A:623:TRP:HD1	1:A:654:HIS:HB3	3	0.91
(1,130)	1:A:623:TRP:HD1	1:A:654:HIS:HB3	9	0.9
(1,1163)	1:A:648:ASP:H	1:A:649:ARG:HG3	10	0.9
(1,1123)	1:A:638:ARG:H	1:A:638:ARG:HG3	18	0.9
(1,1015)	1:A:604:LYS:HA	1:A:608:PHE:HB3	8	0.9
(1,854)	1:A:583:ALA:HA	1:A:586:GLU:HB3	14	0.89

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,81)	1:A:611:ALA:HA	1:A:612:ASP:HB3	12	0.89
(1,965)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:652:ALA:H	14	0.88
(1,81)	1:A:611:ALA:HA	1:A:612:ASP:HB3	13	0.88
(1,6)	1:A:594:HIS:HB3	1:A:595:LEU:HG	6	0.88
(1,370)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:581:SER:H	15	0.88
(1,127)	1:A:654:HIS:HB3	1:A:655:ALA:HB1	16	0.88
(1,127)	1:A:654:HIS:HB3	1:A:655:ALA:HB2	16	0.88
(1,127)	1:A:654:HIS:HB3	1:A:655:ALA:HB3	16	0.88
(1,1163)	1:A:648:ASP:H	1:A:649:ARG:HG3	6	0.88
(1,1126)	1:A:638:ARG:HB3	1:A:638:ARG:HD3	9	0.88
(1,926)	1:A:590:GLU:H	1:A:590:GLU:HB3	5	0.87
(1,926)	1:A:590:GLU:H	1:A:590:GLU:HB3	14	0.87
(1,620)	1:A:586:GLU:H	1:A:586:GLU:HG3	4	0.87
(1,21)	1:A:591:ALA:HA	1:A:594:HIS:HB3	16	0.87
(1,1117)	1:A:633:ALA:HA	1:A:636:GLN:HB3	10	0.87
(1,1001)	1:A:600:TRP:HA	1:A:616:TYR:HB3	8	0.87
(1,926)	1:A:590:GLU:H	1:A:590:GLU:HB3	1	0.86
(1,926)	1:A:590:GLU:H	1:A:590:GLU:HB3	3	0.86
(1,926)	1:A:590:GLU:H	1:A:590:GLU:HB3	8	0.86
(1,926)	1:A:590:GLU:H	1:A:590:GLU:HB3	15	0.86
(1,599)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:584:GLU:H	11	0.86
(1,1015)	1:A:604:LYS:HA	1:A:608:PHE:HB3	2	0.86
(1,1015)	1:A:604:LYS:HA	1:A:608:PHE:HB3	6	0.86
(1,926)	1:A:590:GLU:H	1:A:590:GLU:HB3	2	0.85
(1,926)	1:A:590:GLU:H	1:A:590:GLU:HB3	6	0.85
(1,926)	1:A:590:GLU:H	1:A:590:GLU:HB3	11	0.85
(1,926)	1:A:590:GLU:H	1:A:590:GLU:HB3	20	0.85
(1,854)	1:A:583:ALA:HA	1:A:586:GLU:HB3	10	0.85
(1,661)	1:A:594:HIS:H	1:A:594:HIS:HB3	15	0.85
(1,661)	1:A:594:HIS:H	1:A:594:HIS:HB3	16	0.85
(1,127)	1:A:654:HIS:HB3	1:A:655:ALA:HB1	19	0.85
(1,127)	1:A:654:HIS:HB3	1:A:655:ALA:HB2	19	0.85
(1,127)	1:A:654:HIS:HB3	1:A:655:ALA:HB3	19	0.85
(1,1126)	1:A:638:ARG:HB3	1:A:638:ARG:HD3	3	0.85
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD11	1:A:636:GLN:HB3	8	0.85
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD12	1:A:636:GLN:HB3	8	0.85
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD13	1:A:636:GLN:HB3	8	0.85
(1,1015)	1:A:604:LYS:HA	1:A:608:PHE:HB3	20	0.85
(1,926)	1:A:590:GLU:H	1:A:590:GLU:HB3	7	0.84
(1,926)	1:A:590:GLU:H	1:A:590:GLU:HB3	9	0.84
(1,926)	1:A:590:GLU:H	1:A:590:GLU:HB3	10	0.84
(1,926)	1:A:590:GLU:H	1:A:590:GLU:HB3	13	0.84

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,926)	1:A:590:GLU:H	1:A:590:GLU:HB3	18	0.84
(1,92)	1:A:597:THR:HG21	1:A:623:TRP:HB3	4	0.84
(1,92)	1:A:597:THR:HG22	1:A:623:TRP:HB3	4	0.84
(1,92)	1:A:597:THR:HG23	1:A:623:TRP:HB3	4	0.84
(1,393)	1:A:591:ALA:H	1:A:606:ARG:HD3	1	0.84
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG21	1:A:636:GLN:HB3	10	0.84
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG22	1:A:636:GLN:HB3	10	0.84
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG23	1:A:636:GLN:HB3	10	0.84
(1,723)	1:A:654:HIS:H	1:A:654:HIS:HB3	16	0.83
(1,723)	1:A:654:HIS:H	1:A:654:HIS:HB3	17	0.83
(1,723)	1:A:654:HIS:H	1:A:654:HIS:HB3	19	0.83
(1,661)	1:A:594:HIS:H	1:A:594:HIS:HB3	19	0.83
(1,1130)	1:A:640:GLU:HG3	1:A:641:PRO:HD3	12	0.83
(1,1117)	1:A:633:ALA:HA	1:A:636:GLN:HB3	3	0.83
(1,1015)	1:A:604:LYS:HA	1:A:608:PHE:HB3	19	0.83
(1,965)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:652:ALA:H	20	0.82
(1,827)	1:A:649:ARG:H	1:A:649:ARG:HD3	18	0.82
(1,661)	1:A:594:HIS:H	1:A:594:HIS:HB3	5	0.82
(1,66)	1:A:602:ASP:HA	1:A:605:MET:HB3	14	0.82
(1,574)	1:A:599:ARG:H	1:A:599:ARG:HD3	10	0.82
(1,21)	1:A:591:ALA:HA	1:A:594:HIS:HB3	1	0.82
(1,135)	1:A:653:ALA:HB1	1:A:654:HIS:HB3	6	0.82
(1,135)	1:A:653:ALA:HB2	1:A:654:HIS:HB3	6	0.82
(1,135)	1:A:653:ALA:HB3	1:A:654:HIS:HB3	6	0.82
(1,966)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:H	9	0.81
(1,926)	1:A:590:GLU:H	1:A:590:GLU:HB3	17	0.81
(1,926)	1:A:590:GLU:H	1:A:590:GLU:HB3	19	0.81
(1,723)	1:A:654:HIS:H	1:A:654:HIS:HB3	6	0.81
(1,714)	1:A:654:HIS:HB3	1:A:655:ALA:H	17	0.81
(1,130)	1:A:623:TRP:HD1	1:A:654:HIS:HB3	2	0.81
(1,130)	1:A:623:TRP:HD1	1:A:654:HIS:HB3	6	0.81
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG21	1:A:636:GLN:HB3	3	0.81
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG22	1:A:636:GLN:HB3	3	0.81
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG23	1:A:636:GLN:HB3	3	0.81
(1,965)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:652:ALA:H	3	0.8
(1,926)	1:A:590:GLU:H	1:A:590:GLU:HB3	16	0.8
(1,661)	1:A:594:HIS:H	1:A:594:HIS:HB3	1	0.8
(1,252)	1:A:597:THR:HG21	1:A:654:HIS:HB3	8	0.8
(1,252)	1:A:597:THR:HG22	1:A:654:HIS:HB3	8	0.8
(1,252)	1:A:597:THR:HG23	1:A:654:HIS:HB3	8	0.8
(1,252)	1:A:597:THR:HG21	1:A:654:HIS:HB3	18	0.8
(1,252)	1:A:597:THR:HG22	1:A:654:HIS:HB3	18	0.8

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,252)	1:A:597:THR:HG23	1:A:654:HIS:HB3	18	0.8
(1,1163)	1:A:648:ASP:H	1:A:649:ARG:HG3	17	0.8
(1,1015)	1:A:604:LYS:HA	1:A:608:PHE:HB3	14	0.8
(1,1015)	1:A:604:LYS:HA	1:A:608:PHE:HB3	15	0.8
(1,966)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:H	19	0.79
(1,926)	1:A:590:GLU:H	1:A:590:GLU:HB3	12	0.79
(1,714)	1:A:654:HIS:HB3	1:A:655:ALA:H	19	0.79
(1,661)	1:A:594:HIS:H	1:A:594:HIS:HB3	6	0.79
(1,661)	1:A:594:HIS:H	1:A:594:HIS:HB3	8	0.79
(1,135)	1:A:653:ALA:HB1	1:A:654:HIS:HB3	16	0.79
(1,135)	1:A:653:ALA:HB2	1:A:654:HIS:HB3	16	0.79
(1,135)	1:A:653:ALA:HB3	1:A:654:HIS:HB3	16	0.79
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG21	1:A:636:GLN:HB3	20	0.79
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG22	1:A:636:GLN:HB3	20	0.79
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG23	1:A:636:GLN:HB3	20	0.79
(1,979)	1:A:595:LEU:HG	1:A:599:ARG:HB3	17	0.78
(1,931)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:594:HIS:H	4	0.78
(1,827)	1:A:649:ARG:H	1:A:649:ARG:HD3	9	0.78
(1,599)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:584:GLU:H	16	0.78
(1,55)	1:A:601:ARG:HA	1:A:601:ARG:HD3	14	0.78
(1,419)	1:A:605:MET:H	1:A:605:MET:HB3	4	0.78
(1,419)	1:A:605:MET:H	1:A:605:MET:HB3	6	0.78
(1,419)	1:A:605:MET:H	1:A:605:MET:HB3	8	0.78
(1,419)	1:A:605:MET:H	1:A:605:MET:HB3	10	0.78
(1,419)	1:A:605:MET:H	1:A:605:MET:HB3	14	0.78
(1,130)	1:A:623:TRP:HD1	1:A:654:HIS:HB3	16	0.78
(1,1036)	1:A:616:TYR:HA	1:A:619:LEU:HB3	15	0.78
(1,979)	1:A:595:LEU:HG	1:A:599:ARG:HB3	12	0.77
(1,979)	1:A:595:LEU:HG	1:A:599:ARG:HB3	14	0.77
(1,881)	1:A:587:ALA:HA	1:A:590:GLU:HB3	14	0.77
(1,854)	1:A:583:ALA:HA	1:A:586:GLU:HB3	20	0.77
(1,714)	1:A:654:HIS:HB3	1:A:655:ALA:H	16	0.77
(1,419)	1:A:605:MET:H	1:A:605:MET:HB3	2	0.77
(1,419)	1:A:605:MET:H	1:A:605:MET:HB3	9	0.77
(1,135)	1:A:653:ALA:HB1	1:A:654:HIS:HB3	19	0.77
(1,135)	1:A:653:ALA:HB2	1:A:654:HIS:HB3	19	0.77
(1,135)	1:A:653:ALA:HB3	1:A:654:HIS:HB3	19	0.77
(1,125)	1:A:591:ALA:HA	1:A:606:ARG:HD3	5	0.77
(1,1126)	1:A:638:ARG:HB3	1:A:638:ARG:HD3	6	0.77
(1,1001)	1:A:600:TRP:HA	1:A:616:TYR:HB3	16	0.77
(1,979)	1:A:595:LEU:HG	1:A:599:ARG:HB3	4	0.76
(1,979)	1:A:595:LEU:HG	1:A:599:ARG:HB3	5	0.76

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,979)	1:A:595:LEU:HG	1:A:599:ARG:HB3	13	0.76
(1,599)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:584:GLU:H	4	0.76
(1,574)	1:A:599:ARG:H	1:A:599:ARG:HD3	16	0.76
(1,419)	1:A:605:MET:H	1:A:605:MET:HB3	1	0.76
(1,393)	1:A:591:ALA:H	1:A:606:ARG:HD3	15	0.76
(1,277)	1:A:588:LEU:HD21	1:A:623:TRP:HB3	13	0.76
(1,277)	1:A:588:LEU:HD22	1:A:623:TRP:HB3	13	0.76
(1,277)	1:A:588:LEU:HD23	1:A:623:TRP:HB3	13	0.76
(1,135)	1:A:653:ALA:HB1	1:A:654:HIS:HB3	17	0.76
(1,135)	1:A:653:ALA:HB2	1:A:654:HIS:HB3	17	0.76
(1,135)	1:A:653:ALA:HB3	1:A:654:HIS:HB3	17	0.76
(1,1126)	1:A:638:ARG:HB3	1:A:638:ARG:HD3	5	0.76
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD11	1:A:636:GLN:HB3	9	0.76
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD12	1:A:636:GLN:HB3	9	0.76
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD13	1:A:636:GLN:HB3	9	0.76
(1,1038)	1:A:617:VAL:HG21	1:A:621:ASP:HB3	3	0.76
(1,1038)	1:A:617:VAL:HG22	1:A:621:ASP:HB3	3	0.76
(1,1038)	1:A:617:VAL:HG23	1:A:621:ASP:HB3	3	0.76
(1,1001)	1:A:600:TRP:HA	1:A:616:TYR:HB3	12	0.76
(1,979)	1:A:595:LEU:HG	1:A:599:ARG:HB3	8	0.75
(1,979)	1:A:595:LEU:HG	1:A:599:ARG:HB3	18	0.75
(1,879)	1:A:586:GLU:HB3	1:A:646:LEU:HD11	10	0.75
(1,879)	1:A:586:GLU:HB3	1:A:646:LEU:HD12	10	0.75
(1,879)	1:A:586:GLU:HB3	1:A:646:LEU:HD13	10	0.75
(1,853)	1:A:583:ALA:H	1:A:584:GLU:HG3	2	0.75
(1,66)	1:A:602:ASP:HA	1:A:605:MET:HB3	8	0.75
(1,574)	1:A:599:ARG:H	1:A:599:ARG:HD3	20	0.75
(1,55)	1:A:601:ARG:HA	1:A:601:ARG:HD3	1	0.75
(1,419)	1:A:605:MET:H	1:A:605:MET:HB3	19	0.75
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD11	1:A:636:GLN:HB3	1	0.75
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD12	1:A:636:GLN:HB3	1	0.75
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD13	1:A:636:GLN:HB3	1	0.75
(1,1097)	1:A:628:HIS:H	1:A:628:HIS:HB3	4	0.75
(1,1097)	1:A:628:HIS:H	1:A:628:HIS:HB3	16	0.75
(1,979)	1:A:595:LEU:HG	1:A:599:ARG:HB3	2	0.74
(1,966)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:H	17	0.74
(1,965)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:652:ALA:H	7	0.74
(1,92)	1:A:597:THR:HG21	1:A:623:TRP:HB3	16	0.74
(1,92)	1:A:597:THR:HG22	1:A:623:TRP:HB3	16	0.74
(1,92)	1:A:597:THR:HG23	1:A:623:TRP:HB3	16	0.74
(1,853)	1:A:583:ALA:H	1:A:584:GLU:HG3	7	0.74
(1,66)	1:A:602:ASP:HA	1:A:605:MET:HB3	4	0.74

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1163)	1:A:648:ASP:H	1:A:649:ARG:HG3	19	0.74
(1,1129)	1:A:640:GLU:HB3	1:A:641:PRO:HD3	15	0.74
(1,1117)	1:A:633:ALA:HA	1:A:636:GLN:HB3	20	0.74
(1,1097)	1:A:628:HIS:H	1:A:628:HIS:HB3	6	0.74
(1,1097)	1:A:628:HIS:H	1:A:628:HIS:HB3	12	0.74
(1,1097)	1:A:628:HIS:H	1:A:628:HIS:HB3	19	0.74
(1,1097)	1:A:628:HIS:H	1:A:628:HIS:HB3	20	0.74
(1,1024)	1:A:606:ARG:HG3	1:A:607:ALA:H	12	0.74
(1,877)	1:A:586:GLU:H	1:A:586:GLU:HB3	13	0.73
(1,877)	1:A:586:GLU:H	1:A:586:GLU:HB3	20	0.73
(1,759)	1:A:644:GLN:HG3	1:A:648:ASP:H	20	0.73
(1,523)	1:A:624:LYS:H	1:A:624:LYS:HB3	13	0.73
(1,419)	1:A:605:MET:H	1:A:605:MET:HB3	16	0.73
(1,370)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:581:SER:H	18	0.73
(1,252)	1:A:597:THR:HG21	1:A:654:HIS:HB3	7	0.73
(1,252)	1:A:597:THR:HG22	1:A:654:HIS:HB3	7	0.73
(1,252)	1:A:597:THR:HG23	1:A:654:HIS:HB3	7	0.73
(1,131)	1:A:627:VAL:HB	1:A:654:HIS:HB3	17	0.73
(1,125)	1:A:591:ALA:HA	1:A:606:ARG:HD3	16	0.73
(1,1163)	1:A:648:ASP:H	1:A:649:ARG:HG3	11	0.73
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG21	1:A:636:GLN:HB3	18	0.73
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG22	1:A:636:GLN:HB3	18	0.73
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG23	1:A:636:GLN:HB3	18	0.73
(1,1097)	1:A:628:HIS:H	1:A:628:HIS:HB3	11	0.73
(1,1097)	1:A:628:HIS:H	1:A:628:HIS:HB3	13	0.73
(1,1038)	1:A:617:VAL:HG21	1:A:621:ASP:HB3	19	0.73
(1,1038)	1:A:617:VAL:HG22	1:A:621:ASP:HB3	19	0.73
(1,1038)	1:A:617:VAL:HG23	1:A:621:ASP:HB3	19	0.73
(1,966)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:H	10	0.72
(1,252)	1:A:597:THR:HG21	1:A:654:HIS:HB3	2	0.72
(1,252)	1:A:597:THR:HG22	1:A:654:HIS:HB3	2	0.72
(1,252)	1:A:597:THR:HG23	1:A:654:HIS:HB3	2	0.72
(1,1097)	1:A:628:HIS:H	1:A:628:HIS:HB3	5	0.72
(1,966)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:H	16	0.71
(1,574)	1:A:599:ARG:H	1:A:599:ARG:HD3	13	0.71
(1,515)	1:A:624:LYS:HD3	1:A:625:THR:H	13	0.71
(1,419)	1:A:605:MET:H	1:A:605:MET:HB3	15	0.71
(1,1097)	1:A:628:HIS:H	1:A:628:HIS:HB3	2	0.71
(1,1097)	1:A:628:HIS:H	1:A:628:HIS:HB3	17	0.71
(1,1001)	1:A:600:TRP:HA	1:A:616:TYR:HB3	11	0.71
(1,979)	1:A:595:LEU:HG	1:A:599:ARG:HB3	11	0.7
(1,975)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:596:GLY:H	8	0.7

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,965)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:652:ALA:H	5	0.7
(1,877)	1:A:586:GLU:H	1:A:586:GLU:HB3	14	0.7
(1,853)	1:A:583:ALA:H	1:A:584:GLU:HG3	9	0.7
(1,853)	1:A:583:ALA:H	1:A:584:GLU:HG3	14	0.7
(1,357)	1:A:640:GLU:HA	1:A:640:GLU:HG3	10	0.7
(1,131)	1:A:627:VAL:HB	1:A:654:HIS:HB3	16	0.7
(1,130)	1:A:623:TRP:HD1	1:A:654:HIS:HB3	19	0.7
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD11	1:A:636:GLN:HB3	3	0.7
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD12	1:A:636:GLN:HB3	3	0.7
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD13	1:A:636:GLN:HB3	3	0.7
(1,1097)	1:A:628:HIS:H	1:A:628:HIS:HB3	7	0.7
(1,1097)	1:A:628:HIS:H	1:A:628:HIS:HB3	9	0.7
(1,998)	1:A:599:ARG:HG3	1:A:600:TRP:H	17	0.69
(1,975)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:596:GLY:H	14	0.69
(1,965)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:652:ALA:H	11	0.69
(1,965)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:652:ALA:H	18	0.69
(1,879)	1:A:586:GLU:HB3	1:A:646:LEU:HD11	1	0.69
(1,879)	1:A:586:GLU:HB3	1:A:646:LEU:HD12	1	0.69
(1,879)	1:A:586:GLU:HB3	1:A:646:LEU:HD13	1	0.69
(1,879)	1:A:586:GLU:HB3	1:A:646:LEU:HD11	2	0.69
(1,879)	1:A:586:GLU:HB3	1:A:646:LEU:HD12	2	0.69
(1,879)	1:A:586:GLU:HB3	1:A:646:LEU:HD13	2	0.69
(1,877)	1:A:586:GLU:H	1:A:586:GLU:HB3	10	0.69
(1,853)	1:A:583:ALA:H	1:A:584:GLU:HG3	11	0.69
(1,589)	1:A:636:GLN:HG3	1:A:637:ARG:H	6	0.69
(1,130)	1:A:623:TRP:HD1	1:A:654:HIS:HB3	17	0.69
(1,1127)	1:A:640:GLU:H	1:A:640:GLU:HB3	20	0.69
(1,1097)	1:A:628:HIS:H	1:A:628:HIS:HB3	8	0.69
(1,877)	1:A:586:GLU:H	1:A:586:GLU:HB3	11	0.68
(1,81)	1:A:611:ALA:HA	1:A:612:ASP:HB3	9	0.68
(1,768)	1:A:644:GLN:HG3	1:A:647:LEU:H	17	0.68
(1,589)	1:A:636:GLN:HG3	1:A:637:ARG:H	16	0.68
(1,589)	1:A:636:GLN:HG3	1:A:637:ARG:H	19	0.68
(1,574)	1:A:599:ARG:H	1:A:599:ARG:HD3	19	0.68
(1,523)	1:A:624:LYS:H	1:A:624:LYS:HB3	12	0.68
(1,357)	1:A:640:GLU:HA	1:A:640:GLU:HG3	7	0.68
(1,357)	1:A:640:GLU:HA	1:A:640:GLU:HG3	15	0.68
(1,131)	1:A:627:VAL:HB	1:A:654:HIS:HB3	11	0.68
(1,1125)	1:A:638:ARG:HB3	1:A:638:ARG:HG3	13	0.68
(1,1025)	1:A:606:ARG:HG3	1:A:607:ALA:HA	12	0.68
(1,1024)	1:A:606:ARG:HG3	1:A:607:ALA:H	1	0.68
(1,998)	1:A:599:ARG:HG3	1:A:600:TRP:H	19	0.67

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,975)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:596:GLY:H	18	0.67
(1,966)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:H	15	0.67
(1,965)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:652:ALA:H	12	0.67
(1,853)	1:A:583:ALA:H	1:A:584:GLU:HG3	10	0.67
(1,834)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG11	4	0.67
(1,834)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG12	4	0.67
(1,834)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG13	4	0.67
(1,834)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG21	4	0.67
(1,834)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG22	4	0.67
(1,834)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG23	4	0.67
(1,807)	1:A:633:ALA:H	1:A:634:PRO:HD3	17	0.67
(1,52)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG11	19	0.67
(1,52)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG12	19	0.67
(1,52)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG13	19	0.67
(1,130)	1:A:623:TRP:HD1	1:A:654:HIS:HB3	5	0.67
(1,127)	1:A:654:HIS:HB3	1:A:655:ALA:HB1	6	0.67
(1,127)	1:A:654:HIS:HB3	1:A:655:ALA:HB2	6	0.67
(1,127)	1:A:654:HIS:HB3	1:A:655:ALA:HB3	6	0.67
(1,1125)	1:A:638:ARG:HB3	1:A:638:ARG:HG3	4	0.67
(1,1097)	1:A:628:HIS:H	1:A:628:HIS:HB3	1	0.67
(1,1050)	1:A:622:LYS:H	1:A:622:LYS:HB3	4	0.67
(1,1022)	1:A:606:ARG:H	1:A:606:ARG:HG3	7	0.67
(1,998)	1:A:599:ARG:HG3	1:A:600:TRP:H	11	0.66
(1,979)	1:A:595:LEU:HG	1:A:599:ARG:HB3	19	0.66
(1,975)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:596:GLY:H	10	0.66
(1,975)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:596:GLY:H	11	0.66
(1,879)	1:A:586:GLU:HB3	1:A:646:LEU:HD11	7	0.66
(1,879)	1:A:586:GLU:HB3	1:A:646:LEU:HD12	7	0.66
(1,879)	1:A:586:GLU:HB3	1:A:646:LEU:HD13	7	0.66
(1,877)	1:A:586:GLU:H	1:A:586:GLU:HB3	5	0.66
(1,877)	1:A:586:GLU:H	1:A:586:GLU:HB3	7	0.66
(1,807)	1:A:633:ALA:H	1:A:634:PRO:HD3	5	0.66
(1,807)	1:A:633:ALA:H	1:A:634:PRO:HD3	12	0.66
(1,714)	1:A:654:HIS:HB3	1:A:655:ALA:H	6	0.66
(1,599)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:584:GLU:H	20	0.66
(1,52)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG11	2	0.66
(1,52)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG12	2	0.66
(1,52)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG13	2	0.66
(1,1125)	1:A:638:ARG:HB3	1:A:638:ARG:HG3	1	0.66
(1,1097)	1:A:628:HIS:H	1:A:628:HIS:HB3	14	0.66
(1,1097)	1:A:628:HIS:H	1:A:628:HIS:HB3	15	0.66
(1,1050)	1:A:622:LYS:H	1:A:622:LYS:HB3	3	0.66

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,975)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:596:GLY:H	2	0.65
(1,966)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:H	3	0.65
(1,966)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:H	14	0.65
(1,965)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:652:ALA:H	8	0.65
(1,877)	1:A:586:GLU:H	1:A:586:GLU:HB3	3	0.65
(1,797)	1:A:659:GLN:HG3	1:A:660:GLN:H	17	0.65
(1,589)	1:A:636:GLN:HG3	1:A:637:ARG:H	11	0.65
(1,428)	1:A:606:ARG:H	1:A:606:ARG:HD3	6	0.65
(1,372)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:581:SER:H	12	0.65
(1,1196)	1:A:660:GLN:H	1:A:660:GLN:HB3	11	0.65
(1,1117)	1:A:633:ALA:HA	1:A:636:GLN:HB3	2	0.65
(1,1097)	1:A:628:HIS:H	1:A:628:HIS:HB3	3	0.65
(1,1097)	1:A:628:HIS:H	1:A:628:HIS:HB3	10	0.65
(1,1050)	1:A:622:LYS:H	1:A:622:LYS:HB3	2	0.65
(1,998)	1:A:599:ARG:HG3	1:A:600:TRP:H	9	0.64
(1,854)	1:A:583:ALA:HA	1:A:586:GLU:HB3	7	0.64
(1,564)	1:A:616:TYR:H	1:A:616:TYR:HD1	13	0.64
(1,393)	1:A:591:ALA:H	1:A:606:ARG:HD3	2	0.64
(1,131)	1:A:627:VAL:HB	1:A:654:HIS:HB3	19	0.64
(1,125)	1:A:591:ALA:HA	1:A:606:ARG:HD3	10	0.64
(1,1168)	1:A:649:ARG:H	1:A:649:ARG:HG3	4	0.64
(1,1168)	1:A:649:ARG:H	1:A:649:ARG:HG3	6	0.64
(1,1130)	1:A:640:GLU:HG3	1:A:641:PRO:HD3	5	0.64
(1,1117)	1:A:633:ALA:HA	1:A:636:GLN:HB3	1	0.64
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD11	1:A:636:GLN:HB3	16	0.64
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD12	1:A:636:GLN:HB3	16	0.64
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD13	1:A:636:GLN:HB3	16	0.64
(1,1050)	1:A:622:LYS:H	1:A:622:LYS:HB3	18	0.64
(1,1004)	1:A:600:TRP:HB3	1:A:616:TYR:HB3	3	0.64
(1,998)	1:A:599:ARG:HG3	1:A:600:TRP:H	18	0.63
(1,979)	1:A:595:LEU:HG	1:A:599:ARG:HB3	10	0.63
(1,879)	1:A:586:GLU:HB3	1:A:646:LEU:HD11	20	0.63
(1,879)	1:A:586:GLU:HB3	1:A:646:LEU:HD12	20	0.63
(1,879)	1:A:586:GLU:HB3	1:A:646:LEU:HD13	20	0.63
(1,877)	1:A:586:GLU:H	1:A:586:GLU:HB3	2	0.63
(1,81)	1:A:611:ALA:HA	1:A:612:ASP:HB3	14	0.63
(1,797)	1:A:659:GLN:HG3	1:A:660:GLN:H	2	0.63
(1,797)	1:A:659:GLN:HG3	1:A:660:GLN:H	3	0.63
(1,574)	1:A:599:ARG:H	1:A:599:ARG:HD3	9	0.63
(1,574)	1:A:599:ARG:H	1:A:599:ARG:HD3	17	0.63
(1,131)	1:A:627:VAL:HB	1:A:654:HIS:HB3	6	0.63
(1,1168)	1:A:649:ARG:H	1:A:649:ARG:HG3	2	0.63

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1168)	1:A:649:ARG:H	1:A:649:ARG:HG3	3	0.63
(1,1168)	1:A:649:ARG:H	1:A:649:ARG:HG3	10	0.63
(1,1117)	1:A:633:ALA:HA	1:A:636:GLN:HB3	18	0.63
(1,877)	1:A:586:GLU:H	1:A:586:GLU:HB3	1	0.62
(1,853)	1:A:583:ALA:H	1:A:584:GLU:HG3	3	0.62
(1,589)	1:A:636:GLN:HG3	1:A:637:ARG:H	13	0.62
(1,125)	1:A:591:ALA:HA	1:A:606:ARG:HD3	8	0.62
(1,125)	1:A:591:ALA:HA	1:A:606:ARG:HD3	18	0.62
(1,975)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:596:GLY:H	4	0.61
(1,965)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:652:ALA:H	1	0.61
(1,953)	1:A:592:VAL:HG11	1:A:623:TRP:HB3	4	0.61
(1,953)	1:A:592:VAL:HG12	1:A:623:TRP:HB3	4	0.61
(1,953)	1:A:592:VAL:HG13	1:A:623:TRP:HB3	4	0.61
(1,953)	1:A:592:VAL:HG21	1:A:623:TRP:HB3	4	0.61
(1,953)	1:A:592:VAL:HG22	1:A:623:TRP:HB3	4	0.61
(1,953)	1:A:592:VAL:HG23	1:A:623:TRP:HB3	4	0.61
(1,827)	1:A:649:ARG:H	1:A:649:ARG:HD3	14	0.61
(1,807)	1:A:633:ALA:H	1:A:634:PRO:HD3	14	0.61
(1,768)	1:A:644:GLN:HG3	1:A:647:LEU:H	19	0.61
(1,589)	1:A:636:GLN:HG3	1:A:637:ARG:H	4	0.61
(1,252)	1:A:597:THR:HG21	1:A:654:HIS:HB3	9	0.61
(1,252)	1:A:597:THR:HG22	1:A:654:HIS:HB3	9	0.61
(1,252)	1:A:597:THR:HG23	1:A:654:HIS:HB3	9	0.61
(1,125)	1:A:591:ALA:HA	1:A:606:ARG:HD3	4	0.61
(1,125)	1:A:591:ALA:HA	1:A:606:ARG:HD3	9	0.61
(1,1126)	1:A:638:ARG:HB3	1:A:638:ARG:HD3	11	0.61
(1,1038)	1:A:617:VAL:HG21	1:A:621:ASP:HB3	1	0.61
(1,1038)	1:A:617:VAL:HG22	1:A:621:ASP:HB3	1	0.61
(1,1038)	1:A:617:VAL:HG23	1:A:621:ASP:HB3	1	0.61
(1,965)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:652:ALA:H	13	0.6
(1,81)	1:A:611:ALA:HA	1:A:612:ASP:HB3	6	0.6
(1,807)	1:A:633:ALA:H	1:A:634:PRO:HD3	15	0.6
(1,759)	1:A:644:GLN:HG3	1:A:648:ASP:H	4	0.6
(1,589)	1:A:636:GLN:HG3	1:A:637:ARG:H	1	0.6
(1,52)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG11	9	0.6
(1,52)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG12	9	0.6
(1,52)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG13	9	0.6
(1,252)	1:A:597:THR:HG21	1:A:654:HIS:HB3	20	0.6
(1,252)	1:A:597:THR:HG22	1:A:654:HIS:HB3	20	0.6
(1,252)	1:A:597:THR:HG23	1:A:654:HIS:HB3	20	0.6
(1,125)	1:A:591:ALA:HA	1:A:606:ARG:HD3	11	0.6
(1,1168)	1:A:649:ARG:H	1:A:649:ARG:HG3	11	0.6

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD11	1:A:636:GLN:HB3	10	0.6
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD12	1:A:636:GLN:HB3	10	0.6
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD13	1:A:636:GLN:HB3	10	0.6
(1,1024)	1:A:606:ARG:HG3	1:A:607:ALA:H	15	0.6
(1,966)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:H	18	0.59
(1,879)	1:A:586:GLU:HB3	1:A:646:LEU:HD11	13	0.59
(1,879)	1:A:586:GLU:HB3	1:A:646:LEU:HD12	13	0.59
(1,879)	1:A:586:GLU:HB3	1:A:646:LEU:HD13	13	0.59
(1,759)	1:A:644:GLN:HG3	1:A:648:ASP:H	19	0.59
(1,589)	1:A:636:GLN:HG3	1:A:637:ARG:H	2	0.59
(1,170)	1:A:636:GLN:HA	1:A:636:GLN:HG3	17	0.59
(1,1195)	1:A:659:GLN:H	1:A:659:GLN:HB3	3	0.59
(1,1163)	1:A:648:ASP:H	1:A:649:ARG:HG3	16	0.59
(1,1129)	1:A:640:GLU:HB3	1:A:641:PRO:HD3	7	0.59
(1,1126)	1:A:638:ARG:HB3	1:A:638:ARG:HD3	1	0.59
(1,1124)	1:A:638:ARG:HA	1:A:638:ARG:HD3	13	0.59
(1,966)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:H	11	0.58
(1,953)	1:A:592:VAL:HG11	1:A:623:TRP:HB3	17	0.58
(1,953)	1:A:592:VAL:HG12	1:A:623:TRP:HB3	17	0.58
(1,953)	1:A:592:VAL:HG13	1:A:623:TRP:HB3	17	0.58
(1,953)	1:A:592:VAL:HG21	1:A:623:TRP:HB3	17	0.58
(1,953)	1:A:592:VAL:HG22	1:A:623:TRP:HB3	17	0.58
(1,953)	1:A:592:VAL:HG23	1:A:623:TRP:HB3	17	0.58
(1,94)	1:A:624:LYS:HA	1:A:624:LYS:HD3	2	0.58
(1,807)	1:A:633:ALA:H	1:A:634:PRO:HD3	6	0.58
(1,651)	1:A:593:GLU:H	1:A:594:HIS:HB3	4	0.58
(1,539)	1:A:622:LYS:H	1:A:624:LYS:HB3	19	0.58
(1,170)	1:A:636:GLN:HA	1:A:636:GLN:HG3	5	0.58
(1,1188)	1:A:655:ALA:HB1	1:A:658:SER:HB3	3	0.58
(1,1188)	1:A:655:ALA:HB2	1:A:658:SER:HB3	3	0.58
(1,1188)	1:A:655:ALA:HB3	1:A:658:SER:HB3	3	0.58
(1,1162)	1:A:648:ASP:H	1:A:648:ASP:HB3	12	0.58
(1,1118)	1:A:633:ALA:HB1	1:A:635:GLN:HG3	15	0.58
(1,1118)	1:A:633:ALA:HB2	1:A:635:GLN:HG3	15	0.58
(1,1118)	1:A:633:ALA:HB3	1:A:635:GLN:HG3	15	0.58
(1,1117)	1:A:633:ALA:HA	1:A:636:GLN:HB3	7	0.58
(1,965)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:652:ALA:H	4	0.57
(1,965)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:652:ALA:H	6	0.57
(1,877)	1:A:586:GLU:H	1:A:586:GLU:HB3	9	0.57
(1,807)	1:A:633:ALA:H	1:A:634:PRO:HD3	7	0.57
(1,807)	1:A:633:ALA:H	1:A:634:PRO:HD3	19	0.57
(1,131)	1:A:627:VAL:HB	1:A:654:HIS:HB3	18	0.57

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1125)	1:A:638:ARG:HB3	1:A:638:ARG:HG3	6	0.57
(1,1124)	1:A:638:ARG:HA	1:A:638:ARG:HD3	1	0.57
(1,1121)	1:A:636:GLN:H	1:A:636:GLN:HB3	17	0.57
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG21	1:A:636:GLN:HB3	1	0.57
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG22	1:A:636:GLN:HB3	1	0.57
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG23	1:A:636:GLN:HB3	1	0.57
(1,1050)	1:A:622:LYS:H	1:A:622:LYS:HB3	7	0.57
(1,1050)	1:A:622:LYS:H	1:A:622:LYS:HB3	9	0.57
(1,976)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:H	10	0.56
(1,975)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:596:GLY:H	17	0.56
(1,970)	1:A:595:LEU:H	1:A:595:LEU:HB3	2	0.56
(1,970)	1:A:595:LEU:H	1:A:595:LEU:HB3	10	0.56
(1,970)	1:A:595:LEU:H	1:A:595:LEU:HB3	11	0.56
(1,970)	1:A:595:LEU:H	1:A:595:LEU:HB3	18	0.56
(1,879)	1:A:586:GLU:HB3	1:A:646:LEU:HD11	11	0.56
(1,879)	1:A:586:GLU:HB3	1:A:646:LEU:HD12	11	0.56
(1,879)	1:A:586:GLU:HB3	1:A:646:LEU:HD13	11	0.56
(1,807)	1:A:633:ALA:H	1:A:634:PRO:HD3	4	0.56
(1,807)	1:A:633:ALA:H	1:A:634:PRO:HD3	11	0.56
(1,807)	1:A:633:ALA:H	1:A:634:PRO:HD3	13	0.56
(1,589)	1:A:636:GLN:HG3	1:A:637:ARG:H	8	0.56
(1,583)	1:A:636:GLN:H	1:A:636:GLN:HG3	12	0.56
(1,170)	1:A:636:GLN:HA	1:A:636:GLN:HG3	2	0.56
(1,170)	1:A:636:GLN:HA	1:A:636:GLN:HG3	3	0.56
(1,170)	1:A:636:GLN:HA	1:A:636:GLN:HG3	4	0.56
(1,170)	1:A:636:GLN:HA	1:A:636:GLN:HG3	10	0.56
(1,170)	1:A:636:GLN:HA	1:A:636:GLN:HG3	13	0.56
(1,1195)	1:A:659:GLN:H	1:A:659:GLN:HB3	10	0.56
(1,1125)	1:A:638:ARG:HB3	1:A:638:ARG:HG3	10	0.56
(1,1123)	1:A:638:ARG:H	1:A:638:ARG:HG3	10	0.56
(1,1121)	1:A:636:GLN:H	1:A:636:GLN:HB3	5	0.56
(1,1117)	1:A:633:ALA:HA	1:A:636:GLN:HB3	11	0.56
(1,1112)	1:A:632:ILE:HB	1:A:636:GLN:HB3	8	0.56
(1,1025)	1:A:606:ARG:HG3	1:A:607:ALA:HA	1	0.56
(1,999)	1:A:600:TRP:H	1:A:600:TRP:HB3	7	0.55
(1,999)	1:A:600:TRP:H	1:A:600:TRP:HB3	15	0.55
(1,970)	1:A:595:LEU:H	1:A:595:LEU:HB3	4	0.55
(1,970)	1:A:595:LEU:H	1:A:595:LEU:HB3	5	0.55
(1,970)	1:A:595:LEU:H	1:A:595:LEU:HB3	8	0.55
(1,970)	1:A:595:LEU:H	1:A:595:LEU:HB3	12	0.55
(1,970)	1:A:595:LEU:H	1:A:595:LEU:HB3	13	0.55
(1,970)	1:A:595:LEU:H	1:A:595:LEU:HB3	14	0.55

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,970)	1:A:595:LEU:H	1:A:595:LEU:HB3	17	0.55
(1,970)	1:A:595:LEU:H	1:A:595:LEU:HB3	19	0.55
(1,853)	1:A:583:ALA:H	1:A:584:GLU:HG3	16	0.55
(1,836)	1:A:581:SER:H	1:A:581:SER:HB3	9	0.55
(1,574)	1:A:599:ARG:H	1:A:599:ARG:HD3	18	0.55
(1,52)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG11	17	0.55
(1,52)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG12	17	0.55
(1,52)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG13	17	0.55
(1,428)	1:A:606:ARG:H	1:A:606:ARG:HD3	12	0.55
(1,170)	1:A:636:GLN:HA	1:A:636:GLN:HG3	1	0.55
(1,170)	1:A:636:GLN:HA	1:A:636:GLN:HG3	8	0.55
(1,170)	1:A:636:GLN:HA	1:A:636:GLN:HG3	11	0.55
(1,170)	1:A:636:GLN:HA	1:A:636:GLN:HG3	15	0.55
(1,170)	1:A:636:GLN:HA	1:A:636:GLN:HG3	20	0.55
(1,131)	1:A:627:VAL:HB	1:A:654:HIS:HB3	13	0.55
(1,1195)	1:A:659:GLN:H	1:A:659:GLN:HB3	12	0.55
(1,1168)	1:A:649:ARG:H	1:A:649:ARG:HG3	8	0.55
(1,1124)	1:A:638:ARG:HA	1:A:638:ARG:HD3	4	0.55
(1,1121)	1:A:636:GLN:H	1:A:636:GLN:HB3	10	0.55
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG21	1:A:636:GLN:HB3	2	0.55
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG22	1:A:636:GLN:HB3	2	0.55
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG23	1:A:636:GLN:HB3	2	0.55
(1,1050)	1:A:622:LYS:H	1:A:622:LYS:HB3	14	0.55
(1,1038)	1:A:617:VAL:HG21	1:A:621:ASP:HB3	18	0.55
(1,1038)	1:A:617:VAL:HG22	1:A:621:ASP:HB3	18	0.55
(1,1038)	1:A:617:VAL:HG23	1:A:621:ASP:HB3	18	0.55
(1,999)	1:A:600:TRP:H	1:A:600:TRP:HB3	1	0.54
(1,999)	1:A:600:TRP:H	1:A:600:TRP:HB3	2	0.54
(1,999)	1:A:600:TRP:H	1:A:600:TRP:HB3	3	0.54
(1,999)	1:A:600:TRP:H	1:A:600:TRP:HB3	4	0.54
(1,999)	1:A:600:TRP:H	1:A:600:TRP:HB3	6	0.54
(1,999)	1:A:600:TRP:H	1:A:600:TRP:HB3	9	0.54
(1,999)	1:A:600:TRP:H	1:A:600:TRP:HB3	10	0.54
(1,999)	1:A:600:TRP:H	1:A:600:TRP:HB3	11	0.54
(1,999)	1:A:600:TRP:H	1:A:600:TRP:HB3	12	0.54
(1,999)	1:A:600:TRP:H	1:A:600:TRP:HB3	13	0.54
(1,999)	1:A:600:TRP:H	1:A:600:TRP:HB3	14	0.54
(1,999)	1:A:600:TRP:H	1:A:600:TRP:HB3	16	0.54
(1,999)	1:A:600:TRP:H	1:A:600:TRP:HB3	17	0.54
(1,999)	1:A:600:TRP:H	1:A:600:TRP:HB3	20	0.54
(1,998)	1:A:599:ARG:HG3	1:A:600:TRP:H	8	0.54
(1,975)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:596:GLY:H	12	0.54

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,966)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:H	12	0.54
(1,881)	1:A:587:ALA:HA	1:A:590:GLU:HB3	5	0.54
(1,872)	1:A:585:VAL:HG11	1:A:643:PRO:HG3	2	0.54
(1,872)	1:A:585:VAL:HG12	1:A:643:PRO:HG3	2	0.54
(1,872)	1:A:585:VAL:HG13	1:A:643:PRO:HG3	2	0.54
(1,872)	1:A:585:VAL:HG21	1:A:643:PRO:HG3	2	0.54
(1,872)	1:A:585:VAL:HG22	1:A:643:PRO:HG3	2	0.54
(1,872)	1:A:585:VAL:HG23	1:A:643:PRO:HG3	2	0.54
(1,853)	1:A:583:ALA:H	1:A:584:GLU:HG3	4	0.54
(1,827)	1:A:649:ARG:H	1:A:649:ARG:HD3	13	0.54
(1,807)	1:A:633:ALA:H	1:A:634:PRO:HD3	2	0.54
(1,759)	1:A:644:GLN:HG3	1:A:648:ASP:H	11	0.54
(1,651)	1:A:593:GLU:H	1:A:594:HIS:HB3	14	0.54
(1,277)	1:A:588:LEU:HD21	1:A:623:TRP:HB3	1	0.54
(1,277)	1:A:588:LEU:HD22	1:A:623:TRP:HB3	1	0.54
(1,277)	1:A:588:LEU:HD23	1:A:623:TRP:HB3	1	0.54
(1,1195)	1:A:659:GLN:H	1:A:659:GLN:HB3	2	0.54
(1,1191)	1:A:658:SER:H	1:A:658:SER:HB3	16	0.54
(1,1121)	1:A:636:GLN:H	1:A:636:GLN:HB3	19	0.54
(1,1112)	1:A:632:ILE:HB	1:A:636:GLN:HB3	9	0.54
(1,999)	1:A:600:TRP:H	1:A:600:TRP:HB3	5	0.53
(1,999)	1:A:600:TRP:H	1:A:600:TRP:HB3	8	0.53
(1,999)	1:A:600:TRP:H	1:A:600:TRP:HB3	18	0.53
(1,999)	1:A:600:TRP:H	1:A:600:TRP:HB3	19	0.53
(1,998)	1:A:599:ARG:HG3	1:A:600:TRP:H	20	0.53
(1,975)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:596:GLY:H	19	0.53
(1,836)	1:A:581:SER:H	1:A:581:SER:HB3	5	0.53
(1,836)	1:A:581:SER:H	1:A:581:SER:HB3	20	0.53
(1,797)	1:A:659:GLN:HG3	1:A:660:GLN:H	4	0.53
(1,759)	1:A:644:GLN:HG3	1:A:648:ASP:H	10	0.53
(1,651)	1:A:593:GLU:H	1:A:594:HIS:HB3	17	0.53
(1,170)	1:A:636:GLN:HA	1:A:636:GLN:HG3	7	0.53
(1,170)	1:A:636:GLN:HA	1:A:636:GLN:HG3	18	0.53
(1,170)	1:A:636:GLN:HA	1:A:636:GLN:HG3	19	0.53
(1,130)	1:A:623:TRP:HD1	1:A:654:HIS:HB3	18	0.53
(1,1130)	1:A:640:GLU:HG3	1:A:641:PRO:HD3	6	0.53
(1,1130)	1:A:640:GLU:HG3	1:A:641:PRO:HD3	13	0.53
(1,1125)	1:A:638:ARG:HB3	1:A:638:ARG:HG3	14	0.53
(1,1121)	1:A:636:GLN:H	1:A:636:GLN:HB3	2	0.53
(1,1121)	1:A:636:GLN:H	1:A:636:GLN:HB3	3	0.53
(1,1121)	1:A:636:GLN:H	1:A:636:GLN:HB3	4	0.53
(1,1121)	1:A:636:GLN:H	1:A:636:GLN:HB3	6	0.53

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1121)	1:A:636:GLN:H	1:A:636:GLN:HB3	11	0.53
(1,1121)	1:A:636:GLN:H	1:A:636:GLN:HB3	13	0.53
(1,1121)	1:A:636:GLN:H	1:A:636:GLN:HB3	15	0.53
(1,1121)	1:A:636:GLN:H	1:A:636:GLN:HB3	20	0.53
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD11	1:A:636:GLN:HB3	20	0.53
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD12	1:A:636:GLN:HB3	20	0.53
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD13	1:A:636:GLN:HB3	20	0.53
(1,1050)	1:A:622:LYS:H	1:A:622:LYS:HB3	1	0.53
(1,998)	1:A:599:ARG:HG3	1:A:600:TRP:H	14	0.52
(1,998)	1:A:599:ARG:HG3	1:A:600:TRP:H	16	0.52
(1,976)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:H	19	0.52
(1,853)	1:A:583:ALA:H	1:A:584:GLU:HG3	8	0.52
(1,539)	1:A:622:LYS:H	1:A:624:LYS:HB3	9	0.52
(1,372)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:581:SER:H	19	0.52
(1,170)	1:A:636:GLN:HA	1:A:636:GLN:HG3	9	0.52
(1,170)	1:A:636:GLN:HA	1:A:636:GLN:HG3	14	0.52
(1,1168)	1:A:649:ARG:H	1:A:649:ARG:HG3	19	0.52
(1,1125)	1:A:638:ARG:HB3	1:A:638:ARG:HG3	9	0.52
(1,1121)	1:A:636:GLN:H	1:A:636:GLN:HB3	1	0.52
(1,1121)	1:A:636:GLN:H	1:A:636:GLN:HB3	7	0.52
(1,1121)	1:A:636:GLN:H	1:A:636:GLN:HB3	8	0.52
(1,1117)	1:A:633:ALA:HA	1:A:636:GLN:HB3	13	0.52
(1,1117)	1:A:633:ALA:HA	1:A:636:GLN:HB3	16	0.52
(1,1117)	1:A:633:ALA:HA	1:A:636:GLN:HB3	19	0.52
(1,1024)	1:A:606:ARG:HG3	1:A:607:ALA:H	19	0.52
(1,998)	1:A:599:ARG:HG3	1:A:600:TRP:H	2	0.51
(1,998)	1:A:599:ARG:HG3	1:A:600:TRP:H	15	0.51
(1,970)	1:A:595:LEU:H	1:A:595:LEU:HB3	20	0.51
(1,853)	1:A:583:ALA:H	1:A:584:GLU:HG3	13	0.51
(1,836)	1:A:581:SER:H	1:A:581:SER:HB3	19	0.51
(1,807)	1:A:633:ALA:H	1:A:634:PRO:HD3	10	0.51
(1,807)	1:A:633:ALA:H	1:A:634:PRO:HD3	16	0.51
(1,170)	1:A:636:GLN:HA	1:A:636:GLN:HG3	6	0.51
(1,1168)	1:A:649:ARG:H	1:A:649:ARG:HG3	15	0.51
(1,1130)	1:A:640:GLU:HG3	1:A:641:PRO:HD3	1	0.51
(1,1121)	1:A:636:GLN:H	1:A:636:GLN:HB3	9	0.51
(1,1121)	1:A:636:GLN:H	1:A:636:GLN:HB3	14	0.51
(1,1121)	1:A:636:GLN:H	1:A:636:GLN:HB3	16	0.51
(1,1117)	1:A:633:ALA:HA	1:A:636:GLN:HB3	4	0.51
(1,1117)	1:A:633:ALA:HA	1:A:636:GLN:HB3	6	0.51
(1,1001)	1:A:600:TRP:HA	1:A:616:TYR:HB3	1	0.51
(1,976)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:H	2	0.5

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,975)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:596:GLY:H	5	0.5
(1,975)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:596:GLY:H	13	0.5
(1,970)	1:A:595:LEU:H	1:A:595:LEU:HB3	7	0.5
(1,970)	1:A:595:LEU:H	1:A:595:LEU:HB3	9	0.5
(1,970)	1:A:595:LEU:H	1:A:595:LEU:HB3	15	0.5
(1,970)	1:A:595:LEU:H	1:A:595:LEU:HB3	16	0.5
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB1	15	0.5
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB2	15	0.5
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB3	15	0.5
(1,953)	1:A:592:VAL:HG11	1:A:623:TRP:HB3	2	0.5
(1,953)	1:A:592:VAL:HG12	1:A:623:TRP:HB3	2	0.5
(1,953)	1:A:592:VAL:HG13	1:A:623:TRP:HB3	2	0.5
(1,953)	1:A:592:VAL:HG21	1:A:623:TRP:HB3	2	0.5
(1,953)	1:A:592:VAL:HG22	1:A:623:TRP:HB3	2	0.5
(1,953)	1:A:592:VAL:HG23	1:A:623:TRP:HB3	2	0.5
(1,92)	1:A:597:THR:HG21	1:A:623:TRP:HB3	2	0.5
(1,92)	1:A:597:THR:HG22	1:A:623:TRP:HB3	2	0.5
(1,92)	1:A:597:THR:HG23	1:A:623:TRP:HB3	2	0.5
(1,807)	1:A:633:ALA:H	1:A:634:PRO:HD3	18	0.5
(1,807)	1:A:633:ALA:H	1:A:634:PRO:HD3	20	0.5
(1,651)	1:A:593:GLU:H	1:A:594:HIS:HB3	13	0.5
(1,539)	1:A:622:LYS:H	1:A:624:LYS:HB3	7	0.5
(1,454)	1:A:602:ASP:H	1:A:602:ASP:HB3	15	0.5
(1,372)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:581:SER:H	17	0.5
(1,170)	1:A:636:GLN:HA	1:A:636:GLN:HG3	16	0.5
(1,1191)	1:A:658:SER:H	1:A:658:SER:HB3	3	0.5
(1,1163)	1:A:648:ASP:H	1:A:649:ARG:HG3	2	0.5
(1,1163)	1:A:648:ASP:H	1:A:649:ARG:HG3	4	0.5
(1,1125)	1:A:638:ARG:HB3	1:A:638:ARG:HG3	17	0.5
(1,1121)	1:A:636:GLN:H	1:A:636:GLN:HB3	18	0.5
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG21	1:A:636:GLN:HB3	7	0.5
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG22	1:A:636:GLN:HB3	7	0.5
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG23	1:A:636:GLN:HB3	7	0.5
(1,1022)	1:A:606:ARG:H	1:A:606:ARG:HG3	1	0.5
(1,1010)	1:A:603:VAL:HA	1:A:606:ARG:HG3	1	0.5
(1,998)	1:A:599:ARG:HG3	1:A:600:TRP:H	13	0.49
(1,976)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:H	17	0.49
(1,970)	1:A:595:LEU:H	1:A:595:LEU:HB3	1	0.49
(1,970)	1:A:595:LEU:H	1:A:595:LEU:HB3	3	0.49
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB1	14	0.49
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB2	14	0.49
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB3	14	0.49

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,836)	1:A:581:SER:H	1:A:581:SER:HB3	17	0.49
(1,768)	1:A:644:GLN:HG3	1:A:647:LEU:H	5	0.49
(1,664)	1:A:594:HIS:HB3	1:A:595:LEU:H	16	0.49
(1,66)	1:A:602:ASP:HA	1:A:605:MET:HB3	10	0.49
(1,651)	1:A:593:GLU:H	1:A:594:HIS:HB3	2	0.49
(1,454)	1:A:602:ASP:H	1:A:602:ASP:HB3	3	0.49
(1,454)	1:A:602:ASP:H	1:A:602:ASP:HB3	19	0.49
(1,277)	1:A:588:LEU:HD21	1:A:623:TRP:HB3	9	0.49
(1,277)	1:A:588:LEU:HD22	1:A:623:TRP:HB3	9	0.49
(1,277)	1:A:588:LEU:HD23	1:A:623:TRP:HB3	9	0.49
(1,1191)	1:A:658:SER:H	1:A:658:SER:HB3	6	0.49
(1,1124)	1:A:638:ARG:HA	1:A:638:ARG:HD3	7	0.49
(1,970)	1:A:595:LEU:H	1:A:595:LEU:HB3	6	0.48
(1,92)	1:A:597:THR:HG21	1:A:623:TRP:HB3	9	0.48
(1,92)	1:A:597:THR:HG22	1:A:623:TRP:HB3	9	0.48
(1,92)	1:A:597:THR:HG23	1:A:623:TRP:HB3	9	0.48
(1,854)	1:A:583:ALA:HA	1:A:586:GLU:HB3	3	0.48
(1,853)	1:A:583:ALA:H	1:A:584:GLU:HG3	1	0.48
(1,797)	1:A:659:GLN:HG3	1:A:660:GLN:H	15	0.48
(1,664)	1:A:594:HIS:HB3	1:A:595:LEU:H	15	0.48
(1,651)	1:A:593:GLU:H	1:A:594:HIS:HB3	10	0.48
(1,454)	1:A:602:ASP:H	1:A:602:ASP:HB3	1	0.48
(1,454)	1:A:602:ASP:H	1:A:602:ASP:HB3	2	0.48
(1,454)	1:A:602:ASP:H	1:A:602:ASP:HB3	5	0.48
(1,454)	1:A:602:ASP:H	1:A:602:ASP:HB3	8	0.48
(1,454)	1:A:602:ASP:H	1:A:602:ASP:HB3	9	0.48
(1,454)	1:A:602:ASP:H	1:A:602:ASP:HB3	11	0.48
(1,454)	1:A:602:ASP:H	1:A:602:ASP:HB3	12	0.48
(1,454)	1:A:602:ASP:H	1:A:602:ASP:HB3	14	0.48
(1,454)	1:A:602:ASP:H	1:A:602:ASP:HB3	17	0.48
(1,428)	1:A:606:ARG:H	1:A:606:ARG:HD3	3	0.48
(1,372)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:581:SER:H	2	0.48
(1,372)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:581:SER:H	11	0.48
(1,372)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:581:SER:H	16	0.48
(1,1168)	1:A:649:ARG:H	1:A:649:ARG:HG3	17	0.48
(1,1163)	1:A:648:ASP:H	1:A:649:ARG:HG3	3	0.48
(1,1163)	1:A:648:ASP:H	1:A:649:ARG:HG3	15	0.48
(1,1162)	1:A:648:ASP:H	1:A:648:ASP:HB3	1	0.48
(1,1121)	1:A:636:GLN:H	1:A:636:GLN:HB3	12	0.48
(1,1024)	1:A:606:ARG:HG3	1:A:607:ALA:H	3	0.48
(1,1022)	1:A:606:ARG:H	1:A:606:ARG:HG3	15	0.48
(1,1007)	1:A:601:ARG:HA	1:A:604:LYS:HB3	8	0.48

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,976)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:H	12	0.47
(1,966)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:H	5	0.47
(1,965)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:652:ALA:H	2	0.47
(1,836)	1:A:581:SER:H	1:A:581:SER:HB3	11	0.47
(1,807)	1:A:633:ALA:H	1:A:634:PRO:HD3	3	0.47
(1,794)	1:A:659:GLN:H	1:A:659:GLN:HG3	16	0.47
(1,788)	1:A:644:GLN:H	1:A:644:GLN:HG3	2	0.47
(1,66)	1:A:602:ASP:HA	1:A:605:MET:HB3	9	0.47
(1,454)	1:A:602:ASP:H	1:A:602:ASP:HB3	4	0.47
(1,454)	1:A:602:ASP:H	1:A:602:ASP:HB3	6	0.47
(1,454)	1:A:602:ASP:H	1:A:602:ASP:HB3	7	0.47
(1,454)	1:A:602:ASP:H	1:A:602:ASP:HB3	13	0.47
(1,454)	1:A:602:ASP:H	1:A:602:ASP:HB3	16	0.47
(1,454)	1:A:602:ASP:H	1:A:602:ASP:HB3	18	0.47
(1,454)	1:A:602:ASP:H	1:A:602:ASP:HB3	20	0.47
(1,277)	1:A:588:LEU:HD21	1:A:623:TRP:HB3	12	0.47
(1,277)	1:A:588:LEU:HD22	1:A:623:TRP:HB3	12	0.47
(1,277)	1:A:588:LEU:HD23	1:A:623:TRP:HB3	12	0.47
(1,1147)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:HD11	10	0.47
(1,1147)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:HD12	10	0.47
(1,1147)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:HD13	10	0.47
(1,1022)	1:A:606:ARG:H	1:A:606:ARG:HG3	3	0.47
(1,1022)	1:A:606:ARG:H	1:A:606:ARG:HG3	12	0.47
(1,966)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:H	8	0.46
(1,881)	1:A:587:ALA:HA	1:A:590:GLU:HB3	8	0.46
(1,872)	1:A:585:VAL:HG11	1:A:643:PRO:HG3	13	0.46
(1,872)	1:A:585:VAL:HG12	1:A:643:PRO:HG3	13	0.46
(1,872)	1:A:585:VAL:HG13	1:A:643:PRO:HG3	13	0.46
(1,872)	1:A:585:VAL:HG21	1:A:643:PRO:HG3	13	0.46
(1,872)	1:A:585:VAL:HG22	1:A:643:PRO:HG3	13	0.46
(1,872)	1:A:585:VAL:HG23	1:A:643:PRO:HG3	13	0.46
(1,853)	1:A:583:ALA:H	1:A:584:GLU:HG3	15	0.46
(1,836)	1:A:581:SER:H	1:A:581:SER:HB3	16	0.46
(1,827)	1:A:649:ARG:H	1:A:649:ARG:HD3	7	0.46
(1,539)	1:A:622:LYS:H	1:A:624:LYS:HB3	3	0.46
(1,524)	1:A:624:LYS:H	1:A:624:LYS:HG3	15	0.46
(1,358)	1:A:586:GLU:HG3	1:A:646:LEU:HD21	15	0.46
(1,358)	1:A:586:GLU:HG3	1:A:646:LEU:HD22	15	0.46
(1,358)	1:A:586:GLU:HG3	1:A:646:LEU:HD23	15	0.46
(1,1163)	1:A:648:ASP:H	1:A:649:ARG:HG3	8	0.46
(1,1147)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:HD11	13	0.46
(1,1147)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:HD12	13	0.46

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1147)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:HD13	13	0.46
(1,1126)	1:A:638:ARG:HB3	1:A:638:ARG:HD3	13	0.46
(1,1022)	1:A:606:ARG:H	1:A:606:ARG:HG3	19	0.46
(1,1007)	1:A:601:ARG:HA	1:A:604:LYS:HB3	11	0.46
(1,1006)	1:A:601:ARG:HA	1:A:601:ARG:HG3	1	0.46
(1,998)	1:A:599:ARG:HG3	1:A:600:TRP:H	4	0.45
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB1	17	0.45
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB2	17	0.45
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB3	17	0.45
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB1	5	0.45
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB2	5	0.45
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB3	5	0.45
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB1	8	0.45
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB2	8	0.45
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB3	8	0.45
(1,836)	1:A:581:SER:H	1:A:581:SER:HB3	12	0.45
(1,835)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HG11	13	0.45
(1,835)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HG12	13	0.45
(1,835)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HG13	13	0.45
(1,835)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HG21	13	0.45
(1,835)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HG22	13	0.45
(1,835)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HG23	13	0.45
(1,827)	1:A:649:ARG:H	1:A:649:ARG:HD3	12	0.45
(1,807)	1:A:633:ALA:H	1:A:634:PRO:HD3	1	0.45
(1,807)	1:A:633:ALA:H	1:A:634:PRO:HD3	8	0.45
(1,797)	1:A:659:GLN:HG3	1:A:660:GLN:H	8	0.45
(1,574)	1:A:599:ARG:H	1:A:599:ARG:HD3	15	0.45
(1,515)	1:A:624:LYS:HD3	1:A:625:THR:H	6	0.45
(1,515)	1:A:624:LYS:HD3	1:A:625:THR:H	12	0.45
(1,44)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HA	16	0.45
(1,372)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:581:SER:H	5	0.45
(1,131)	1:A:627:VAL:HB	1:A:654:HIS:HB3	4	0.45
(1,1191)	1:A:658:SER:H	1:A:658:SER:HB3	14	0.45
(1,1168)	1:A:649:ARG:H	1:A:649:ARG:HG3	12	0.45
(1,1147)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:HD11	2	0.45
(1,1147)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:HD12	2	0.45
(1,1147)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:HD13	2	0.45
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG21	1:A:636:GLN:HB3	11	0.45
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG22	1:A:636:GLN:HB3	11	0.45
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG23	1:A:636:GLN:HB3	11	0.45
(1,1050)	1:A:622:LYS:H	1:A:622:LYS:HB3	13	0.45
(1,854)	1:A:583:ALA:HA	1:A:586:GLU:HB3	11	0.44

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,836)	1:A:581:SER:H	1:A:581:SER:HB3	13	0.44
(1,67)	1:A:651:LEU:HA	1:A:654:HIS:HB3	17	0.44
(1,539)	1:A:622:LYS:H	1:A:624:LYS:HB3	5	0.44
(1,515)	1:A:624:LYS:HD3	1:A:625:THR:H	9	0.44
(1,44)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HA	20	0.44
(1,1163)	1:A:648:ASP:H	1:A:649:ARG:HG3	12	0.44
(1,1038)	1:A:617:VAL:HG21	1:A:621:ASP:HB3	17	0.44
(1,1038)	1:A:617:VAL:HG22	1:A:621:ASP:HB3	17	0.44
(1,1038)	1:A:617:VAL:HG23	1:A:621:ASP:HB3	17	0.44
(1,1025)	1:A:606:ARG:HG3	1:A:607:ALA:HA	15	0.44
(1,1022)	1:A:606:ARG:H	1:A:606:ARG:HG3	6	0.44
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB1	12	0.43
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB2	12	0.43
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB3	12	0.43
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB1	2	0.43
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB2	2	0.43
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB3	2	0.43
(1,853)	1:A:583:ALA:H	1:A:584:GLU:HG3	17	0.43
(1,836)	1:A:581:SER:H	1:A:581:SER:HB3	2	0.43
(1,827)	1:A:649:ARG:H	1:A:649:ARG:HD3	2	0.43
(1,797)	1:A:659:GLN:HG3	1:A:660:GLN:H	13	0.43
(1,768)	1:A:644:GLN:HG3	1:A:647:LEU:H	20	0.43
(1,52)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG11	5	0.43
(1,52)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG12	5	0.43
(1,52)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG13	5	0.43
(1,427)	1:A:605:MET:HB3	1:A:606:ARG:H	20	0.43
(1,372)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:581:SER:H	4	0.43
(1,372)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:581:SER:H	9	0.43
(1,372)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:581:SER:H	20	0.43
(1,370)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:581:SER:H	13	0.43
(1,228)	1:A:627:VAL:HG11	1:A:654:HIS:HB3	8	0.43
(1,228)	1:A:627:VAL:HG12	1:A:654:HIS:HB3	8	0.43
(1,228)	1:A:627:VAL:HG13	1:A:654:HIS:HB3	8	0.43
(1,1146)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:H	7	0.43
(1,1126)	1:A:638:ARG:HB3	1:A:638:ARG:HD3	18	0.43
(1,1022)	1:A:606:ARG:H	1:A:606:ARG:HG3	2	0.43
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB1	14	0.42
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB2	14	0.42
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB3	14	0.42
(1,854)	1:A:583:ALA:HA	1:A:586:GLU:HB3	5	0.42
(1,807)	1:A:633:ALA:H	1:A:634:PRO:HD3	9	0.42
(1,797)	1:A:659:GLN:HG3	1:A:660:GLN:H	14	0.42

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,794)	1:A:659:GLN:H	1:A:659:GLN:HG3	6	0.42
(1,277)	1:A:588:LEU:HD21	1:A:623:TRP:HB3	10	0.42
(1,277)	1:A:588:LEU:HD22	1:A:623:TRP:HB3	10	0.42
(1,277)	1:A:588:LEU:HD23	1:A:623:TRP:HB3	10	0.42
(1,131)	1:A:627:VAL:HB	1:A:654:HIS:HB3	2	0.42
(1,1146)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:H	13	0.42
(1,1006)	1:A:601:ARG:HA	1:A:601:ARG:HG3	9	0.42
(1,1006)	1:A:601:ARG:HA	1:A:601:ARG:HG3	16	0.42
(1,1001)	1:A:600:TRP:HA	1:A:616:TYR:HB3	15	0.42
(1,998)	1:A:599:ARG:HG3	1:A:600:TRP:H	6	0.41
(1,966)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:H	2	0.41
(1,879)	1:A:586:GLU:HB3	1:A:646:LEU:HD11	14	0.41
(1,879)	1:A:586:GLU:HB3	1:A:646:LEU:HD12	14	0.41
(1,879)	1:A:586:GLU:HB3	1:A:646:LEU:HD13	14	0.41
(1,836)	1:A:581:SER:H	1:A:581:SER:HB3	3	0.41
(1,836)	1:A:581:SER:H	1:A:581:SER:HB3	6	0.41
(1,836)	1:A:581:SER:H	1:A:581:SER:HB3	7	0.41
(1,794)	1:A:659:GLN:H	1:A:659:GLN:HG3	1	0.41
(1,794)	1:A:659:GLN:H	1:A:659:GLN:HG3	17	0.41
(1,524)	1:A:624:LYS:H	1:A:624:LYS:HG3	17	0.41
(1,454)	1:A:602:ASP:H	1:A:602:ASP:HB3	10	0.41
(1,44)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HA	11	0.41
(1,358)	1:A:586:GLU:HG3	1:A:646:LEU:HD21	6	0.41
(1,358)	1:A:586:GLU:HG3	1:A:646:LEU:HD22	6	0.41
(1,358)	1:A:586:GLU:HG3	1:A:646:LEU:HD23	6	0.41
(1,277)	1:A:588:LEU:HD21	1:A:623:TRP:HB3	16	0.41
(1,277)	1:A:588:LEU:HD22	1:A:623:TRP:HB3	16	0.41
(1,277)	1:A:588:LEU:HD23	1:A:623:TRP:HB3	16	0.41
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD11	1:A:636:GLN:HB3	13	0.41
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD12	1:A:636:GLN:HB3	13	0.41
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD13	1:A:636:GLN:HB3	13	0.41
(1,1006)	1:A:601:ARG:HA	1:A:601:ARG:HG3	11	0.41
(1,994)	1:A:599:ARG:H	1:A:599:ARG:HG3	10	0.4
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB1	18	0.4
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB2	18	0.4
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB3	18	0.4
(1,879)	1:A:586:GLU:HB3	1:A:646:LEU:HD11	9	0.4
(1,879)	1:A:586:GLU:HB3	1:A:646:LEU:HD12	9	0.4
(1,879)	1:A:586:GLU:HB3	1:A:646:LEU:HD13	9	0.4
(1,836)	1:A:581:SER:H	1:A:581:SER:HB3	10	0.4
(1,836)	1:A:581:SER:H	1:A:581:SER:HB3	15	0.4
(1,835)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HG11	10	0.4

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,835)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HG12	10	0.4
(1,835)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HG13	10	0.4
(1,835)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HG21	10	0.4
(1,835)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HG22	10	0.4
(1,835)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HG23	10	0.4
(1,794)	1:A:659:GLN:H	1:A:659:GLN:HG3	5	0.4
(1,794)	1:A:659:GLN:H	1:A:659:GLN:HG3	20	0.4
(1,788)	1:A:644:GLN:H	1:A:644:GLN:HG3	8	0.4
(1,589)	1:A:636:GLN:HG3	1:A:637:ARG:H	9	0.4
(1,427)	1:A:605:MET:HB3	1:A:606:ARG:H	18	0.4
(1,370)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:581:SER:H	1	0.4
(1,358)	1:A:586:GLU:HG3	1:A:646:LEU:HD21	8	0.4
(1,358)	1:A:586:GLU:HG3	1:A:646:LEU:HD22	8	0.4
(1,358)	1:A:586:GLU:HG3	1:A:646:LEU:HD23	8	0.4
(1,318)	1:A:632:ILE:H	1:A:632:ILE:HG13	17	0.4
(1,277)	1:A:588:LEU:HD21	1:A:623:TRP:HB3	15	0.4
(1,277)	1:A:588:LEU:HD22	1:A:623:TRP:HB3	15	0.4
(1,277)	1:A:588:LEU:HD23	1:A:623:TRP:HB3	15	0.4
(1,1196)	1:A:660:GLN:H	1:A:660:GLN:HB3	14	0.4
(1,1196)	1:A:660:GLN:H	1:A:660:GLN:HB3	18	0.4
(1,1163)	1:A:648:ASP:H	1:A:649:ARG:HG3	1	0.4
(1,1146)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:H	2	0.4
(1,1130)	1:A:640:GLU:HG3	1:A:641:PRO:HD3	3	0.4
(1,1125)	1:A:638:ARG:HB3	1:A:638:ARG:HG3	19	0.4
(1,1124)	1:A:638:ARG:HA	1:A:638:ARG:HD3	18	0.4
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD11	1:A:636:GLN:HB3	14	0.4
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD12	1:A:636:GLN:HB3	14	0.4
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD13	1:A:636:GLN:HB3	14	0.4
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD11	1:A:636:GLN:HB3	15	0.4
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD12	1:A:636:GLN:HB3	15	0.4
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD13	1:A:636:GLN:HB3	15	0.4
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD11	1:A:636:GLN:HB3	19	0.4
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD12	1:A:636:GLN:HB3	19	0.4
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD13	1:A:636:GLN:HB3	19	0.4
(1,1099)	1:A:628:HIS:HB3	1:A:630:ALA:H	16	0.4
(1,1026)	1:A:608:PHE:H	1:A:608:PHE:HB3	13	0.4
(1,1020)	1:A:604:LYS:HB3	1:A:619:LEU:HD11	8	0.4
(1,1020)	1:A:604:LYS:HB3	1:A:619:LEU:HD12	8	0.4
(1,1020)	1:A:604:LYS:HB3	1:A:619:LEU:HD13	8	0.4
(1,1020)	1:A:604:LYS:HB3	1:A:619:LEU:HD21	8	0.4
(1,1020)	1:A:604:LYS:HB3	1:A:619:LEU:HD22	8	0.4
(1,1020)	1:A:604:LYS:HB3	1:A:619:LEU:HD23	8	0.4

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,976)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:H	4	0.39
(1,973)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:595:LEU:HG	12	0.39
(1,973)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:595:LEU:HG	17	0.39
(1,94)	1:A:624:LYS:HA	1:A:624:LYS:HD3	1	0.39
(1,94)	1:A:624:LYS:HA	1:A:624:LYS:HD3	4	0.39
(1,94)	1:A:624:LYS:HA	1:A:624:LYS:HD3	16	0.39
(1,932)	1:A:590:GLU:HG3	1:A:591:ALA:H	10	0.39
(1,92)	1:A:597:THR:HG21	1:A:623:TRP:HB3	7	0.39
(1,92)	1:A:597:THR:HG22	1:A:623:TRP:HB3	7	0.39
(1,92)	1:A:597:THR:HG23	1:A:623:TRP:HB3	7	0.39
(1,836)	1:A:581:SER:H	1:A:581:SER:HB3	18	0.39
(1,664)	1:A:594:HIS:HB3	1:A:595:LEU:H	19	0.39
(1,583)	1:A:636:GLN:H	1:A:636:GLN:HG3	16	0.39
(1,277)	1:A:588:LEU:HD21	1:A:623:TRP:HB3	19	0.39
(1,277)	1:A:588:LEU:HD22	1:A:623:TRP:HB3	19	0.39
(1,277)	1:A:588:LEU:HD23	1:A:623:TRP:HB3	19	0.39
(1,1147)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:HD11	7	0.39
(1,1147)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:HD12	7	0.39
(1,1147)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:HD13	7	0.39
(1,1125)	1:A:638:ARG:HB3	1:A:638:ARG:HG3	5	0.39
(1,1125)	1:A:638:ARG:HB3	1:A:638:ARG:HG3	7	0.39
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD11	1:A:636:GLN:HB3	2	0.39
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD12	1:A:636:GLN:HB3	2	0.39
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD13	1:A:636:GLN:HB3	2	0.39
(1,1026)	1:A:608:PHE:H	1:A:608:PHE:HB3	1	0.39
(1,973)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:595:LEU:HG	2	0.38
(1,973)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:595:LEU:HG	5	0.38
(1,973)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:595:LEU:HG	10	0.38
(1,973)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:595:LEU:HG	13	0.38
(1,973)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:595:LEU:HG	14	0.38
(1,973)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:595:LEU:HG	18	0.38
(1,97)	1:A:621:ASP:HA	1:A:624:LYS:HB3	13	0.38
(1,966)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:H	20	0.38
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB1	6	0.38
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB2	6	0.38
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB3	6	0.38
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB1	11	0.38
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB2	11	0.38
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB3	11	0.38
(1,92)	1:A:597:THR:HG21	1:A:623:TRP:HB3	11	0.38
(1,92)	1:A:597:THR:HG22	1:A:623:TRP:HB3	11	0.38
(1,92)	1:A:597:THR:HG23	1:A:623:TRP:HB3	11	0.38

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,853)	1:A:583:ALA:H	1:A:584:GLU:HG3	6	0.38
(1,853)	1:A:583:ALA:H	1:A:584:GLU:HG3	12	0.38
(1,836)	1:A:581:SER:H	1:A:581:SER:HB3	1	0.38
(1,836)	1:A:581:SER:H	1:A:581:SER:HB3	8	0.38
(1,836)	1:A:581:SER:H	1:A:581:SER:HB3	14	0.38
(1,66)	1:A:602:ASP:HA	1:A:605:MET:HB3	16	0.38
(1,524)	1:A:624:LYS:H	1:A:624:LYS:HG3	8	0.38
(1,427)	1:A:605:MET:HB3	1:A:606:ARG:H	4	0.38
(1,228)	1:A:627:VAL:HG11	1:A:654:HIS:HB3	14	0.38
(1,228)	1:A:627:VAL:HG12	1:A:654:HIS:HB3	14	0.38
(1,228)	1:A:627:VAL:HG13	1:A:654:HIS:HB3	14	0.38
(1,228)	1:A:627:VAL:HG11	1:A:654:HIS:HB3	20	0.38
(1,228)	1:A:627:VAL:HG12	1:A:654:HIS:HB3	20	0.38
(1,228)	1:A:627:VAL:HG13	1:A:654:HIS:HB3	20	0.38
(1,1168)	1:A:649:ARG:H	1:A:649:ARG:HG3	16	0.38
(1,1146)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:H	9	0.38
(1,1124)	1:A:638:ARG:HA	1:A:638:ARG:HD3	2	0.38
(1,1119)	1:A:634:PRO:HB3	1:A:635:GLN:H	9	0.38
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD11	1:A:636:GLN:HB3	11	0.38
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD12	1:A:636:GLN:HB3	11	0.38
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD13	1:A:636:GLN:HB3	11	0.38
(1,1026)	1:A:608:PHE:H	1:A:608:PHE:HB3	3	0.38
(1,1026)	1:A:608:PHE:H	1:A:608:PHE:HB3	4	0.38
(1,1026)	1:A:608:PHE:H	1:A:608:PHE:HB3	5	0.38
(1,1026)	1:A:608:PHE:H	1:A:608:PHE:HB3	7	0.38
(1,1026)	1:A:608:PHE:H	1:A:608:PHE:HB3	8	0.38
(1,1026)	1:A:608:PHE:H	1:A:608:PHE:HB3	9	0.38
(1,1026)	1:A:608:PHE:H	1:A:608:PHE:HB3	10	0.38
(1,1026)	1:A:608:PHE:H	1:A:608:PHE:HB3	11	0.38
(1,1026)	1:A:608:PHE:H	1:A:608:PHE:HB3	12	0.38
(1,1026)	1:A:608:PHE:H	1:A:608:PHE:HB3	16	0.38
(1,1026)	1:A:608:PHE:H	1:A:608:PHE:HB3	17	0.38
(1,1026)	1:A:608:PHE:H	1:A:608:PHE:HB3	18	0.38
(1,1024)	1:A:606:ARG:HG3	1:A:607:ALA:H	2	0.38
(1,1024)	1:A:606:ARG:HG3	1:A:607:ALA:H	6	0.38
(1,1006)	1:A:601:ARG:HA	1:A:601:ARG:HG3	14	0.38
(1,973)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:595:LEU:HG	4	0.37
(1,973)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:595:LEU:HG	8	0.37
(1,973)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:595:LEU:HG	11	0.37
(1,973)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:595:LEU:HG	19	0.37
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB1	19	0.37
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB2	19	0.37

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB3	19	0.37
(1,953)	1:A:592:VAL:HG11	1:A:623:TRP:HB3	10	0.37
(1,953)	1:A:592:VAL:HG12	1:A:623:TRP:HB3	10	0.37
(1,953)	1:A:592:VAL:HG13	1:A:623:TRP:HB3	10	0.37
(1,953)	1:A:592:VAL:HG21	1:A:623:TRP:HB3	10	0.37
(1,953)	1:A:592:VAL:HG22	1:A:623:TRP:HB3	10	0.37
(1,953)	1:A:592:VAL:HG23	1:A:623:TRP:HB3	10	0.37
(1,881)	1:A:587:ALA:HA	1:A:590:GLU:HB3	15	0.37
(1,872)	1:A:585:VAL:HG11	1:A:643:PRO:HG3	9	0.37
(1,872)	1:A:585:VAL:HG12	1:A:643:PRO:HG3	9	0.37
(1,872)	1:A:585:VAL:HG13	1:A:643:PRO:HG3	9	0.37
(1,872)	1:A:585:VAL:HG21	1:A:643:PRO:HG3	9	0.37
(1,872)	1:A:585:VAL:HG22	1:A:643:PRO:HG3	9	0.37
(1,872)	1:A:585:VAL:HG23	1:A:643:PRO:HG3	9	0.37
(1,843)	1:A:581:SER:HB3	1:A:583:ALA:HB1	9	0.37
(1,843)	1:A:581:SER:HB3	1:A:583:ALA:HB2	9	0.37
(1,843)	1:A:581:SER:HB3	1:A:583:ALA:HB3	9	0.37
(1,81)	1:A:611:ALA:HA	1:A:612:ASP:HB3	3	0.37
(1,768)	1:A:644:GLN:HG3	1:A:647:LEU:H	14	0.37
(1,651)	1:A:593:GLU:H	1:A:594:HIS:HB3	3	0.37
(1,574)	1:A:599:ARG:H	1:A:599:ARG:HD3	4	0.37
(1,15)	1:A:591:ALA:HB1	1:A:606:ARG:HD3	4	0.37
(1,15)	1:A:591:ALA:HB2	1:A:606:ARG:HD3	4	0.37
(1,15)	1:A:591:ALA:HB3	1:A:606:ARG:HD3	4	0.37
(1,1188)	1:A:655:ALA:HB1	1:A:658:SER:HB3	14	0.37
(1,1188)	1:A:655:ALA:HB2	1:A:658:SER:HB3	14	0.37
(1,1188)	1:A:655:ALA:HB3	1:A:658:SER:HB3	14	0.37
(1,1185)	1:A:651:LEU:HD11	1:A:654:HIS:HB3	19	0.37
(1,1185)	1:A:651:LEU:HD12	1:A:654:HIS:HB3	19	0.37
(1,1185)	1:A:651:LEU:HD13	1:A:654:HIS:HB3	19	0.37
(1,1185)	1:A:651:LEU:HD21	1:A:654:HIS:HB3	19	0.37
(1,1185)	1:A:651:LEU:HD22	1:A:654:HIS:HB3	19	0.37
(1,1185)	1:A:651:LEU:HD23	1:A:654:HIS:HB3	19	0.37
(1,1168)	1:A:649:ARG:H	1:A:649:ARG:HG3	1	0.37
(1,1146)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:H	19	0.37
(1,1125)	1:A:638:ARG:HB3	1:A:638:ARG:HG3	18	0.37
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG21	1:A:636:GLN:HB3	6	0.37
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG22	1:A:636:GLN:HB3	6	0.37
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG23	1:A:636:GLN:HB3	6	0.37
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG21	1:A:636:GLN:HB3	19	0.37
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG22	1:A:636:GLN:HB3	19	0.37
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG23	1:A:636:GLN:HB3	19	0.37

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1026)	1:A:608:PHE:H	1:A:608:PHE:HB3	2	0.37
(1,1026)	1:A:608:PHE:H	1:A:608:PHE:HB3	15	0.37
(1,1026)	1:A:608:PHE:H	1:A:608:PHE:HB3	19	0.37
(1,953)	1:A:592:VAL:HG11	1:A:623:TRP:HB3	16	0.36
(1,953)	1:A:592:VAL:HG12	1:A:623:TRP:HB3	16	0.36
(1,953)	1:A:592:VAL:HG13	1:A:623:TRP:HB3	16	0.36
(1,953)	1:A:592:VAL:HG21	1:A:623:TRP:HB3	16	0.36
(1,953)	1:A:592:VAL:HG22	1:A:623:TRP:HB3	16	0.36
(1,953)	1:A:592:VAL:HG23	1:A:623:TRP:HB3	16	0.36
(1,910)	1:A:589:VAL:HA	1:A:593:GLU:HG3	17	0.36
(1,835)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HG11	3	0.36
(1,835)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HG12	3	0.36
(1,835)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HG13	3	0.36
(1,835)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HG21	3	0.36
(1,835)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HG22	3	0.36
(1,835)	1:A:580:PHE:HD1	1:A:585:VAL:HG23	3	0.36
(1,827)	1:A:649:ARG:H	1:A:649:ARG:HD3	3	0.36
(1,827)	1:A:649:ARG:H	1:A:649:ARG:HD3	16	0.36
(1,67)	1:A:651:LEU:HA	1:A:654:HIS:HB3	16	0.36
(1,651)	1:A:593:GLU:H	1:A:594:HIS:HB3	7	0.36
(1,574)	1:A:599:ARG:H	1:A:599:ARG:HD3	11	0.36
(1,318)	1:A:632:ILE:H	1:A:632:ILE:HG13	5	0.36
(1,318)	1:A:632:ILE:H	1:A:632:ILE:HG13	14	0.36
(1,252)	1:A:597:THR:HG21	1:A:654:HIS:HB3	4	0.36
(1,252)	1:A:597:THR:HG22	1:A:654:HIS:HB3	4	0.36
(1,252)	1:A:597:THR:HG23	1:A:654:HIS:HB3	4	0.36
(1,1185)	1:A:651:LEU:HD11	1:A:654:HIS:HB3	16	0.36
(1,1185)	1:A:651:LEU:HD12	1:A:654:HIS:HB3	16	0.36
(1,1185)	1:A:651:LEU:HD13	1:A:654:HIS:HB3	16	0.36
(1,1185)	1:A:651:LEU:HD21	1:A:654:HIS:HB3	16	0.36
(1,1185)	1:A:651:LEU:HD22	1:A:654:HIS:HB3	16	0.36
(1,1185)	1:A:651:LEU:HD23	1:A:654:HIS:HB3	16	0.36
(1,1126)	1:A:638:ARG:HB3	1:A:638:ARG:HD3	14	0.36
(1,1047)	1:A:621:ASP:H	1:A:621:ASP:HB3	1	0.36
(1,1047)	1:A:621:ASP:H	1:A:621:ASP:HB3	6	0.36
(1,1026)	1:A:608:PHE:H	1:A:608:PHE:HB3	14	0.36
(1,1006)	1:A:601:ARG:HA	1:A:601:ARG:HG3	20	0.36
(2,9)	1:A:589:VAL:O	1:A:592:VAL:H	6	0.35
(1,998)	1:A:599:ARG:HG3	1:A:600:TRP:H	7	0.35
(1,976)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:H	18	0.35
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB1	16	0.35
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB2	16	0.35

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB3	16	0.35
(1,94)	1:A:624:LYS:HA	1:A:624:LYS:HD3	11	0.35
(1,932)	1:A:590:GLU:HG3	1:A:591:ALA:H	6	0.35
(1,930)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:593:GLU:H	4	0.35
(1,881)	1:A:587:ALA:HA	1:A:590:GLU:HB3	6	0.35
(1,788)	1:A:644:GLN:H	1:A:644:GLN:HG3	16	0.35
(1,614)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:586:GLU:H	15	0.35
(1,583)	1:A:636:GLN:H	1:A:636:GLN:HG3	6	0.35
(1,427)	1:A:605:MET:HB3	1:A:606:ARG:H	3	0.35
(1,427)	1:A:605:MET:HB3	1:A:606:ARG:H	7	0.35
(1,427)	1:A:605:MET:HB3	1:A:606:ARG:H	14	0.35
(1,393)	1:A:591:ALA:H	1:A:606:ARG:HD3	14	0.35
(1,393)	1:A:591:ALA:H	1:A:606:ARG:HD3	20	0.35
(1,357)	1:A:640:GLU:HA	1:A:640:GLU:HG3	12	0.35
(1,1146)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:H	10	0.35
(1,1119)	1:A:634:PRO:HB3	1:A:635:GLN:H	14	0.35
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG21	1:A:636:GLN:HB3	4	0.35
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG22	1:A:636:GLN:HB3	4	0.35
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG23	1:A:636:GLN:HB3	4	0.35
(1,1038)	1:A:617:VAL:HG21	1:A:621:ASP:HB3	5	0.35
(1,1038)	1:A:617:VAL:HG22	1:A:621:ASP:HB3	5	0.35
(1,1038)	1:A:617:VAL:HG23	1:A:621:ASP:HB3	5	0.35
(1,1033)	1:A:610:ASN:H	1:A:610:ASN:HB3	12	0.35
(1,1026)	1:A:608:PHE:H	1:A:608:PHE:HB3	6	0.35
(1,1026)	1:A:608:PHE:H	1:A:608:PHE:HB3	20	0.35
(1,1001)	1:A:600:TRP:HA	1:A:616:TYR:HB3	20	0.35
(1,98)	1:A:624:LYS:HB3	1:A:624:LYS:HD3	5	0.34
(1,978)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:HG21	2	0.34
(1,978)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:HG22	2	0.34
(1,978)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:HG23	2	0.34
(1,94)	1:A:624:LYS:HA	1:A:624:LYS:HD3	20	0.34
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB1	18	0.34
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB2	18	0.34
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB3	18	0.34
(1,860)	1:A:585:VAL:HA	1:A:586:GLU:HB3	4	0.34
(1,797)	1:A:659:GLN:HG3	1:A:660:GLN:H	7	0.34
(1,788)	1:A:644:GLN:H	1:A:644:GLN:HG3	11	0.34
(1,788)	1:A:644:GLN:H	1:A:644:GLN:HG3	12	0.34
(1,788)	1:A:644:GLN:H	1:A:644:GLN:HG3	15	0.34
(1,66)	1:A:602:ASP:HA	1:A:605:MET:HB3	2	0.34
(1,393)	1:A:591:ALA:H	1:A:606:ARG:HD3	13	0.34
(1,228)	1:A:627:VAL:HG11	1:A:654:HIS:HB3	10	0.34

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,228)	1:A:627:VAL:HG12	1:A:654:HIS:HB3	10	0.34
(1,228)	1:A:627:VAL:HG13	1:A:654:HIS:HB3	10	0.34
(1,181)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG21	12	0.34
(1,181)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG22	12	0.34
(1,181)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG23	12	0.34
(1,1192)	1:A:658:SER:H	1:A:659:GLN:HB3	4	0.34
(1,1147)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:HD11	1	0.34
(1,1147)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:HD12	1	0.34
(1,1147)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:HD13	1	0.34
(1,1147)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:HD11	19	0.34
(1,1147)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:HD12	19	0.34
(1,1147)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:HD13	19	0.34
(1,1119)	1:A:634:PRO:HB3	1:A:635:GLN:H	8	0.34
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG21	1:A:636:GLN:HB3	13	0.34
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG22	1:A:636:GLN:HB3	13	0.34
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG23	1:A:636:GLN:HB3	13	0.34
(1,1043)	1:A:619:LEU:HA	1:A:622:LYS:HB3	3	0.34
(1,1010)	1:A:603:VAL:HA	1:A:606:ARG:HG3	6	0.34
(1,1006)	1:A:601:ARG:HA	1:A:601:ARG:HG3	2	0.34
(1,98)	1:A:624:LYS:HB3	1:A:624:LYS:HD3	13	0.33
(1,976)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:H	13	0.33
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB1	9	0.33
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB2	9	0.33
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB3	9	0.33
(1,881)	1:A:587:ALA:HA	1:A:590:GLU:HB3	11	0.33
(1,881)	1:A:587:ALA:HA	1:A:590:GLU:HB3	18	0.33
(1,879)	1:A:586:GLU:HB3	1:A:646:LEU:HD11	3	0.33
(1,879)	1:A:586:GLU:HB3	1:A:646:LEU:HD12	3	0.33
(1,879)	1:A:586:GLU:HB3	1:A:646:LEU:HD13	3	0.33
(1,872)	1:A:585:VAL:HG11	1:A:643:PRO:HG3	10	0.33
(1,872)	1:A:585:VAL:HG12	1:A:643:PRO:HG3	10	0.33
(1,872)	1:A:585:VAL:HG13	1:A:643:PRO:HG3	10	0.33
(1,872)	1:A:585:VAL:HG21	1:A:643:PRO:HG3	10	0.33
(1,872)	1:A:585:VAL:HG22	1:A:643:PRO:HG3	10	0.33
(1,872)	1:A:585:VAL:HG23	1:A:643:PRO:HG3	10	0.33
(1,836)	1:A:581:SER:H	1:A:581:SER:HB3	4	0.33
(1,834)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG11	20	0.33
(1,834)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG12	20	0.33
(1,834)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG13	20	0.33
(1,834)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG21	20	0.33
(1,834)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG22	20	0.33
(1,834)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG23	20	0.33

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,827)	1:A:649:ARG:H	1:A:649:ARG:HD3	19	0.33
(1,81)	1:A:611:ALA:HA	1:A:612:ASP:HB3	16	0.33
(1,788)	1:A:644:GLN:H	1:A:644:GLN:HG3	18	0.33
(1,664)	1:A:594:HIS:HB3	1:A:595:LEU:H	5	0.33
(1,574)	1:A:599:ARG:H	1:A:599:ARG:HD3	3	0.33
(1,44)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HA	9	0.33
(1,427)	1:A:605:MET:HB3	1:A:606:ARG:H	17	0.33
(1,393)	1:A:591:ALA:H	1:A:606:ARG:HD3	17	0.33
(1,358)	1:A:586:GLU:HG3	1:A:646:LEU:HD21	4	0.33
(1,358)	1:A:586:GLU:HG3	1:A:646:LEU:HD22	4	0.33
(1,358)	1:A:586:GLU:HG3	1:A:646:LEU:HD23	4	0.33
(1,159)	1:A:644:GLN:HA	1:A:647:LEU:HB3	12	0.33
(1,1119)	1:A:634:PRO:HB3	1:A:635:GLN:H	12	0.33
(1,1118)	1:A:633:ALA:HB1	1:A:635:GLN:HG3	14	0.33
(1,1118)	1:A:633:ALA:HB2	1:A:635:GLN:HG3	14	0.33
(1,1118)	1:A:633:ALA:HB3	1:A:635:GLN:HG3	14	0.33
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD11	1:A:636:GLN:HB3	4	0.33
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD12	1:A:636:GLN:HB3	4	0.33
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD13	1:A:636:GLN:HB3	4	0.33
(1,1033)	1:A:610:ASN:H	1:A:610:ASN:HB3	10	0.33
(1,1025)	1:A:606:ARG:HG3	1:A:607:ALA:HA	19	0.33
(1,1010)	1:A:603:VAL:HA	1:A:606:ARG:HG3	15	0.33
(1,1003)	1:A:600:TRP:HB3	1:A:616:TYR:HA	19	0.33
(1,998)	1:A:599:ARG:HG3	1:A:600:TRP:H	12	0.32
(1,964)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:650:VAL:H	15	0.32
(1,961)	1:A:593:GLU:H	1:A:593:GLU:HG3	17	0.32
(1,927)	1:A:590:GLU:H	1:A:590:GLU:HG3	4	0.32
(1,927)	1:A:590:GLU:H	1:A:590:GLU:HG3	12	0.32
(1,92)	1:A:597:THR:HG21	1:A:623:TRP:HB3	1	0.32
(1,92)	1:A:597:THR:HG22	1:A:623:TRP:HB3	1	0.32
(1,92)	1:A:597:THR:HG23	1:A:623:TRP:HB3	1	0.32
(1,910)	1:A:589:VAL:HA	1:A:593:GLU:HG3	12	0.32
(1,881)	1:A:587:ALA:HA	1:A:590:GLU:HB3	2	0.32
(1,879)	1:A:586:GLU:HB3	1:A:646:LEU:HD11	5	0.32
(1,879)	1:A:586:GLU:HB3	1:A:646:LEU:HD12	5	0.32
(1,879)	1:A:586:GLU:HB3	1:A:646:LEU:HD13	5	0.32
(1,827)	1:A:649:ARG:H	1:A:649:ARG:HD3	5	0.32
(1,788)	1:A:644:GLN:H	1:A:644:GLN:HG3	1	0.32
(1,788)	1:A:644:GLN:H	1:A:644:GLN:HG3	10	0.32
(1,788)	1:A:644:GLN:H	1:A:644:GLN:HG3	17	0.32
(1,614)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:586:GLU:H	6	0.32
(1,614)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:586:GLU:H	8	0.32

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,614)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:586:GLU:H	14	0.32
(1,583)	1:A:636:GLN:H	1:A:636:GLN:HG3	19	0.32
(1,427)	1:A:605:MET:HB3	1:A:606:ARG:H	11	0.32
(1,427)	1:A:605:MET:HB3	1:A:606:ARG:H	12	0.32
(1,427)	1:A:605:MET:HB3	1:A:606:ARG:H	13	0.32
(1,318)	1:A:632:ILE:H	1:A:632:ILE:HG13	15	0.32
(1,277)	1:A:588:LEU:HD21	1:A:623:TRP:HB3	17	0.32
(1,277)	1:A:588:LEU:HD22	1:A:623:TRP:HB3	17	0.32
(1,277)	1:A:588:LEU:HD23	1:A:623:TRP:HB3	17	0.32
(1,1125)	1:A:638:ARG:HB3	1:A:638:ARG:HG3	2	0.32
(1,1123)	1:A:638:ARG:H	1:A:638:ARG:HG3	3	0.32
(1,1112)	1:A:632:ILE:HB	1:A:636:GLN:HB3	14	0.32
(1,1112)	1:A:632:ILE:HB	1:A:636:GLN:HB3	18	0.32
(1,1099)	1:A:628:HIS:HB3	1:A:630:ALA:H	20	0.32
(1,1048)	1:A:621:ASP:HB3	1:A:622:LYS:H	6	0.32
(1,1033)	1:A:610:ASN:H	1:A:610:ASN:HB3	11	0.32
(1,1006)	1:A:601:ARG:HA	1:A:601:ARG:HG3	17	0.32
(1,978)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:HG21	19	0.31
(1,978)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:HG22	19	0.31
(1,978)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:HG23	19	0.31
(1,976)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:H	11	0.31
(1,953)	1:A:592:VAL:HG11	1:A:623:TRP:HB3	18	0.31
(1,953)	1:A:592:VAL:HG12	1:A:623:TRP:HB3	18	0.31
(1,953)	1:A:592:VAL:HG13	1:A:623:TRP:HB3	18	0.31
(1,953)	1:A:592:VAL:HG21	1:A:623:TRP:HB3	18	0.31
(1,953)	1:A:592:VAL:HG22	1:A:623:TRP:HB3	18	0.31
(1,953)	1:A:592:VAL:HG23	1:A:623:TRP:HB3	18	0.31
(1,942)	1:A:592:VAL:HG11	1:A:593:GLU:HG3	12	0.31
(1,942)	1:A:592:VAL:HG12	1:A:593:GLU:HG3	12	0.31
(1,942)	1:A:592:VAL:HG13	1:A:593:GLU:HG3	12	0.31
(1,942)	1:A:592:VAL:HG21	1:A:593:GLU:HG3	12	0.31
(1,942)	1:A:592:VAL:HG22	1:A:593:GLU:HG3	12	0.31
(1,942)	1:A:592:VAL:HG23	1:A:593:GLU:HG3	12	0.31
(1,860)	1:A:585:VAL:HA	1:A:586:GLU:HB3	8	0.31
(1,810)	1:A:640:GLU:H	1:A:640:GLU:HG3	2	0.31
(1,810)	1:A:640:GLU:H	1:A:640:GLU:HG3	9	0.31
(1,81)	1:A:611:ALA:HA	1:A:612:ASP:HB3	19	0.31
(1,797)	1:A:659:GLN:HG3	1:A:660:GLN:H	11	0.31
(1,797)	1:A:659:GLN:HG3	1:A:660:GLN:H	18	0.31
(1,67)	1:A:651:LEU:HA	1:A:654:HIS:HB3	19	0.31
(1,651)	1:A:593:GLU:H	1:A:594:HIS:HB3	9	0.31
(1,651)	1:A:593:GLU:H	1:A:594:HIS:HB3	20	0.31

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,539)	1:A:622:LYS:H	1:A:624:LYS:HB3	16	0.31
(1,539)	1:A:622:LYS:H	1:A:624:LYS:HB3	18	0.31
(1,524)	1:A:624:LYS:H	1:A:624:LYS:HG3	5	0.31
(1,515)	1:A:624:LYS:HD3	1:A:625:THR:H	16	0.31
(1,427)	1:A:605:MET:HB3	1:A:606:ARG:H	5	0.31
(1,1125)	1:A:638:ARG:HB3	1:A:638:ARG:HG3	15	0.31
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD11	1:A:636:GLN:HB3	6	0.31
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD12	1:A:636:GLN:HB3	6	0.31
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD13	1:A:636:GLN:HB3	6	0.31
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD11	1:A:636:GLN:HB3	7	0.31
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD12	1:A:636:GLN:HB3	7	0.31
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD13	1:A:636:GLN:HB3	7	0.31
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG21	1:A:636:GLN:HB3	16	0.31
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG22	1:A:636:GLN:HB3	16	0.31
(1,1113)	1:A:632:ILE:HG23	1:A:636:GLN:HB3	16	0.31
(1,1099)	1:A:628:HIS:HB3	1:A:630:ALA:H	6	0.31
(1,1043)	1:A:619:LEU:HA	1:A:622:LYS:HB3	4	0.31
(1,976)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:H	5	0.3
(1,975)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:596:GLY:H	20	0.3
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB1	8	0.3
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB2	8	0.3
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB3	8	0.3
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB1	11	0.3
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB2	11	0.3
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB3	11	0.3
(1,966)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:H	7	0.3
(1,81)	1:A:611:ALA:HA	1:A:612:ASP:HB3	4	0.3
(1,794)	1:A:659:GLN:H	1:A:659:GLN:HG3	13	0.3
(1,788)	1:A:644:GLN:H	1:A:644:GLN:HG3	6	0.3
(1,759)	1:A:644:GLN:HG3	1:A:648:ASP:H	1	0.3
(1,589)	1:A:636:GLN:HG3	1:A:637:ARG:H	18	0.3
(1,583)	1:A:636:GLN:H	1:A:636:GLN:HG3	7	0.3
(1,524)	1:A:624:LYS:H	1:A:624:LYS:HG3	7	0.3
(1,515)	1:A:624:LYS:HD3	1:A:625:THR:H	10	0.3
(1,318)	1:A:632:ILE:H	1:A:632:ILE:HG13	8	0.3
(1,318)	1:A:632:ILE:H	1:A:632:ILE:HG13	12	0.3
(1,277)	1:A:588:LEU:HD21	1:A:623:TRP:HB3	3	0.3
(1,277)	1:A:588:LEU:HD22	1:A:623:TRP:HB3	3	0.3
(1,277)	1:A:588:LEU:HD23	1:A:623:TRP:HB3	3	0.3
(1,131)	1:A:627:VAL:HB	1:A:654:HIS:HB3	5	0.3
(1,1185)	1:A:651:LEU:HD11	1:A:654:HIS:HB3	17	0.3
(1,1185)	1:A:651:LEU:HD12	1:A:654:HIS:HB3	17	0.3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1185)	1:A:651:LEU:HD13	1:A:654:HIS:HB3	17	0.3
(1,1185)	1:A:651:LEU:HD21	1:A:654:HIS:HB3	17	0.3
(1,1185)	1:A:651:LEU:HD22	1:A:654:HIS:HB3	17	0.3
(1,1185)	1:A:651:LEU:HD23	1:A:654:HIS:HB3	17	0.3
(1,1125)	1:A:638:ARG:HB3	1:A:638:ARG:HG3	8	0.3
(1,1112)	1:A:632:ILE:HB	1:A:636:GLN:HB3	3	0.3
(1,1112)	1:A:632:ILE:HB	1:A:636:GLN:HB3	15	0.3
(1,1099)	1:A:628:HIS:HB3	1:A:630:ALA:H	12	0.3
(1,1099)	1:A:628:HIS:HB3	1:A:630:ALA:H	19	0.3
(1,1047)	1:A:621:ASP:H	1:A:621:ASP:HB3	15	0.3
(1,1009)	1:A:601:ARG:HB3	1:A:601:ARG:HD3	10	0.3
(2,9)	1:A:589:VAL:O	1:A:592:VAL:H	10	0.29
(2,9)	1:A:589:VAL:O	1:A:592:VAL:H	11	0.29
(1,975)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:596:GLY:H	7	0.29
(1,975)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:596:GLY:H	15	0.29
(1,975)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:596:GLY:H	16	0.29
(1,961)	1:A:593:GLU:H	1:A:593:GLU:HG3	12	0.29
(1,860)	1:A:585:VAL:HA	1:A:586:GLU:HB3	6	0.29
(1,860)	1:A:585:VAL:HA	1:A:586:GLU:HB3	15	0.29
(1,827)	1:A:649:ARG:H	1:A:649:ARG:HD3	17	0.29
(1,788)	1:A:644:GLN:H	1:A:644:GLN:HG3	7	0.29
(1,539)	1:A:622:LYS:H	1:A:624:LYS:HB3	17	0.29
(1,524)	1:A:624:LYS:H	1:A:624:LYS:HG3	10	0.29
(1,485)	1:A:630:ALA:H	1:A:647:LEU:HG	11	0.29
(1,318)	1:A:632:ILE:H	1:A:632:ILE:HG13	18	0.29
(1,228)	1:A:627:VAL:HG11	1:A:654:HIS:HB3	1	0.29
(1,228)	1:A:627:VAL:HG12	1:A:654:HIS:HB3	1	0.29
(1,228)	1:A:627:VAL:HG13	1:A:654:HIS:HB3	1	0.29
(1,159)	1:A:644:GLN:HA	1:A:647:LEU:HB3	14	0.29
(1,1043)	1:A:619:LEU:HA	1:A:622:LYS:HB3	7	0.29
(1,1033)	1:A:610:ASN:H	1:A:610:ASN:HB3	18	0.29
(1,1022)	1:A:606:ARG:H	1:A:606:ARG:HG3	8	0.29
(1,1022)	1:A:606:ARG:H	1:A:606:ARG:HG3	13	0.29
(1,1022)	1:A:606:ARG:H	1:A:606:ARG:HG3	20	0.29
(1,1003)	1:A:600:TRP:HB3	1:A:616:TYR:HA	6	0.29
(2,9)	1:A:589:VAL:O	1:A:592:VAL:H	2	0.28
(1,978)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:HG21	10	0.28
(1,978)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:HG22	10	0.28
(1,978)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:HG23	10	0.28
(1,975)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:596:GLY:H	1	0.28
(1,975)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:596:GLY:H	3	0.28
(1,975)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:596:GLY:H	9	0.28

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,932)	1:A:590:GLU:HG3	1:A:591:ALA:H	8	0.28
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB1	10	0.28
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB2	10	0.28
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB3	10	0.28
(1,927)	1:A:590:GLU:H	1:A:590:GLU:HG3	10	0.28
(1,92)	1:A:597:THR:HG21	1:A:623:TRP:HB3	15	0.28
(1,92)	1:A:597:THR:HG22	1:A:623:TRP:HB3	15	0.28
(1,92)	1:A:597:THR:HG23	1:A:623:TRP:HB3	15	0.28
(1,794)	1:A:659:GLN:H	1:A:659:GLN:HG3	15	0.28
(1,788)	1:A:644:GLN:H	1:A:644:GLN:HG3	20	0.28
(1,614)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:586:GLU:H	7	0.28
(1,358)	1:A:586:GLU:HG3	1:A:646:LEU:HD21	18	0.28
(1,358)	1:A:586:GLU:HG3	1:A:646:LEU:HD22	18	0.28
(1,358)	1:A:586:GLU:HG3	1:A:646:LEU:HD23	18	0.28
(1,346)	1:A:651:LEU:H	1:A:651:LEU:HD11	18	0.28
(1,346)	1:A:651:LEU:H	1:A:651:LEU:HD12	18	0.28
(1,346)	1:A:651:LEU:H	1:A:651:LEU:HD13	18	0.28
(1,268)	1:A:629:THR:HG21	1:A:647:LEU:HG	15	0.28
(1,268)	1:A:629:THR:HG22	1:A:647:LEU:HG	15	0.28
(1,268)	1:A:629:THR:HG23	1:A:647:LEU:HG	15	0.28
(1,172)	1:A:633:ALA:HB1	1:A:635:GLN:HB3	18	0.28
(1,172)	1:A:633:ALA:HB2	1:A:635:GLN:HB3	18	0.28
(1,172)	1:A:633:ALA:HB3	1:A:635:GLN:HB3	18	0.28
(1,159)	1:A:644:GLN:HA	1:A:647:LEU:HB3	11	0.28
(1,1196)	1:A:660:GLN:H	1:A:660:GLN:HB3	4	0.28
(1,1196)	1:A:660:GLN:H	1:A:660:GLN:HB3	9	0.28
(1,1163)	1:A:648:ASP:H	1:A:649:ARG:HG3	20	0.28
(1,1154)	1:A:647:LEU:H	1:A:648:ASP:HB3	4	0.28
(1,1146)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:H	1	0.28
(1,1146)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:H	6	0.28
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD11	1:A:636:GLN:HB3	17	0.28
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD12	1:A:636:GLN:HB3	17	0.28
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD13	1:A:636:GLN:HB3	17	0.28
(1,1110)	1:A:631:SER:H	1:A:631:SER:HB3	18	0.28
(1,1099)	1:A:628:HIS:HB3	1:A:630:ALA:H	4	0.28
(1,1047)	1:A:621:ASP:H	1:A:621:ASP:HB3	18	0.28
(1,1022)	1:A:606:ARG:H	1:A:606:ARG:HG3	14	0.28
(1,1011)	1:A:603:VAL:HG11	1:A:619:LEU:HB3	3	0.28
(1,1011)	1:A:603:VAL:HG12	1:A:619:LEU:HB3	3	0.28
(1,1011)	1:A:603:VAL:HG13	1:A:619:LEU:HB3	3	0.28
(1,98)	1:A:624:LYS:HB3	1:A:624:LYS:HD3	18	0.27
(1,975)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:596:GLY:H	6	0.27

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,860)	1:A:585:VAL:HA	1:A:586:GLU:HB3	17	0.27
(1,827)	1:A:649:ARG:H	1:A:649:ARG:HD3	20	0.27
(1,794)	1:A:659:GLN:H	1:A:659:GLN:HG3	9	0.27
(1,788)	1:A:644:GLN:H	1:A:644:GLN:HG3	3	0.27
(1,788)	1:A:644:GLN:H	1:A:644:GLN:HG3	9	0.27
(1,759)	1:A:644:GLN:HG3	1:A:648:ASP:H	8	0.27
(1,664)	1:A:594:HIS:HB3	1:A:595:LEU:H	8	0.27
(1,574)	1:A:599:ARG:H	1:A:599:ARG:HD3	8	0.27
(1,524)	1:A:624:LYS:H	1:A:624:LYS:HG3	9	0.27
(1,427)	1:A:605:MET:HB3	1:A:606:ARG:H	6	0.27
(1,427)	1:A:605:MET:HB3	1:A:606:ARG:H	8	0.27
(1,268)	1:A:629:THR:HG21	1:A:647:LEU:HG	7	0.27
(1,268)	1:A:629:THR:HG22	1:A:647:LEU:HG	7	0.27
(1,268)	1:A:629:THR:HG23	1:A:647:LEU:HG	7	0.27
(1,268)	1:A:629:THR:HG21	1:A:647:LEU:HG	20	0.27
(1,268)	1:A:629:THR:HG22	1:A:647:LEU:HG	20	0.27
(1,268)	1:A:629:THR:HG23	1:A:647:LEU:HG	20	0.27
(1,1123)	1:A:638:ARG:H	1:A:638:ARG:HG3	7	0.27
(1,1112)	1:A:632:ILE:HB	1:A:636:GLN:HB3	10	0.27
(1,1110)	1:A:631:SER:H	1:A:631:SER:HB3	1	0.27
(1,1110)	1:A:631:SER:H	1:A:631:SER:HB3	6	0.27
(1,1110)	1:A:631:SER:H	1:A:631:SER:HB3	17	0.27
(1,1110)	1:A:631:SER:H	1:A:631:SER:HB3	19	0.27
(1,1047)	1:A:621:ASP:H	1:A:621:ASP:HB3	5	0.27
(1,1038)	1:A:617:VAL:HG21	1:A:621:ASP:HB3	4	0.27
(1,1038)	1:A:617:VAL:HG22	1:A:621:ASP:HB3	4	0.27
(1,1038)	1:A:617:VAL:HG23	1:A:621:ASP:HB3	4	0.27
(1,1033)	1:A:610:ASN:H	1:A:610:ASN:HB3	8	0.27
(1,1022)	1:A:606:ARG:H	1:A:606:ARG:HG3	17	0.27
(1,1010)	1:A:603:VAL:HA	1:A:606:ARG:HG3	19	0.27
(1,1003)	1:A:600:TRP:HB3	1:A:616:TYR:HA	2	0.27
(1,98)	1:A:624:LYS:HB3	1:A:624:LYS:HD3	7	0.26
(1,976)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:H	8	0.26
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB1	5	0.26
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB2	5	0.26
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB3	5	0.26
(1,953)	1:A:592:VAL:HG11	1:A:623:TRP:HB3	8	0.26
(1,953)	1:A:592:VAL:HG12	1:A:623:TRP:HB3	8	0.26
(1,953)	1:A:592:VAL:HG13	1:A:623:TRP:HB3	8	0.26
(1,953)	1:A:592:VAL:HG21	1:A:623:TRP:HB3	8	0.26
(1,953)	1:A:592:VAL:HG22	1:A:623:TRP:HB3	8	0.26
(1,953)	1:A:592:VAL:HG23	1:A:623:TRP:HB3	8	0.26

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,94)	1:A:624:LYS:HA	1:A:624:LYS:HD3	14	0.26
(1,860)	1:A:585:VAL:HA	1:A:586:GLU:HB3	12	0.26
(1,860)	1:A:585:VAL:HA	1:A:586:GLU:HB3	18	0.26
(1,860)	1:A:585:VAL:HA	1:A:586:GLU:HB3	19	0.26
(1,759)	1:A:644:GLN:HG3	1:A:648:ASP:H	13	0.26
(1,664)	1:A:594:HIS:HB3	1:A:595:LEU:H	1	0.26
(1,583)	1:A:636:GLN:H	1:A:636:GLN:HG3	18	0.26
(1,524)	1:A:624:LYS:H	1:A:624:LYS:HG3	18	0.26
(1,427)	1:A:605:MET:HB3	1:A:606:ARG:H	10	0.26
(1,252)	1:A:597:THR:HG21	1:A:654:HIS:HB3	16	0.26
(1,252)	1:A:597:THR:HG22	1:A:654:HIS:HB3	16	0.26
(1,252)	1:A:597:THR:HG23	1:A:654:HIS:HB3	16	0.26
(1,159)	1:A:644:GLN:HA	1:A:647:LEU:HB3	16	0.26
(1,131)	1:A:627:VAL:HB	1:A:654:HIS:HB3	3	0.26
(1,131)	1:A:627:VAL:HB	1:A:654:HIS:HB3	9	0.26
(1,1119)	1:A:634:PRO:HB3	1:A:635:GLN:H	3	0.26
(1,1110)	1:A:631:SER:H	1:A:631:SER:HB3	12	0.26
(1,1110)	1:A:631:SER:H	1:A:631:SER:HB3	14	0.26
(1,1099)	1:A:628:HIS:HB3	1:A:630:ALA:H	5	0.26
(1,1033)	1:A:610:ASN:H	1:A:610:ASN:HB3	3	0.26
(1,1016)	1:A:604:LYS:HA	1:A:619:LEU:HB3	15	0.26
(1,1009)	1:A:601:ARG:HB3	1:A:601:ARG:HD3	5	0.26
(1,998)	1:A:599:ARG:HG3	1:A:600:TRP:H	3	0.25
(1,98)	1:A:624:LYS:HB3	1:A:624:LYS:HD3	8	0.25
(1,98)	1:A:624:LYS:HB3	1:A:624:LYS:HD3	19	0.25
(1,978)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:HG21	18	0.25
(1,978)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:HG22	18	0.25
(1,978)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:HG23	18	0.25
(1,872)	1:A:585:VAL:HG11	1:A:643:PRO:HG3	7	0.25
(1,872)	1:A:585:VAL:HG12	1:A:643:PRO:HG3	7	0.25
(1,872)	1:A:585:VAL:HG13	1:A:643:PRO:HG3	7	0.25
(1,872)	1:A:585:VAL:HG21	1:A:643:PRO:HG3	7	0.25
(1,872)	1:A:585:VAL:HG22	1:A:643:PRO:HG3	7	0.25
(1,872)	1:A:585:VAL:HG23	1:A:643:PRO:HG3	7	0.25
(1,860)	1:A:585:VAL:HA	1:A:586:GLU:HB3	16	0.25
(1,843)	1:A:581:SER:HB3	1:A:583:ALA:HB1	19	0.25
(1,843)	1:A:581:SER:HB3	1:A:583:ALA:HB2	19	0.25
(1,843)	1:A:581:SER:HB3	1:A:583:ALA:HB3	19	0.25
(1,843)	1:A:581:SER:HB3	1:A:583:ALA:HB1	20	0.25
(1,843)	1:A:581:SER:HB3	1:A:583:ALA:HB2	20	0.25
(1,843)	1:A:581:SER:HB3	1:A:583:ALA:HB3	20	0.25
(1,827)	1:A:649:ARG:H	1:A:649:ARG:HD3	4	0.25

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,827)	1:A:649:ARG:H	1:A:649:ARG:HD3	15	0.25
(1,794)	1:A:659:GLN:H	1:A:659:GLN:HG3	8	0.25
(1,759)	1:A:644:GLN:HG3	1:A:648:ASP:H	15	0.25
(1,664)	1:A:594:HIS:HB3	1:A:595:LEU:H	6	0.25
(1,614)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:586:GLU:H	10	0.25
(1,614)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:586:GLU:H	13	0.25
(1,574)	1:A:599:ARG:H	1:A:599:ARG:HD3	7	0.25
(1,524)	1:A:624:LYS:H	1:A:624:LYS:HG3	3	0.25
(1,524)	1:A:624:LYS:H	1:A:624:LYS:HG3	6	0.25
(1,119)	1:A:633:ALA:HB1	1:A:634:PRO:HD3	9	0.25
(1,119)	1:A:633:ALA:HB2	1:A:634:PRO:HD3	9	0.25
(1,119)	1:A:633:ALA:HB3	1:A:634:PRO:HD3	9	0.25
(1,1170)	1:A:649:ARG:HA	1:A:649:ARG:HG3	20	0.25
(1,1112)	1:A:632:ILE:HB	1:A:636:GLN:HB3	1	0.25
(1,1110)	1:A:631:SER:H	1:A:631:SER:HB3	7	0.25
(1,1110)	1:A:631:SER:H	1:A:631:SER:HB3	10	0.25
(1,1033)	1:A:610:ASN:H	1:A:610:ASN:HB3	7	0.25
(1,1025)	1:A:606:ARG:HG3	1:A:607:ALA:HA	3	0.25
(1,1022)	1:A:606:ARG:H	1:A:606:ARG:HG3	5	0.25
(1,1022)	1:A:606:ARG:H	1:A:606:ARG:HG3	11	0.25
(1,1022)	1:A:606:ARG:H	1:A:606:ARG:HG3	18	0.25
(1,1004)	1:A:600:TRP:HB3	1:A:616:TYR:HB3	18	0.25
(1,1001)	1:A:600:TRP:HA	1:A:616:TYR:HB3	6	0.25
(1,998)	1:A:599:ARG:HG3	1:A:600:TRP:H	1	0.24
(1,98)	1:A:624:LYS:HB3	1:A:624:LYS:HD3	12	0.24
(1,953)	1:A:592:VAL:HG11	1:A:623:TRP:HB3	11	0.24
(1,953)	1:A:592:VAL:HG12	1:A:623:TRP:HB3	11	0.24
(1,953)	1:A:592:VAL:HG13	1:A:623:TRP:HB3	11	0.24
(1,953)	1:A:592:VAL:HG21	1:A:623:TRP:HB3	11	0.24
(1,953)	1:A:592:VAL:HG22	1:A:623:TRP:HB3	11	0.24
(1,953)	1:A:592:VAL:HG23	1:A:623:TRP:HB3	11	0.24
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB1	15	0.24
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB2	15	0.24
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB3	15	0.24
(1,794)	1:A:659:GLN:H	1:A:659:GLN:HG3	14	0.24
(1,583)	1:A:636:GLN:H	1:A:636:GLN:HG3	11	0.24
(1,524)	1:A:624:LYS:H	1:A:624:LYS:HG3	19	0.24
(1,510)	1:A:626:LEU:H	1:A:626:LEU:HG	15	0.24
(1,464)	1:A:633:ALA:H	1:A:636:GLN:HG3	16	0.24
(1,44)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HA	2	0.24
(1,318)	1:A:632:ILE:H	1:A:632:ILE:HG13	3	0.24
(1,318)	1:A:632:ILE:H	1:A:632:ILE:HG13	7	0.24

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,318)	1:A:632:ILE:H	1:A:632:ILE:HG13	10	0.24
(1,318)	1:A:632:ILE:H	1:A:632:ILE:HG13	16	0.24
(1,263)	1:A:624:LYS:HB3	1:A:625:THR:HG21	13	0.24
(1,263)	1:A:624:LYS:HB3	1:A:625:THR:HG22	13	0.24
(1,263)	1:A:624:LYS:HB3	1:A:625:THR:HG23	13	0.24
(1,1146)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:H	3	0.24
(1,1146)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:H	11	0.24
(1,1119)	1:A:634:PRO:HB3	1:A:635:GLN:H	15	0.24
(1,1047)	1:A:621:ASP:H	1:A:621:ASP:HB3	2	0.24
(1,1013)	1:A:604:LYS:H	1:A:604:LYS:HB3	8	0.24
(2,9)	1:A:589:VAL:O	1:A:592:VAL:H	4	0.23
(2,9)	1:A:589:VAL:O	1:A:592:VAL:H	14	0.23
(1,978)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:HG21	11	0.23
(1,978)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:HG22	11	0.23
(1,978)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:HG23	11	0.23
(1,977)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:HA	10	0.23
(1,964)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:650:VAL:H	1	0.23
(1,928)	1:A:590:GLU:HA	1:A:590:GLU:HG3	8	0.23
(1,927)	1:A:590:GLU:H	1:A:590:GLU:HG3	6	0.23
(1,842)	1:A:581:SER:HB3	1:A:583:ALA:H	9	0.23
(1,834)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG11	16	0.23
(1,834)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG12	16	0.23
(1,834)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG13	16	0.23
(1,834)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG21	16	0.23
(1,834)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG22	16	0.23
(1,834)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG23	16	0.23
(1,788)	1:A:644:GLN:H	1:A:644:GLN:HG3	13	0.23
(1,768)	1:A:644:GLN:HG3	1:A:647:LEU:H	6	0.23
(1,735)	1:A:652:ALA:H	1:A:654:HIS:HB3	9	0.23
(1,651)	1:A:593:GLU:H	1:A:594:HIS:HB3	11	0.23
(1,464)	1:A:633:ALA:H	1:A:636:GLN:HG3	6	0.23
(1,44)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HA	4	0.23
(1,3)	1:A:592:VAL:HG21	1:A:596:GLY:HA2	19	0.23
(1,3)	1:A:592:VAL:HG22	1:A:596:GLY:HA2	19	0.23
(1,3)	1:A:592:VAL:HG23	1:A:596:GLY:HA2	19	0.23
(1,135)	1:A:653:ALA:HB1	1:A:654:HIS:HB3	18	0.23
(1,135)	1:A:653:ALA:HB2	1:A:654:HIS:HB3	18	0.23
(1,135)	1:A:653:ALA:HB3	1:A:654:HIS:HB3	18	0.23
(1,1147)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:HD11	9	0.23
(1,1147)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:HD12	9	0.23
(1,1147)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:HD13	9	0.23
(1,1146)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:H	18	0.23

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1124)	1:A:638:ARG:HA	1:A:638:ARG:HD3	5	0.23
(1,1099)	1:A:628:HIS:HB3	1:A:630:ALA:H	8	0.23
(1,1099)	1:A:628:HIS:HB3	1:A:630:ALA:H	11	0.23
(1,1033)	1:A:610:ASN:H	1:A:610:ASN:HB3	5	0.23
(1,1022)	1:A:606:ARG:H	1:A:606:ARG:HG3	10	0.23
(1,998)	1:A:599:ARG:HG3	1:A:600:TRP:H	5	0.22
(1,961)	1:A:593:GLU:H	1:A:593:GLU:HG3	14	0.22
(1,961)	1:A:593:GLU:H	1:A:593:GLU:HG3	19	0.22
(1,928)	1:A:590:GLU:HA	1:A:590:GLU:HG3	6	0.22
(1,881)	1:A:587:ALA:HA	1:A:590:GLU:HB3	20	0.22
(1,854)	1:A:583:ALA:HA	1:A:586:GLU:HB3	2	0.22
(1,794)	1:A:659:GLN:H	1:A:659:GLN:HG3	11	0.22
(1,788)	1:A:644:GLN:H	1:A:644:GLN:HG3	14	0.22
(1,536)	1:A:622:LYS:H	1:A:623:TRP:HB3	12	0.22
(1,358)	1:A:586:GLU:HG3	1:A:646:LEU:HD21	19	0.22
(1,358)	1:A:586:GLU:HG3	1:A:646:LEU:HD22	19	0.22
(1,358)	1:A:586:GLU:HG3	1:A:646:LEU:HD23	19	0.22
(1,318)	1:A:632:ILE:H	1:A:632:ILE:HG13	1	0.22
(1,3)	1:A:592:VAL:HG21	1:A:596:GLY:HA2	12	0.22
(1,3)	1:A:592:VAL:HG22	1:A:596:GLY:HA2	12	0.22
(1,3)	1:A:592:VAL:HG23	1:A:596:GLY:HA2	12	0.22
(1,268)	1:A:629:THR:HG21	1:A:647:LEU:HG	12	0.22
(1,268)	1:A:629:THR:HG22	1:A:647:LEU:HG	12	0.22
(1,268)	1:A:629:THR:HG23	1:A:647:LEU:HG	12	0.22
(1,119)	1:A:633:ALA:HB1	1:A:634:PRO:HD3	1	0.22
(1,119)	1:A:633:ALA:HB2	1:A:634:PRO:HD3	1	0.22
(1,119)	1:A:633:ALA:HB3	1:A:634:PRO:HD3	1	0.22
(1,1119)	1:A:634:PRO:HB3	1:A:635:GLN:H	10	0.22
(1,1099)	1:A:628:HIS:HB3	1:A:630:ALA:H	17	0.22
(1,1099)	1:A:628:HIS:HB3	1:A:630:ALA:H	18	0.22
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG11	1:A:632:ILE:H	16	0.22
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG12	1:A:632:ILE:H	16	0.22
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG13	1:A:632:ILE:H	16	0.22
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG21	1:A:632:ILE:H	16	0.22
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG22	1:A:632:ILE:H	16	0.22
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG23	1:A:632:ILE:H	16	0.22
(1,1033)	1:A:610:ASN:H	1:A:610:ASN:HB3	19	0.22
(1,1022)	1:A:606:ARG:H	1:A:606:ARG:HG3	16	0.22
(1,1011)	1:A:603:VAL:HG11	1:A:619:LEU:HB3	4	0.22
(1,1011)	1:A:603:VAL:HG12	1:A:619:LEU:HB3	4	0.22
(1,1011)	1:A:603:VAL:HG13	1:A:619:LEU:HB3	4	0.22
(1,978)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:HG21	4	0.21

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,978)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:HG22	4	0.21
(1,978)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:HG23	4	0.21
(1,976)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:H	14	0.21
(1,97)	1:A:621:ASP:HA	1:A:624:LYS:HB3	12	0.21
(1,962)	1:A:593:GLU:HA	1:A:593:GLU:HG3	12	0.21
(1,961)	1:A:593:GLU:H	1:A:593:GLU:HG3	5	0.21
(1,881)	1:A:587:ALA:HA	1:A:590:GLU:HB3	10	0.21
(1,842)	1:A:581:SER:HB3	1:A:583:ALA:H	19	0.21
(1,827)	1:A:649:ARG:H	1:A:649:ARG:HD3	8	0.21
(1,81)	1:A:611:ALA:HA	1:A:612:ASP:HB3	20	0.21
(1,788)	1:A:644:GLN:H	1:A:644:GLN:HG3	19	0.21
(1,759)	1:A:644:GLN:HG3	1:A:648:ASP:H	6	0.21
(1,614)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:586:GLU:H	3	0.21
(1,589)	1:A:636:GLN:HG3	1:A:637:ARG:H	10	0.21
(1,583)	1:A:636:GLN:H	1:A:636:GLN:HG3	10	0.21
(1,583)	1:A:636:GLN:H	1:A:636:GLN:HG3	20	0.21
(1,55)	1:A:601:ARG:HA	1:A:601:ARG:HD3	6	0.21
(1,55)	1:A:601:ARG:HA	1:A:601:ARG:HD3	11	0.21
(1,524)	1:A:624:LYS:H	1:A:624:LYS:HG3	1	0.21
(1,52)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG11	12	0.21
(1,52)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG12	12	0.21
(1,52)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HG13	12	0.21
(1,464)	1:A:633:ALA:H	1:A:636:GLN:HG3	19	0.21
(1,427)	1:A:605:MET:HB3	1:A:606:ARG:H	9	0.21
(1,318)	1:A:632:ILE:H	1:A:632:ILE:HG13	11	0.21
(1,318)	1:A:632:ILE:H	1:A:632:ILE:HG13	19	0.21
(1,318)	1:A:632:ILE:H	1:A:632:ILE:HG13	20	0.21
(1,3)	1:A:592:VAL:HG21	1:A:596:GLY:HA2	13	0.21
(1,3)	1:A:592:VAL:HG22	1:A:596:GLY:HA2	13	0.21
(1,3)	1:A:592:VAL:HG23	1:A:596:GLY:HA2	13	0.21
(1,277)	1:A:588:LEU:HD21	1:A:623:TRP:HB3	18	0.21
(1,277)	1:A:588:LEU:HD22	1:A:623:TRP:HB3	18	0.21
(1,277)	1:A:588:LEU:HD23	1:A:623:TRP:HB3	18	0.21
(1,268)	1:A:629:THR:HG21	1:A:647:LEU:HG	14	0.21
(1,268)	1:A:629:THR:HG22	1:A:647:LEU:HG	14	0.21
(1,268)	1:A:629:THR:HG23	1:A:647:LEU:HG	14	0.21
(1,159)	1:A:644:GLN:HA	1:A:647:LEU:HB3	1	0.21
(1,1192)	1:A:658:SER:H	1:A:659:GLN:HB3	11	0.21
(1,1192)	1:A:658:SER:H	1:A:659:GLN:HB3	19	0.21
(1,119)	1:A:633:ALA:HB1	1:A:634:PRO:HD3	8	0.21
(1,119)	1:A:633:ALA:HB2	1:A:634:PRO:HD3	8	0.21
(1,119)	1:A:633:ALA:HB3	1:A:634:PRO:HD3	8	0.21

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1140)	1:A:642:VAL:HG11	1:A:647:LEU:H	12	0.21
(1,1140)	1:A:642:VAL:HG12	1:A:647:LEU:H	12	0.21
(1,1140)	1:A:642:VAL:HG13	1:A:647:LEU:H	12	0.21
(1,1140)	1:A:642:VAL:HG21	1:A:647:LEU:H	12	0.21
(1,1140)	1:A:642:VAL:HG22	1:A:647:LEU:H	12	0.21
(1,1140)	1:A:642:VAL:HG23	1:A:647:LEU:H	12	0.21
(1,1119)	1:A:634:PRO:HB3	1:A:635:GLN:H	1	0.21
(1,1112)	1:A:632:ILE:HB	1:A:636:GLN:HB3	20	0.21
(1,1099)	1:A:628:HIS:HB3	1:A:630:ALA:H	13	0.21
(1,1008)	1:A:601:ARG:HA	1:A:616:TYR:HB3	8	0.21
(2,9)	1:A:589:VAL:O	1:A:592:VAL:H	8	0.2
(1,966)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:H	6	0.2
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB1	1	0.2
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB2	1	0.2
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB3	1	0.2
(1,928)	1:A:590:GLU:HA	1:A:590:GLU:HG3	3	0.2
(1,928)	1:A:590:GLU:HA	1:A:590:GLU:HG3	4	0.2
(1,928)	1:A:590:GLU:HA	1:A:590:GLU:HG3	10	0.2
(1,881)	1:A:587:ALA:HA	1:A:590:GLU:HB3	3	0.2
(1,797)	1:A:659:GLN:HG3	1:A:660:GLN:H	12	0.2
(1,794)	1:A:659:GLN:H	1:A:659:GLN:HG3	7	0.2
(1,788)	1:A:644:GLN:H	1:A:644:GLN:HG3	4	0.2
(1,583)	1:A:636:GLN:H	1:A:636:GLN:HG3	13	0.2
(1,564)	1:A:616:TYR:H	1:A:616:TYR:HD1	6	0.2
(1,539)	1:A:622:LYS:H	1:A:624:LYS:HB3	2	0.2
(1,44)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HA	19	0.2
(1,318)	1:A:632:ILE:H	1:A:632:ILE:HG13	9	0.2
(1,318)	1:A:632:ILE:H	1:A:632:ILE:HG13	13	0.2
(1,3)	1:A:592:VAL:HG21	1:A:596:GLY:HA2	15	0.2
(1,3)	1:A:592:VAL:HG22	1:A:596:GLY:HA2	15	0.2
(1,3)	1:A:592:VAL:HG23	1:A:596:GLY:HA2	15	0.2
(1,268)	1:A:629:THR:HG21	1:A:647:LEU:HG	1	0.2
(1,268)	1:A:629:THR:HG22	1:A:647:LEU:HG	1	0.2
(1,268)	1:A:629:THR:HG23	1:A:647:LEU:HG	1	0.2
(1,268)	1:A:629:THR:HG21	1:A:647:LEU:HG	8	0.2
(1,268)	1:A:629:THR:HG22	1:A:647:LEU:HG	8	0.2
(1,268)	1:A:629:THR:HG23	1:A:647:LEU:HG	8	0.2
(1,229)	1:A:627:VAL:HG11	1:A:651:LEU:HA	14	0.2
(1,229)	1:A:627:VAL:HG12	1:A:651:LEU:HA	14	0.2
(1,229)	1:A:627:VAL:HG13	1:A:651:LEU:HA	14	0.2
(1,159)	1:A:644:GLN:HA	1:A:647:LEU:HB3	6	0.2
(1,15)	1:A:591:ALA:HB1	1:A:606:ARG:HD3	16	0.2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,15)	1:A:591:ALA:HB2	1:A:606:ARG:HD3	16	0.2
(1,15)	1:A:591:ALA:HB3	1:A:606:ARG:HD3	16	0.2
(1,135)	1:A:653:ALA:HB1	1:A:654:HIS:HB3	4	0.2
(1,135)	1:A:653:ALA:HB2	1:A:654:HIS:HB3	4	0.2
(1,135)	1:A:653:ALA:HB3	1:A:654:HIS:HB3	4	0.2
(1,128)	1:A:655:ALA:HB1	1:A:656:TYR:HB3	13	0.2
(1,128)	1:A:655:ALA:HB2	1:A:656:TYR:HB3	13	0.2
(1,128)	1:A:655:ALA:HB3	1:A:656:TYR:HB3	13	0.2
(1,1196)	1:A:660:GLN:H	1:A:660:GLN:HB3	10	0.2
(1,1170)	1:A:649:ARG:HA	1:A:649:ARG:HG3	1	0.2
(1,1146)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:H	16	0.2
(1,1124)	1:A:638:ARG:HA	1:A:638:ARG:HD3	14	0.2
(1,1119)	1:A:634:PRO:HB3	1:A:635:GLN:H	17	0.2
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD11	1:A:636:GLN:HB3	5	0.2
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD12	1:A:636:GLN:HB3	5	0.2
(1,1114)	1:A:632:ILE:HD13	1:A:636:GLN:HB3	5	0.2
(1,1111)	1:A:631:SER:HB3	1:A:632:ILE:H	9	0.2
(1,1110)	1:A:631:SER:H	1:A:631:SER:HB3	9	0.2
(1,1022)	1:A:606:ARG:H	1:A:606:ARG:HG3	4	0.2
(1,1022)	1:A:606:ARG:H	1:A:606:ARG:HG3	9	0.2
(1,978)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:HG21	8	0.19
(1,978)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:HG22	8	0.19
(1,978)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:HG23	8	0.19
(1,966)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:H	13	0.19
(1,962)	1:A:593:GLU:HA	1:A:593:GLU:HG3	8	0.19
(1,92)	1:A:597:THR:HG21	1:A:623:TRP:HB3	3	0.19
(1,92)	1:A:597:THR:HG22	1:A:623:TRP:HB3	3	0.19
(1,92)	1:A:597:THR:HG23	1:A:623:TRP:HB3	3	0.19
(1,854)	1:A:583:ALA:HA	1:A:586:GLU:HB3	1	0.19
(1,81)	1:A:611:ALA:HA	1:A:612:ASP:HB3	8	0.19
(1,651)	1:A:593:GLU:H	1:A:594:HIS:HB3	12	0.19
(1,55)	1:A:601:ARG:HA	1:A:601:ARG:HD3	5	0.19
(1,536)	1:A:622:LYS:H	1:A:623:TRP:HB3	10	0.19
(1,524)	1:A:624:LYS:H	1:A:624:LYS:HG3	14	0.19
(1,523)	1:A:624:LYS:H	1:A:624:LYS:HB3	5	0.19
(1,277)	1:A:588:LEU:HD21	1:A:623:TRP:HB3	6	0.19
(1,277)	1:A:588:LEU:HD22	1:A:623:TRP:HB3	6	0.19
(1,277)	1:A:588:LEU:HD23	1:A:623:TRP:HB3	6	0.19
(1,268)	1:A:629:THR:HG21	1:A:647:LEU:HG	10	0.19
(1,268)	1:A:629:THR:HG22	1:A:647:LEU:HG	10	0.19
(1,268)	1:A:629:THR:HG23	1:A:647:LEU:HG	10	0.19
(1,229)	1:A:627:VAL:HG11	1:A:651:LEU:HA	8	0.19

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,229)	1:A:627:VAL:HG12	1:A:651:LEU:HA	8	0.19
(1,229)	1:A:627:VAL:HG13	1:A:651:LEU:HA	8	0.19
(1,15)	1:A:591:ALA:HB1	1:A:606:ARG:HD3	1	0.19
(1,15)	1:A:591:ALA:HB2	1:A:606:ARG:HD3	1	0.19
(1,15)	1:A:591:ALA:HB3	1:A:606:ARG:HD3	1	0.19
(1,135)	1:A:653:ALA:HB1	1:A:654:HIS:HB3	5	0.19
(1,135)	1:A:653:ALA:HB2	1:A:654:HIS:HB3	5	0.19
(1,135)	1:A:653:ALA:HB3	1:A:654:HIS:HB3	5	0.19
(1,135)	1:A:653:ALA:HB1	1:A:654:HIS:HB3	20	0.19
(1,135)	1:A:653:ALA:HB2	1:A:654:HIS:HB3	20	0.19
(1,135)	1:A:653:ALA:HB3	1:A:654:HIS:HB3	20	0.19
(1,119)	1:A:633:ALA:HB1	1:A:634:PRO:HD3	3	0.19
(1,119)	1:A:633:ALA:HB2	1:A:634:PRO:HD3	3	0.19
(1,119)	1:A:633:ALA:HB3	1:A:634:PRO:HD3	3	0.19
(1,1167)	1:A:648:ASP:HB3	1:A:650:VAL:H	12	0.19
(1,1130)	1:A:640:GLU:HG3	1:A:641:PRO:HD3	11	0.19
(1,1119)	1:A:634:PRO:HB3	1:A:635:GLN:H	20	0.19
(1,1099)	1:A:628:HIS:HB3	1:A:630:ALA:H	2	0.19
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG11	1:A:632:ILE:H	17	0.19
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG12	1:A:632:ILE:H	17	0.19
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG13	1:A:632:ILE:H	17	0.19
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG21	1:A:632:ILE:H	17	0.19
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG22	1:A:632:ILE:H	17	0.19
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG23	1:A:632:ILE:H	17	0.19
(2,9)	1:A:589:VAL:O	1:A:592:VAL:H	18	0.18
(1,963)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:594:HIS:H	16	0.18
(1,962)	1:A:593:GLU:HA	1:A:593:GLU:HG3	5	0.18
(1,962)	1:A:593:GLU:HA	1:A:593:GLU:HG3	16	0.18
(1,938)	1:A:592:VAL:HA	1:A:595:LEU:HB3	14	0.18
(1,881)	1:A:587:ALA:HA	1:A:590:GLU:HB3	1	0.18
(1,881)	1:A:587:ALA:HA	1:A:590:GLU:HB3	7	0.18
(1,872)	1:A:585:VAL:HG11	1:A:643:PRO:HG3	16	0.18
(1,872)	1:A:585:VAL:HG12	1:A:643:PRO:HG3	16	0.18
(1,872)	1:A:585:VAL:HG13	1:A:643:PRO:HG3	16	0.18
(1,872)	1:A:585:VAL:HG21	1:A:643:PRO:HG3	16	0.18
(1,872)	1:A:585:VAL:HG22	1:A:643:PRO:HG3	16	0.18
(1,872)	1:A:585:VAL:HG23	1:A:643:PRO:HG3	16	0.18
(1,794)	1:A:659:GLN:H	1:A:659:GLN:HG3	18	0.18
(1,788)	1:A:644:GLN:H	1:A:644:GLN:HG3	5	0.18
(1,768)	1:A:644:GLN:HG3	1:A:647:LEU:H	10	0.18
(1,741)	1:A:650:VAL:HB	1:A:651:LEU:H	15	0.18
(1,740)	1:A:651:LEU:H	1:A:654:HIS:HB3	9	0.18

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,589)	1:A:636:GLN:HG3	1:A:637:ARG:H	7	0.18
(1,539)	1:A:622:LYS:H	1:A:624:LYS:HB3	10	0.18
(1,524)	1:A:624:LYS:H	1:A:624:LYS:HG3	4	0.18
(1,515)	1:A:624:LYS:HD3	1:A:625:THR:H	4	0.18
(1,485)	1:A:630:ALA:H	1:A:647:LEU:HG	7	0.18
(1,485)	1:A:630:ALA:H	1:A:647:LEU:HG	16	0.18
(1,455)	1:A:612:ASP:H	1:A:612:ASP:HB3	9	0.18
(1,44)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:585:VAL:HA	5	0.18
(1,318)	1:A:632:ILE:H	1:A:632:ILE:HG13	2	0.18
(1,318)	1:A:632:ILE:H	1:A:632:ILE:HG13	6	0.18
(1,3)	1:A:592:VAL:HG21	1:A:596:GLY:HA2	5	0.18
(1,3)	1:A:592:VAL:HG22	1:A:596:GLY:HA2	5	0.18
(1,3)	1:A:592:VAL:HG23	1:A:596:GLY:HA2	5	0.18
(1,277)	1:A:588:LEU:HD21	1:A:623:TRP:HB3	2	0.18
(1,277)	1:A:588:LEU:HD22	1:A:623:TRP:HB3	2	0.18
(1,277)	1:A:588:LEU:HD23	1:A:623:TRP:HB3	2	0.18
(1,159)	1:A:644:GLN:HA	1:A:647:LEU:HB3	8	0.18
(1,137)	1:A:596:GLY:HA3	1:A:653:ALA:HB1	10	0.18
(1,137)	1:A:596:GLY:HA3	1:A:653:ALA:HB2	10	0.18
(1,137)	1:A:596:GLY:HA3	1:A:653:ALA:HB3	10	0.18
(1,128)	1:A:655:ALA:HB1	1:A:656:TYR:HB3	5	0.18
(1,128)	1:A:655:ALA:HB2	1:A:656:TYR:HB3	5	0.18
(1,128)	1:A:655:ALA:HB3	1:A:656:TYR:HB3	5	0.18
(1,128)	1:A:655:ALA:HB1	1:A:656:TYR:HB3	8	0.18
(1,128)	1:A:655:ALA:HB2	1:A:656:TYR:HB3	8	0.18
(1,128)	1:A:655:ALA:HB3	1:A:656:TYR:HB3	8	0.18
(1,128)	1:A:655:ALA:HB1	1:A:656:TYR:HB3	18	0.18
(1,128)	1:A:655:ALA:HB2	1:A:656:TYR:HB3	18	0.18
(1,128)	1:A:655:ALA:HB3	1:A:656:TYR:HB3	18	0.18
(1,1154)	1:A:647:LEU:H	1:A:648:ASP:HB3	14	0.18
(1,1147)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:HD11	11	0.18
(1,1147)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:HD12	11	0.18
(1,1147)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:HD13	11	0.18
(1,1146)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:H	4	0.18
(1,1129)	1:A:640:GLU:HB3	1:A:641:PRO:HD3	14	0.18
(1,1125)	1:A:638:ARG:HB3	1:A:638:ARG:HG3	12	0.18
(1,1125)	1:A:638:ARG:HB3	1:A:638:ARG:HG3	20	0.18
(1,1119)	1:A:634:PRO:HB3	1:A:635:GLN:H	18	0.18
(1,1099)	1:A:628:HIS:HB3	1:A:630:ALA:H	14	0.18
(1,1009)	1:A:601:ARG:HB3	1:A:601:ARG:HD3	2	0.18
(1,966)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:H	4	0.17
(1,962)	1:A:593:GLU:HA	1:A:593:GLU:HG3	14	0.17

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,962)	1:A:593:GLU:HA	1:A:593:GLU:HG3	15	0.17
(1,961)	1:A:593:GLU:H	1:A:593:GLU:HG3	15	0.17
(1,961)	1:A:593:GLU:H	1:A:593:GLU:HG3	16	0.17
(1,872)	1:A:585:VAL:HG11	1:A:643:PRO:HG3	19	0.17
(1,872)	1:A:585:VAL:HG12	1:A:643:PRO:HG3	19	0.17
(1,872)	1:A:585:VAL:HG13	1:A:643:PRO:HG3	19	0.17
(1,872)	1:A:585:VAL:HG21	1:A:643:PRO:HG3	19	0.17
(1,872)	1:A:585:VAL:HG22	1:A:643:PRO:HG3	19	0.17
(1,872)	1:A:585:VAL:HG23	1:A:643:PRO:HG3	19	0.17
(1,797)	1:A:659:GLN:HG3	1:A:660:GLN:H	10	0.17
(1,722)	1:A:650:VAL:HA	1:A:654:HIS:H	16	0.17
(1,589)	1:A:636:GLN:HG3	1:A:637:ARG:H	3	0.17
(1,583)	1:A:636:GLN:H	1:A:636:GLN:HG3	4	0.17
(1,523)	1:A:624:LYS:H	1:A:624:LYS:HB3	18	0.17
(1,515)	1:A:624:LYS:HD3	1:A:625:THR:H	20	0.17
(1,504)	1:A:627:VAL:H	1:A:650:VAL:HB	17	0.17
(1,427)	1:A:605:MET:HB3	1:A:606:ARG:H	2	0.17
(1,393)	1:A:591:ALA:H	1:A:606:ARG:HD3	6	0.17
(1,358)	1:A:586:GLU:HG3	1:A:646:LEU:HD21	12	0.17
(1,358)	1:A:586:GLU:HG3	1:A:646:LEU:HD22	12	0.17
(1,358)	1:A:586:GLU:HG3	1:A:646:LEU:HD23	12	0.17
(1,318)	1:A:632:ILE:H	1:A:632:ILE:HG13	4	0.17
(1,3)	1:A:592:VAL:HG21	1:A:596:GLY:HA2	7	0.17
(1,3)	1:A:592:VAL:HG22	1:A:596:GLY:HA2	7	0.17
(1,3)	1:A:592:VAL:HG23	1:A:596:GLY:HA2	7	0.17
(1,268)	1:A:629:THR:HG21	1:A:647:LEU:HG	11	0.17
(1,268)	1:A:629:THR:HG22	1:A:647:LEU:HG	11	0.17
(1,268)	1:A:629:THR:HG23	1:A:647:LEU:HG	11	0.17
(1,229)	1:A:627:VAL:HG11	1:A:651:LEU:HA	10	0.17
(1,229)	1:A:627:VAL:HG12	1:A:651:LEU:HA	10	0.17
(1,229)	1:A:627:VAL:HG13	1:A:651:LEU:HA	10	0.17
(1,159)	1:A:644:GLN:HA	1:A:647:LEU:HB3	2	0.17
(1,159)	1:A:644:GLN:HA	1:A:647:LEU:HB3	17	0.17
(1,128)	1:A:655:ALA:HB1	1:A:656:TYR:HB3	7	0.17
(1,128)	1:A:655:ALA:HB2	1:A:656:TYR:HB3	7	0.17
(1,128)	1:A:655:ALA:HB3	1:A:656:TYR:HB3	7	0.17
(1,128)	1:A:655:ALA:HB1	1:A:656:TYR:HB3	11	0.17
(1,128)	1:A:655:ALA:HB2	1:A:656:TYR:HB3	11	0.17
(1,128)	1:A:655:ALA:HB3	1:A:656:TYR:HB3	11	0.17
(1,128)	1:A:655:ALA:HB1	1:A:656:TYR:HB3	20	0.17
(1,128)	1:A:655:ALA:HB2	1:A:656:TYR:HB3	20	0.17
(1,128)	1:A:655:ALA:HB3	1:A:656:TYR:HB3	20	0.17

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1192)	1:A:658:SER:H	1:A:659:GLN:HB3	14	0.17
(1,1154)	1:A:647:LEU:H	1:A:648:ASP:HB3	6	0.17
(1,1154)	1:A:647:LEU:H	1:A:648:ASP:HB3	16	0.17
(1,1147)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:HD11	6	0.17
(1,1147)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:HD12	6	0.17
(1,1147)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:HD13	6	0.17
(1,1146)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:H	20	0.17
(1,1099)	1:A:628:HIS:HB3	1:A:630:ALA:H	10	0.17
(1,1043)	1:A:619:LEU:HA	1:A:622:LYS:HB3	2	0.17
(1,1036)	1:A:616:TYR:HA	1:A:619:LEU:HB3	16	0.17
(1,1019)	1:A:604:LYS:HB3	1:A:606:ARG:H	1	0.17
(2,45)	1:A:647:LEU:O	1:A:651:LEU:H	12	0.16
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB1	2	0.16
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB2	2	0.16
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB3	2	0.16
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB1	3	0.16
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB2	3	0.16
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB3	3	0.16
(1,962)	1:A:593:GLU:HA	1:A:593:GLU:HG3	2	0.16
(1,962)	1:A:593:GLU:HA	1:A:593:GLU:HG3	18	0.16
(1,938)	1:A:592:VAL:HA	1:A:595:LEU:HB3	8	0.16
(1,938)	1:A:592:VAL:HA	1:A:595:LEU:HB3	17	0.16
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB1	3	0.16
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB2	3	0.16
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB3	3	0.16
(1,928)	1:A:590:GLU:HA	1:A:590:GLU:HG3	7	0.16
(1,853)	1:A:583:ALA:H	1:A:584:GLU:HG3	20	0.16
(1,762)	1:A:648:ASP:H	1:A:648:ASP:HB3	12	0.16
(1,741)	1:A:650:VAL:HB	1:A:651:LEU:H	7	0.16
(1,735)	1:A:652:ALA:H	1:A:654:HIS:HB3	3	0.16
(1,589)	1:A:636:GLN:HG3	1:A:637:ARG:H	12	0.16
(1,536)	1:A:622:LYS:H	1:A:623:TRP:HB3	1	0.16
(1,523)	1:A:624:LYS:H	1:A:624:LYS:HB3	3	0.16
(1,523)	1:A:624:LYS:H	1:A:624:LYS:HB3	19	0.16
(1,504)	1:A:627:VAL:H	1:A:650:VAL:HB	19	0.16
(1,485)	1:A:630:ALA:H	1:A:647:LEU:HG	15	0.16
(1,3)	1:A:592:VAL:HG21	1:A:596:GLY:HA2	1	0.16
(1,3)	1:A:592:VAL:HG22	1:A:596:GLY:HA2	1	0.16
(1,3)	1:A:592:VAL:HG23	1:A:596:GLY:HA2	1	0.16
(1,3)	1:A:592:VAL:HG21	1:A:596:GLY:HA2	9	0.16
(1,3)	1:A:592:VAL:HG22	1:A:596:GLY:HA2	9	0.16
(1,3)	1:A:592:VAL:HG23	1:A:596:GLY:HA2	9	0.16

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,277)	1:A:588:LEU:HD21	1:A:623:TRP:HB3	4	0.16
(1,277)	1:A:588:LEU:HD22	1:A:623:TRP:HB3	4	0.16
(1,277)	1:A:588:LEU:HD23	1:A:623:TRP:HB3	4	0.16
(1,268)	1:A:629:THR:HG21	1:A:647:LEU:HG	2	0.16
(1,268)	1:A:629:THR:HG22	1:A:647:LEU:HG	2	0.16
(1,268)	1:A:629:THR:HG23	1:A:647:LEU:HG	2	0.16
(1,15)	1:A:591:ALA:HB1	1:A:606:ARG:HD3	15	0.16
(1,15)	1:A:591:ALA:HB2	1:A:606:ARG:HD3	15	0.16
(1,15)	1:A:591:ALA:HB3	1:A:606:ARG:HD3	15	0.16
(1,130)	1:A:623:TRP:HD1	1:A:654:HIS:HB3	20	0.16
(1,128)	1:A:655:ALA:HB1	1:A:656:TYR:HB3	3	0.16
(1,128)	1:A:655:ALA:HB2	1:A:656:TYR:HB3	3	0.16
(1,128)	1:A:655:ALA:HB3	1:A:656:TYR:HB3	3	0.16
(1,128)	1:A:655:ALA:HB1	1:A:656:TYR:HB3	4	0.16
(1,128)	1:A:655:ALA:HB2	1:A:656:TYR:HB3	4	0.16
(1,128)	1:A:655:ALA:HB3	1:A:656:TYR:HB3	4	0.16
(1,128)	1:A:655:ALA:HB1	1:A:656:TYR:HB3	10	0.16
(1,128)	1:A:655:ALA:HB2	1:A:656:TYR:HB3	10	0.16
(1,128)	1:A:655:ALA:HB3	1:A:656:TYR:HB3	10	0.16
(1,128)	1:A:655:ALA:HB1	1:A:656:TYR:HB3	14	0.16
(1,128)	1:A:655:ALA:HB2	1:A:656:TYR:HB3	14	0.16
(1,128)	1:A:655:ALA:HB3	1:A:656:TYR:HB3	14	0.16
(1,1192)	1:A:658:SER:H	1:A:659:GLN:HB3	7	0.16
(1,119)	1:A:633:ALA:HB1	1:A:634:PRO:HD3	18	0.16
(1,119)	1:A:633:ALA:HB2	1:A:634:PRO:HD3	18	0.16
(1,119)	1:A:633:ALA:HB3	1:A:634:PRO:HD3	18	0.16
(1,1170)	1:A:649:ARG:HA	1:A:649:ARG:HG3	11	0.16
(1,1170)	1:A:649:ARG:HA	1:A:649:ARG:HG3	16	0.16
(1,1170)	1:A:649:ARG:HA	1:A:649:ARG:HG3	17	0.16
(1,1145)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:645:ASP:HB3	17	0.16
(1,1125)	1:A:638:ARG:HB3	1:A:638:ARG:HG3	16	0.16
(1,1118)	1:A:633:ALA:HB1	1:A:635:GLN:HG3	18	0.16
(1,1118)	1:A:633:ALA:HB2	1:A:635:GLN:HG3	18	0.16
(1,1118)	1:A:633:ALA:HB3	1:A:635:GLN:HG3	18	0.16
(1,1099)	1:A:628:HIS:HB3	1:A:630:ALA:H	1	0.16
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG11	1:A:632:ILE:H	13	0.16
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG12	1:A:632:ILE:H	13	0.16
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG13	1:A:632:ILE:H	13	0.16
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG21	1:A:632:ILE:H	13	0.16
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG22	1:A:632:ILE:H	13	0.16
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG23	1:A:632:ILE:H	13	0.16
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG11	1:A:632:ILE:H	19	0.16

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG12	1:A:632:ILE:H	19	0.16
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG13	1:A:632:ILE:H	19	0.16
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG21	1:A:632:ILE:H	19	0.16
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG22	1:A:632:ILE:H	19	0.16
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG23	1:A:632:ILE:H	19	0.16
(1,1038)	1:A:617:VAL:HG21	1:A:621:ASP:HB3	8	0.16
(1,1038)	1:A:617:VAL:HG22	1:A:621:ASP:HB3	8	0.16
(1,1038)	1:A:617:VAL:HG23	1:A:621:ASP:HB3	8	0.16
(2,9)	1:A:589:VAL:O	1:A:592:VAL:H	12	0.15
(2,9)	1:A:589:VAL:O	1:A:592:VAL:H	15	0.15
(1,977)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:HA	17	0.15
(1,962)	1:A:593:GLU:HA	1:A:593:GLU:HG3	9	0.15
(1,962)	1:A:593:GLU:HA	1:A:593:GLU:HG3	17	0.15
(1,932)	1:A:590:GLU:HG3	1:A:591:ALA:H	12	0.15
(1,92)	1:A:597:THR:HG21	1:A:623:TRP:HB3	18	0.15
(1,92)	1:A:597:THR:HG22	1:A:623:TRP:HB3	18	0.15
(1,92)	1:A:597:THR:HG23	1:A:623:TRP:HB3	18	0.15
(1,842)	1:A:581:SER:HB3	1:A:583:ALA:H	20	0.15
(1,735)	1:A:652:ALA:H	1:A:654:HIS:HB3	2	0.15
(1,735)	1:A:652:ALA:H	1:A:654:HIS:HB3	7	0.15
(1,722)	1:A:650:VAL:HA	1:A:654:HIS:H	10	0.15
(1,583)	1:A:636:GLN:H	1:A:636:GLN:HG3	1	0.15
(1,545)	1:A:656:TYR:H	1:A:656:TYR:HD1	7	0.15
(1,524)	1:A:624:LYS:H	1:A:624:LYS:HG3	20	0.15
(1,3)	1:A:592:VAL:HG21	1:A:596:GLY:HA2	3	0.15
(1,3)	1:A:592:VAL:HG22	1:A:596:GLY:HA2	3	0.15
(1,3)	1:A:592:VAL:HG23	1:A:596:GLY:HA2	3	0.15
(1,3)	1:A:592:VAL:HG21	1:A:596:GLY:HA2	17	0.15
(1,3)	1:A:592:VAL:HG22	1:A:596:GLY:HA2	17	0.15
(1,3)	1:A:592:VAL:HG23	1:A:596:GLY:HA2	17	0.15
(1,263)	1:A:624:LYS:HB3	1:A:625:THR:HG21	12	0.15
(1,263)	1:A:624:LYS:HB3	1:A:625:THR:HG22	12	0.15
(1,263)	1:A:624:LYS:HB3	1:A:625:THR:HG23	12	0.15
(1,229)	1:A:627:VAL:HG11	1:A:651:LEU:HA	1	0.15
(1,229)	1:A:627:VAL:HG12	1:A:651:LEU:HA	1	0.15
(1,229)	1:A:627:VAL:HG13	1:A:651:LEU:HA	1	0.15
(1,15)	1:A:591:ALA:HB1	1:A:606:ARG:HD3	9	0.15
(1,15)	1:A:591:ALA:HB2	1:A:606:ARG:HD3	9	0.15
(1,15)	1:A:591:ALA:HB3	1:A:606:ARG:HD3	9	0.15
(1,130)	1:A:623:TRP:HD1	1:A:654:HIS:HB3	7	0.15
(1,128)	1:A:655:ALA:HB1	1:A:656:TYR:HB3	2	0.15
(1,128)	1:A:655:ALA:HB2	1:A:656:TYR:HB3	2	0.15

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,128)	1:A:655:ALA:HB3	1:A:656:TYR:HB3	2	0.15
(1,128)	1:A:655:ALA:HB1	1:A:656:TYR:HB3	9	0.15
(1,128)	1:A:655:ALA:HB2	1:A:656:TYR:HB3	9	0.15
(1,128)	1:A:655:ALA:HB3	1:A:656:TYR:HB3	9	0.15
(1,1197)	1:A:667:GLU:H	1:A:667:GLU:HB3	12	0.15
(1,1192)	1:A:658:SER:H	1:A:659:GLN:HB3	9	0.15
(1,119)	1:A:633:ALA:HB1	1:A:634:PRO:HD3	20	0.15
(1,119)	1:A:633:ALA:HB2	1:A:634:PRO:HD3	20	0.15
(1,119)	1:A:633:ALA:HB3	1:A:634:PRO:HD3	20	0.15
(1,1154)	1:A:647:LEU:H	1:A:648:ASP:HB3	5	0.15
(1,113)	1:A:630:ALA:HB1	1:A:651:LEU:HD11	18	0.15
(1,113)	1:A:630:ALA:HB1	1:A:651:LEU:HD12	18	0.15
(1,113)	1:A:630:ALA:HB1	1:A:651:LEU:HD13	18	0.15
(1,113)	1:A:630:ALA:HB2	1:A:651:LEU:HD11	18	0.15
(1,113)	1:A:630:ALA:HB2	1:A:651:LEU:HD12	18	0.15
(1,113)	1:A:630:ALA:HB2	1:A:651:LEU:HD13	18	0.15
(1,113)	1:A:630:ALA:HB3	1:A:651:LEU:HD11	18	0.15
(1,113)	1:A:630:ALA:HB3	1:A:651:LEU:HD12	18	0.15
(1,113)	1:A:630:ALA:HB3	1:A:651:LEU:HD13	18	0.15
(1,1129)	1:A:640:GLU:HB3	1:A:641:PRO:HD3	20	0.15
(1,1127)	1:A:640:GLU:H	1:A:640:GLU:HB3	17	0.15
(1,1127)	1:A:640:GLU:H	1:A:640:GLU:HB3	18	0.15
(1,1125)	1:A:638:ARG:HB3	1:A:638:ARG:HG3	11	0.15
(1,1119)	1:A:634:PRO:HB3	1:A:635:GLN:H	5	0.15
(1,1119)	1:A:634:PRO:HB3	1:A:635:GLN:H	16	0.15
(1,1089)	1:A:627:VAL:HG11	1:A:632:ILE:HG13	20	0.15
(1,1089)	1:A:627:VAL:HG12	1:A:632:ILE:HG13	20	0.15
(1,1089)	1:A:627:VAL:HG13	1:A:632:ILE:HG13	20	0.15
(1,1089)	1:A:627:VAL:HG21	1:A:632:ILE:HG13	20	0.15
(1,1089)	1:A:627:VAL:HG22	1:A:632:ILE:HG13	20	0.15
(1,1089)	1:A:627:VAL:HG23	1:A:632:ILE:HG13	20	0.15
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG11	1:A:632:ILE:H	2	0.15
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG12	1:A:632:ILE:H	2	0.15
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG13	1:A:632:ILE:H	2	0.15
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG21	1:A:632:ILE:H	2	0.15
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG22	1:A:632:ILE:H	2	0.15
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG23	1:A:632:ILE:H	2	0.15
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG11	1:A:632:ILE:H	4	0.15
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG12	1:A:632:ILE:H	4	0.15
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG13	1:A:632:ILE:H	4	0.15
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG21	1:A:632:ILE:H	4	0.15
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG22	1:A:632:ILE:H	4	0.15

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG23	1:A:632:ILE:H	4	0.15
(1,1033)	1:A:610:ASN:H	1:A:610:ASN:HB3	20	0.15
(1,1019)	1:A:604:LYS:HB3	1:A:606:ARG:H	8	0.15
(1,1013)	1:A:604:LYS:H	1:A:604:LYS:HB3	11	0.15
(1,1004)	1:A:600:TRP:HB3	1:A:616:TYR:HB3	4	0.15
(1,1001)	1:A:600:TRP:HA	1:A:616:TYR:HB3	9	0.15
(2,9)	1:A:589:VAL:O	1:A:592:VAL:H	20	0.14
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB1	10	0.14
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB2	10	0.14
(1,967)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:653:ALA:HB3	10	0.14
(1,963)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:594:HIS:H	9	0.14
(1,963)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:594:HIS:H	15	0.14
(1,963)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:594:HIS:H	17	0.14
(1,963)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:594:HIS:H	19	0.14
(1,938)	1:A:592:VAL:HA	1:A:595:LEU:HB3	2	0.14
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB1	13	0.14
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB2	13	0.14
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB3	13	0.14
(1,881)	1:A:587:ALA:HA	1:A:590:GLU:HB3	13	0.14
(1,66)	1:A:602:ASP:HA	1:A:605:MET:HB3	6	0.14
(1,66)	1:A:602:ASP:HA	1:A:605:MET:HB3	20	0.14
(1,583)	1:A:636:GLN:H	1:A:636:GLN:HG3	2	0.14
(1,539)	1:A:622:LYS:H	1:A:624:LYS:HB3	6	0.14
(1,523)	1:A:624:LYS:H	1:A:624:LYS:HB3	6	0.14
(1,523)	1:A:624:LYS:H	1:A:624:LYS:HB3	9	0.14
(1,523)	1:A:624:LYS:H	1:A:624:LYS:HB3	10	0.14
(1,485)	1:A:630:ALA:H	1:A:647:LEU:HG	20	0.14
(1,468)	1:A:630:ALA:H	1:A:632:ILE:H	5	0.14
(1,37)	1:A:586:GLU:HA	1:A:586:GLU:HG3	4	0.14
(1,357)	1:A:640:GLU:HA	1:A:640:GLU:HG3	13	0.14
(1,320)	1:A:632:ILE:HG21	1:A:636:GLN:HG3	6	0.14
(1,320)	1:A:632:ILE:HG22	1:A:636:GLN:HG3	6	0.14
(1,320)	1:A:632:ILE:HG23	1:A:636:GLN:HG3	6	0.14
(1,320)	1:A:632:ILE:HG21	1:A:636:GLN:HG3	8	0.14
(1,320)	1:A:632:ILE:HG22	1:A:636:GLN:HG3	8	0.14
(1,320)	1:A:632:ILE:HG23	1:A:636:GLN:HG3	8	0.14
(1,268)	1:A:629:THR:HG21	1:A:647:LEU:HG	16	0.14
(1,268)	1:A:629:THR:HG22	1:A:647:LEU:HG	16	0.14
(1,268)	1:A:629:THR:HG23	1:A:647:LEU:HG	16	0.14
(1,230)	1:A:627:VAL:HG11	1:A:654:HIS:HA	17	0.14
(1,230)	1:A:627:VAL:HG12	1:A:654:HIS:HA	17	0.14
(1,230)	1:A:627:VAL:HG13	1:A:654:HIS:HA	17	0.14

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,228)	1:A:627:VAL:HG11	1:A:654:HIS:HB3	15	0.14
(1,228)	1:A:627:VAL:HG12	1:A:654:HIS:HB3	15	0.14
(1,228)	1:A:627:VAL:HG13	1:A:654:HIS:HB3	15	0.14
(1,159)	1:A:644:GLN:HA	1:A:647:LEU:HB3	5	0.14
(1,135)	1:A:653:ALA:HB1	1:A:654:HIS:HB3	11	0.14
(1,135)	1:A:653:ALA:HB2	1:A:654:HIS:HB3	11	0.14
(1,135)	1:A:653:ALA:HB3	1:A:654:HIS:HB3	11	0.14
(1,128)	1:A:655:ALA:HB1	1:A:656:TYR:HB3	15	0.14
(1,128)	1:A:655:ALA:HB2	1:A:656:TYR:HB3	15	0.14
(1,128)	1:A:655:ALA:HB3	1:A:656:TYR:HB3	15	0.14
(1,128)	1:A:655:ALA:HB1	1:A:656:TYR:HB3	19	0.14
(1,128)	1:A:655:ALA:HB2	1:A:656:TYR:HB3	19	0.14
(1,128)	1:A:655:ALA:HB3	1:A:656:TYR:HB3	19	0.14
(1,1196)	1:A:660:GLN:H	1:A:660:GLN:HB3	3	0.14
(1,1192)	1:A:658:SER:H	1:A:659:GLN:HB3	8	0.14
(1,1192)	1:A:658:SER:H	1:A:659:GLN:HB3	18	0.14
(1,119)	1:A:633:ALA:HB1	1:A:634:PRO:HD3	10	0.14
(1,119)	1:A:633:ALA:HB2	1:A:634:PRO:HD3	10	0.14
(1,119)	1:A:633:ALA:HB3	1:A:634:PRO:HD3	10	0.14
(1,1170)	1:A:649:ARG:HA	1:A:649:ARG:HG3	19	0.14
(1,1147)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:HD11	18	0.14
(1,1147)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:HD12	18	0.14
(1,1147)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:HD13	18	0.14
(1,1146)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:H	5	0.14
(1,1146)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:H	8	0.14
(1,1127)	1:A:640:GLU:H	1:A:640:GLU:HB3	5	0.14
(1,1127)	1:A:640:GLU:H	1:A:640:GLU:HB3	8	0.14
(1,1124)	1:A:638:ARG:HA	1:A:638:ARG:HD3	10	0.14
(1,1123)	1:A:638:ARG:H	1:A:638:ARG:HG3	5	0.14
(1,112)	1:A:630:ALA:HB1	1:A:650:VAL:HB	8	0.14
(1,112)	1:A:630:ALA:HB2	1:A:650:VAL:HB	8	0.14
(1,112)	1:A:630:ALA:HB3	1:A:650:VAL:HB	8	0.14
(1,1112)	1:A:632:ILE:HB	1:A:636:GLN:HB3	12	0.14
(1,1112)	1:A:632:ILE:HB	1:A:636:GLN:HB3	17	0.14
(1,1038)	1:A:617:VAL:HG21	1:A:621:ASP:HB3	9	0.14
(1,1038)	1:A:617:VAL:HG22	1:A:621:ASP:HB3	9	0.14
(1,1038)	1:A:617:VAL:HG23	1:A:621:ASP:HB3	9	0.14
(1,1020)	1:A:604:LYS:HB3	1:A:619:LEU:HD11	11	0.14
(1,1020)	1:A:604:LYS:HB3	1:A:619:LEU:HD12	11	0.14
(1,1020)	1:A:604:LYS:HB3	1:A:619:LEU:HD13	11	0.14
(1,1020)	1:A:604:LYS:HB3	1:A:619:LEU:HD21	11	0.14
(1,1020)	1:A:604:LYS:HB3	1:A:619:LEU:HD22	11	0.14

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1020)	1:A:604:LYS:HB3	1:A:619:LEU:HD23	11	0.14
(1,1010)	1:A:603:VAL:HA	1:A:606:ARG:HG3	3	0.14
(1,1009)	1:A:601:ARG:HB3	1:A:601:ARG:HD3	18	0.14
(1,1004)	1:A:600:TRP:HB3	1:A:616:TYR:HB3	2	0.14
(1,1001)	1:A:600:TRP:HA	1:A:616:TYR:HB3	19	0.14
(2,9)	1:A:589:VAL:O	1:A:592:VAL:H	16	0.13
(1,963)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:594:HIS:H	5	0.13
(1,961)	1:A:593:GLU:H	1:A:593:GLU:HG3	2	0.13
(1,887)	1:A:588:LEU:HB3	1:A:592:VAL:HG11	10	0.13
(1,887)	1:A:588:LEU:HB3	1:A:592:VAL:HG12	10	0.13
(1,887)	1:A:588:LEU:HB3	1:A:592:VAL:HG13	10	0.13
(1,887)	1:A:588:LEU:HB3	1:A:592:VAL:HG21	10	0.13
(1,887)	1:A:588:LEU:HB3	1:A:592:VAL:HG22	10	0.13
(1,887)	1:A:588:LEU:HB3	1:A:592:VAL:HG23	10	0.13
(1,881)	1:A:587:ALA:HA	1:A:590:GLU:HB3	4	0.13
(1,820)	1:A:596:GLY:H	1:A:657:TRP:HE1	10	0.13
(1,820)	1:A:596:GLY:H	1:A:657:TRP:HE1	15	0.13
(1,768)	1:A:644:GLN:HG3	1:A:647:LEU:H	11	0.13
(1,735)	1:A:652:ALA:H	1:A:654:HIS:HB3	4	0.13
(1,545)	1:A:656:TYR:H	1:A:656:TYR:HD1	4	0.13
(1,545)	1:A:656:TYR:H	1:A:656:TYR:HD1	9	0.13
(1,545)	1:A:656:TYR:H	1:A:656:TYR:HD1	12	0.13
(1,545)	1:A:656:TYR:H	1:A:656:TYR:HD1	16	0.13
(1,545)	1:A:656:TYR:H	1:A:656:TYR:HD1	18	0.13
(1,524)	1:A:624:LYS:H	1:A:624:LYS:HG3	11	0.13
(1,524)	1:A:624:LYS:H	1:A:624:LYS:HG3	16	0.13
(1,485)	1:A:630:ALA:H	1:A:647:LEU:HG	6	0.13
(1,468)	1:A:630:ALA:H	1:A:632:ILE:H	8	0.13
(1,464)	1:A:633:ALA:H	1:A:636:GLN:HG3	1	0.13
(1,37)	1:A:586:GLU:HA	1:A:586:GLU:HG3	8	0.13
(1,320)	1:A:632:ILE:HG21	1:A:636:GLN:HG3	5	0.13
(1,320)	1:A:632:ILE:HG22	1:A:636:GLN:HG3	5	0.13
(1,320)	1:A:632:ILE:HG23	1:A:636:GLN:HG3	5	0.13
(1,320)	1:A:632:ILE:HG21	1:A:636:GLN:HG3	14	0.13
(1,320)	1:A:632:ILE:HG22	1:A:636:GLN:HG3	14	0.13
(1,320)	1:A:632:ILE:HG23	1:A:636:GLN:HG3	14	0.13
(1,3)	1:A:592:VAL:HG21	1:A:596:GLY:HA2	20	0.13
(1,3)	1:A:592:VAL:HG22	1:A:596:GLY:HA2	20	0.13
(1,3)	1:A:592:VAL:HG23	1:A:596:GLY:HA2	20	0.13
(1,277)	1:A:588:LEU:HD21	1:A:623:TRP:HB3	8	0.13
(1,277)	1:A:588:LEU:HD22	1:A:623:TRP:HB3	8	0.13
(1,277)	1:A:588:LEU:HD23	1:A:623:TRP:HB3	8	0.13

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,268)	1:A:629:THR:HG21	1:A:647:LEU:HG	3	0.13
(1,268)	1:A:629:THR:HG22	1:A:647:LEU:HG	3	0.13
(1,268)	1:A:629:THR:HG23	1:A:647:LEU:HG	3	0.13
(1,268)	1:A:629:THR:HG21	1:A:647:LEU:HG	5	0.13
(1,268)	1:A:629:THR:HG22	1:A:647:LEU:HG	5	0.13
(1,268)	1:A:629:THR:HG23	1:A:647:LEU:HG	5	0.13
(1,268)	1:A:629:THR:HG21	1:A:647:LEU:HG	6	0.13
(1,268)	1:A:629:THR:HG22	1:A:647:LEU:HG	6	0.13
(1,268)	1:A:629:THR:HG23	1:A:647:LEU:HG	6	0.13
(1,268)	1:A:629:THR:HG21	1:A:647:LEU:HG	9	0.13
(1,268)	1:A:629:THR:HG22	1:A:647:LEU:HG	9	0.13
(1,268)	1:A:629:THR:HG23	1:A:647:LEU:HG	9	0.13
(1,159)	1:A:644:GLN:HA	1:A:647:LEU:HB3	15	0.13
(1,135)	1:A:653:ALA:HB1	1:A:654:HIS:HB3	3	0.13
(1,135)	1:A:653:ALA:HB2	1:A:654:HIS:HB3	3	0.13
(1,135)	1:A:653:ALA:HB3	1:A:654:HIS:HB3	3	0.13
(1,135)	1:A:653:ALA:HB1	1:A:654:HIS:HB3	7	0.13
(1,135)	1:A:653:ALA:HB2	1:A:654:HIS:HB3	7	0.13
(1,135)	1:A:653:ALA:HB3	1:A:654:HIS:HB3	7	0.13
(1,135)	1:A:653:ALA:HB1	1:A:654:HIS:HB3	13	0.13
(1,135)	1:A:653:ALA:HB2	1:A:654:HIS:HB3	13	0.13
(1,135)	1:A:653:ALA:HB3	1:A:654:HIS:HB3	13	0.13
(1,135)	1:A:653:ALA:HB1	1:A:654:HIS:HB3	15	0.13
(1,135)	1:A:653:ALA:HB2	1:A:654:HIS:HB3	15	0.13
(1,135)	1:A:653:ALA:HB3	1:A:654:HIS:HB3	15	0.13
(1,119)	1:A:633:ALA:HB1	1:A:634:PRO:HD3	16	0.13
(1,119)	1:A:633:ALA:HB2	1:A:634:PRO:HD3	16	0.13
(1,119)	1:A:633:ALA:HB3	1:A:634:PRO:HD3	16	0.13
(1,1170)	1:A:649:ARG:HA	1:A:649:ARG:HG3	3	0.13
(1,1170)	1:A:649:ARG:HA	1:A:649:ARG:HG3	4	0.13
(1,1170)	1:A:649:ARG:HA	1:A:649:ARG:HG3	6	0.13
(1,1170)	1:A:649:ARG:HA	1:A:649:ARG:HG3	10	0.13
(1,1168)	1:A:649:ARG:H	1:A:649:ARG:HG3	20	0.13
(1,1154)	1:A:647:LEU:H	1:A:648:ASP:HB3	17	0.13
(1,1151)	1:A:646:LEU:H	1:A:647:LEU:HD11	19	0.13
(1,1151)	1:A:646:LEU:H	1:A:647:LEU:HD12	19	0.13
(1,1151)	1:A:646:LEU:H	1:A:647:LEU:HD13	19	0.13
(1,1151)	1:A:646:LEU:H	1:A:647:LEU:HD21	19	0.13
(1,1151)	1:A:646:LEU:H	1:A:647:LEU:HD22	19	0.13
(1,1151)	1:A:646:LEU:H	1:A:647:LEU:HD23	19	0.13
(1,1146)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:646:LEU:H	15	0.13
(1,1127)	1:A:640:GLU:H	1:A:640:GLU:HB3	3	0.13

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1125)	1:A:638:ARG:HB3	1:A:638:ARG:HG3	3	0.13
(1,1119)	1:A:634:PRO:HB3	1:A:635:GLN:H	2	0.13
(1,1119)	1:A:634:PRO:HB3	1:A:635:GLN:H	7	0.13
(1,1111)	1:A:631:SER:HB3	1:A:632:ILE:H	2	0.13
(1,1111)	1:A:631:SER:HB3	1:A:632:ILE:H	5	0.13
(1,1111)	1:A:631:SER:HB3	1:A:632:ILE:H	8	0.13
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG11	1:A:632:ILE:H	3	0.13
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG12	1:A:632:ILE:H	3	0.13
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG13	1:A:632:ILE:H	3	0.13
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG21	1:A:632:ILE:H	3	0.13
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG22	1:A:632:ILE:H	3	0.13
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG23	1:A:632:ILE:H	3	0.13
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG11	1:A:632:ILE:H	6	0.13
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG12	1:A:632:ILE:H	6	0.13
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG13	1:A:632:ILE:H	6	0.13
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG21	1:A:632:ILE:H	6	0.13
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG22	1:A:632:ILE:H	6	0.13
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG23	1:A:632:ILE:H	6	0.13
(1,1009)	1:A:601:ARG:HB3	1:A:601:ARG:HD3	6	0.13
(1,1003)	1:A:600:TRP:HB3	1:A:616:TYR:HA	13	0.13
(1,100)	1:A:626:LEU:HA	1:A:629:THR:HA	15	0.13
(2,9)	1:A:589:VAL:O	1:A:592:VAL:H	9	0.12
(2,9)	1:A:589:VAL:O	1:A:592:VAL:H	19	0.12
(2,39)	1:A:626:LEU:O	1:A:630:ALA:H	1	0.12
(2,11)	1:A:590:GLU:O	1:A:594:HIS:H	10	0.12
(1,978)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:HG21	13	0.12
(1,978)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:HG22	13	0.12
(1,978)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:HG23	13	0.12
(1,978)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:HG21	17	0.12
(1,978)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:HG22	17	0.12
(1,978)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:HG23	17	0.12
(1,964)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:650:VAL:H	10	0.12
(1,964)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:650:VAL:H	17	0.12
(1,953)	1:A:592:VAL:HG11	1:A:623:TRP:HB3	13	0.12
(1,953)	1:A:592:VAL:HG12	1:A:623:TRP:HB3	13	0.12
(1,953)	1:A:592:VAL:HG13	1:A:623:TRP:HB3	13	0.12
(1,953)	1:A:592:VAL:HG21	1:A:623:TRP:HB3	13	0.12
(1,953)	1:A:592:VAL:HG22	1:A:623:TRP:HB3	13	0.12
(1,953)	1:A:592:VAL:HG23	1:A:623:TRP:HB3	13	0.12
(1,94)	1:A:624:LYS:HA	1:A:624:LYS:HD3	8	0.12
(1,931)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:594:HIS:H	9	0.12
(1,931)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:594:HIS:H	16	0.12

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,928)	1:A:590:GLU:HA	1:A:590:GLU:HG3	12	0.12
(1,794)	1:A:659:GLN:H	1:A:659:GLN:HG3	4	0.12
(1,614)	1:A:580:PHE:HB3	1:A:586:GLU:H	18	0.12
(1,589)	1:A:636:GLN:HG3	1:A:637:ARG:H	20	0.12
(1,545)	1:A:656:TYR:H	1:A:656:TYR:HD1	2	0.12
(1,468)	1:A:630:ALA:H	1:A:632:ILE:H	1	0.12
(1,455)	1:A:612:ASP:H	1:A:612:ASP:HB3	17	0.12
(1,357)	1:A:640:GLU:HA	1:A:640:GLU:HG3	1	0.12
(1,320)	1:A:632:ILE:HG21	1:A:636:GLN:HG3	20	0.12
(1,320)	1:A:632:ILE:HG22	1:A:636:GLN:HG3	20	0.12
(1,320)	1:A:632:ILE:HG23	1:A:636:GLN:HG3	20	0.12
(1,277)	1:A:588:LEU:HD21	1:A:623:TRP:HB3	20	0.12
(1,277)	1:A:588:LEU:HD22	1:A:623:TRP:HB3	20	0.12
(1,277)	1:A:588:LEU:HD23	1:A:623:TRP:HB3	20	0.12
(1,230)	1:A:627:VAL:HG11	1:A:654:HIS:HA	16	0.12
(1,230)	1:A:627:VAL:HG12	1:A:654:HIS:HA	16	0.12
(1,230)	1:A:627:VAL:HG13	1:A:654:HIS:HA	16	0.12
(1,15)	1:A:591:ALA:HB1	1:A:606:ARG:HD3	8	0.12
(1,15)	1:A:591:ALA:HB2	1:A:606:ARG:HD3	8	0.12
(1,15)	1:A:591:ALA:HB3	1:A:606:ARG:HD3	8	0.12
(1,135)	1:A:653:ALA:HB1	1:A:654:HIS:HB3	2	0.12
(1,135)	1:A:653:ALA:HB2	1:A:654:HIS:HB3	2	0.12
(1,135)	1:A:653:ALA:HB3	1:A:654:HIS:HB3	2	0.12
(1,128)	1:A:655:ALA:HB1	1:A:656:TYR:HB3	1	0.12
(1,128)	1:A:655:ALA:HB2	1:A:656:TYR:HB3	1	0.12
(1,128)	1:A:655:ALA:HB3	1:A:656:TYR:HB3	1	0.12
(1,1197)	1:A:667:GLU:H	1:A:667:GLU:HB3	1	0.12
(1,1196)	1:A:660:GLN:H	1:A:660:GLN:HB3	8	0.12
(1,1192)	1:A:658:SER:H	1:A:659:GLN:HB3	13	0.12
(1,1170)	1:A:649:ARG:HA	1:A:649:ARG:HG3	12	0.12
(1,1151)	1:A:646:LEU:H	1:A:647:LEU:HD11	20	0.12
(1,1151)	1:A:646:LEU:H	1:A:647:LEU:HD12	20	0.12
(1,1151)	1:A:646:LEU:H	1:A:647:LEU:HD13	20	0.12
(1,1151)	1:A:646:LEU:H	1:A:647:LEU:HD21	20	0.12
(1,1151)	1:A:646:LEU:H	1:A:647:LEU:HD22	20	0.12
(1,1151)	1:A:646:LEU:H	1:A:647:LEU:HD23	20	0.12
(1,1145)	1:A:643:PRO:HB3	1:A:645:ASP:HB3	12	0.12
(1,1127)	1:A:640:GLU:H	1:A:640:GLU:HB3	4	0.12
(1,1127)	1:A:640:GLU:H	1:A:640:GLU:HB3	16	0.12
(1,112)	1:A:630:ALA:HB1	1:A:650:VAL:HB	15	0.12
(1,112)	1:A:630:ALA:HB2	1:A:650:VAL:HB	15	0.12
(1,112)	1:A:630:ALA:HB3	1:A:650:VAL:HB	15	0.12

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1112)	1:A:632:ILE:HB	1:A:636:GLN:HB3	5	0.12
(1,1111)	1:A:631:SER:HB3	1:A:632:ILE:H	3	0.12
(1,1111)	1:A:631:SER:HB3	1:A:632:ILE:H	4	0.12
(1,1111)	1:A:631:SER:HB3	1:A:632:ILE:H	13	0.12
(1,1111)	1:A:631:SER:HB3	1:A:632:ILE:H	15	0.12
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG11	1:A:632:ILE:H	9	0.12
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG12	1:A:632:ILE:H	9	0.12
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG13	1:A:632:ILE:H	9	0.12
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG21	1:A:632:ILE:H	9	0.12
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG22	1:A:632:ILE:H	9	0.12
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG23	1:A:632:ILE:H	9	0.12
(1,1050)	1:A:622:LYS:H	1:A:622:LYS:HB3	10	0.12
(1,1025)	1:A:606:ARG:HG3	1:A:607:ALA:HA	2	0.12
(1,1025)	1:A:606:ARG:HG3	1:A:607:ALA:HA	6	0.12
(2,45)	1:A:647:LEU:O	1:A:651:LEU:H	8	0.11
(2,39)	1:A:626:LEU:O	1:A:630:ALA:H	10	0.11
(1,991)	1:A:598:GLY:H	1:A:599:ARG:HG3	10	0.11
(1,976)	1:A:595:LEU:HB3	1:A:603:VAL:H	16	0.11
(1,963)	1:A:593:GLU:HG3	1:A:594:HIS:H	12	0.11
(1,957)	1:A:592:VAL:HG11	1:A:650:VAL:HG11	13	0.11
(1,957)	1:A:592:VAL:HG11	1:A:650:VAL:HG12	13	0.11
(1,957)	1:A:592:VAL:HG11	1:A:650:VAL:HG13	13	0.11
(1,957)	1:A:592:VAL:HG11	1:A:650:VAL:HG21	13	0.11
(1,957)	1:A:592:VAL:HG11	1:A:650:VAL:HG22	13	0.11
(1,957)	1:A:592:VAL:HG11	1:A:650:VAL:HG23	13	0.11
(1,957)	1:A:592:VAL:HG12	1:A:650:VAL:HG11	13	0.11
(1,957)	1:A:592:VAL:HG12	1:A:650:VAL:HG12	13	0.11
(1,957)	1:A:592:VAL:HG12	1:A:650:VAL:HG13	13	0.11
(1,957)	1:A:592:VAL:HG12	1:A:650:VAL:HG21	13	0.11
(1,957)	1:A:592:VAL:HG12	1:A:650:VAL:HG22	13	0.11
(1,957)	1:A:592:VAL:HG12	1:A:650:VAL:HG23	13	0.11
(1,957)	1:A:592:VAL:HG13	1:A:650:VAL:HG11	13	0.11
(1,957)	1:A:592:VAL:HG13	1:A:650:VAL:HG12	13	0.11
(1,957)	1:A:592:VAL:HG13	1:A:650:VAL:HG13	13	0.11
(1,957)	1:A:592:VAL:HG13	1:A:650:VAL:HG21	13	0.11
(1,957)	1:A:592:VAL:HG13	1:A:650:VAL:HG22	13	0.11
(1,957)	1:A:592:VAL:HG13	1:A:650:VAL:HG23	13	0.11
(1,957)	1:A:592:VAL:HG21	1:A:650:VAL:HG11	13	0.11
(1,957)	1:A:592:VAL:HG21	1:A:650:VAL:HG12	13	0.11
(1,957)	1:A:592:VAL:HG21	1:A:650:VAL:HG13	13	0.11
(1,957)	1:A:592:VAL:HG21	1:A:650:VAL:HG21	13	0.11
(1,957)	1:A:592:VAL:HG21	1:A:650:VAL:HG22	13	0.11

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,957)	1:A:592:VAL:HG21	1:A:650:VAL:HG23	13	0.11
(1,957)	1:A:592:VAL:HG22	1:A:650:VAL:HG11	13	0.11
(1,957)	1:A:592:VAL:HG22	1:A:650:VAL:HG12	13	0.11
(1,957)	1:A:592:VAL:HG22	1:A:650:VAL:HG13	13	0.11
(1,957)	1:A:592:VAL:HG22	1:A:650:VAL:HG21	13	0.11
(1,957)	1:A:592:VAL:HG22	1:A:650:VAL:HG22	13	0.11
(1,957)	1:A:592:VAL:HG22	1:A:650:VAL:HG23	13	0.11
(1,957)	1:A:592:VAL:HG23	1:A:650:VAL:HG11	13	0.11
(1,957)	1:A:592:VAL:HG23	1:A:650:VAL:HG12	13	0.11
(1,957)	1:A:592:VAL:HG23	1:A:650:VAL:HG13	13	0.11
(1,957)	1:A:592:VAL:HG23	1:A:650:VAL:HG21	13	0.11
(1,957)	1:A:592:VAL:HG23	1:A:650:VAL:HG22	13	0.11
(1,957)	1:A:592:VAL:HG23	1:A:650:VAL:HG23	13	0.11
(1,938)	1:A:592:VAL:HA	1:A:595:LEU:HB3	18	0.11
(1,938)	1:A:592:VAL:HA	1:A:595:LEU:HB3	19	0.11
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB1	7	0.11
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB2	7	0.11
(1,929)	1:A:590:GLU:HB3	1:A:591:ALA:HB3	7	0.11
(1,927)	1:A:590:GLU:H	1:A:590:GLU:HG3	7	0.11
(1,910)	1:A:589:VAL:HA	1:A:593:GLU:HG3	19	0.11
(1,885)	1:A:588:LEU:HA	1:A:592:VAL:HG11	10	0.11
(1,885)	1:A:588:LEU:HA	1:A:592:VAL:HG12	10	0.11
(1,885)	1:A:588:LEU:HA	1:A:592:VAL:HG13	10	0.11
(1,885)	1:A:588:LEU:HA	1:A:592:VAL:HG21	10	0.11
(1,885)	1:A:588:LEU:HA	1:A:592:VAL:HG22	10	0.11
(1,885)	1:A:588:LEU:HA	1:A:592:VAL:HG23	10	0.11
(1,855)	1:A:583:ALA:HB1	1:A:584:GLU:HG3	17	0.11
(1,855)	1:A:583:ALA:HB2	1:A:584:GLU:HG3	17	0.11
(1,855)	1:A:583:ALA:HB3	1:A:584:GLU:HG3	17	0.11
(1,809)	1:A:640:GLU:H	1:A:640:GLU:HB3	20	0.11
(1,729)	1:A:653:ALA:H	1:A:654:HIS:HB3	7	0.11
(1,661)	1:A:594:HIS:H	1:A:594:HIS:HB3	4	0.11
(1,6)	1:A:594:HIS:HB3	1:A:595:LEU:HG	3	0.11
(1,545)	1:A:656:TYR:H	1:A:656:TYR:HD1	6	0.11
(1,545)	1:A:656:TYR:H	1:A:656:TYR:HD1	8	0.11
(1,545)	1:A:656:TYR:H	1:A:656:TYR:HD1	10	0.11
(1,545)	1:A:656:TYR:H	1:A:656:TYR:HD1	13	0.11
(1,523)	1:A:624:LYS:H	1:A:624:LYS:HB3	7	0.11
(1,515)	1:A:624:LYS:HD3	1:A:625:THR:H	1	0.11
(1,508)	1:A:623:TRP:HD1	1:A:626:LEU:H	13	0.11
(1,49)	1:A:585:VAL:HB	1:A:587:ALA:H	1	0.11
(1,49)	1:A:585:VAL:HB	1:A:587:ALA:H	12	0.11

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,469)	1:A:629:THR:HA	1:A:632:ILE:H	18	0.11
(1,468)	1:A:630:ALA:H	1:A:632:ILE:H	2	0.11
(1,468)	1:A:630:ALA:H	1:A:632:ILE:H	12	0.11
(1,468)	1:A:630:ALA:H	1:A:632:ILE:H	14	0.11
(1,468)	1:A:630:ALA:H	1:A:632:ILE:H	15	0.11
(1,37)	1:A:586:GLU:HA	1:A:586:GLU:HG3	15	0.11
(1,320)	1:A:632:ILE:HG21	1:A:636:GLN:HG3	9	0.11
(1,320)	1:A:632:ILE:HG22	1:A:636:GLN:HG3	9	0.11
(1,320)	1:A:632:ILE:HG23	1:A:636:GLN:HG3	9	0.11
(1,320)	1:A:632:ILE:HG21	1:A:636:GLN:HG3	15	0.11
(1,320)	1:A:632:ILE:HG22	1:A:636:GLN:HG3	15	0.11
(1,320)	1:A:632:ILE:HG23	1:A:636:GLN:HG3	15	0.11
(1,320)	1:A:632:ILE:HG21	1:A:636:GLN:HG3	19	0.11
(1,320)	1:A:632:ILE:HG22	1:A:636:GLN:HG3	19	0.11
(1,320)	1:A:632:ILE:HG23	1:A:636:GLN:HG3	19	0.11
(1,309)	1:A:600:TRP:HA	1:A:619:LEU:HD21	15	0.11
(1,309)	1:A:600:TRP:HA	1:A:619:LEU:HD22	15	0.11
(1,309)	1:A:600:TRP:HA	1:A:619:LEU:HD23	15	0.11
(1,29)	1:A:588:LEU:HG	1:A:589:VAL:HA	10	0.11
(1,268)	1:A:629:THR:HG21	1:A:647:LEU:HG	4	0.11
(1,268)	1:A:629:THR:HG22	1:A:647:LEU:HG	4	0.11
(1,268)	1:A:629:THR:HG23	1:A:647:LEU:HG	4	0.11
(1,190)	1:A:592:VAL:HG11	1:A:596:GLY:HA2	2	0.11
(1,190)	1:A:592:VAL:HG12	1:A:596:GLY:HA2	2	0.11
(1,190)	1:A:592:VAL:HG13	1:A:596:GLY:HA2	2	0.11
(1,137)	1:A:596:GLY:HA3	1:A:653:ALA:HB1	15	0.11
(1,137)	1:A:596:GLY:HA3	1:A:653:ALA:HB2	15	0.11
(1,137)	1:A:596:GLY:HA3	1:A:653:ALA:HB3	15	0.11
(1,135)	1:A:653:ALA:HB1	1:A:654:HIS:HB3	9	0.11
(1,135)	1:A:653:ALA:HB2	1:A:654:HIS:HB3	9	0.11
(1,135)	1:A:653:ALA:HB3	1:A:654:HIS:HB3	9	0.11
(1,135)	1:A:653:ALA:HB1	1:A:654:HIS:HB3	14	0.11
(1,135)	1:A:653:ALA:HB2	1:A:654:HIS:HB3	14	0.11
(1,135)	1:A:653:ALA:HB3	1:A:654:HIS:HB3	14	0.11
(1,128)	1:A:655:ALA:HB1	1:A:656:TYR:HB3	12	0.11
(1,128)	1:A:655:ALA:HB2	1:A:656:TYR:HB3	12	0.11
(1,128)	1:A:655:ALA:HB3	1:A:656:TYR:HB3	12	0.11
(1,1197)	1:A:667:GLU:H	1:A:667:GLU:HB3	2	0.11
(1,1196)	1:A:660:GLN:H	1:A:660:GLN:HB3	17	0.11
(1,1188)	1:A:655:ALA:HB1	1:A:658:SER:HB3	17	0.11
(1,1188)	1:A:655:ALA:HB2	1:A:658:SER:HB3	17	0.11
(1,1188)	1:A:655:ALA:HB3	1:A:658:SER:HB3	17	0.11

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,114)	1:A:627:VAL:HG11	1:A:630:ALA:HB1	14	0.11
(1,114)	1:A:627:VAL:HG11	1:A:630:ALA:HB2	14	0.11
(1,114)	1:A:627:VAL:HG11	1:A:630:ALA:HB3	14	0.11
(1,114)	1:A:627:VAL:HG12	1:A:630:ALA:HB1	14	0.11
(1,114)	1:A:627:VAL:HG12	1:A:630:ALA:HB2	14	0.11
(1,114)	1:A:627:VAL:HG12	1:A:630:ALA:HB3	14	0.11
(1,114)	1:A:627:VAL:HG13	1:A:630:ALA:HB1	14	0.11
(1,114)	1:A:627:VAL:HG13	1:A:630:ALA:HB2	14	0.11
(1,114)	1:A:627:VAL:HG13	1:A:630:ALA:HB3	14	0.11
(1,1126)	1:A:638:ARG:HB3	1:A:638:ARG:HD3	10	0.11
(1,1111)	1:A:631:SER:HB3	1:A:632:ILE:H	11	0.11
(1,1111)	1:A:631:SER:HB3	1:A:632:ILE:H	16	0.11
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG11	1:A:632:ILE:H	20	0.11
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG12	1:A:632:ILE:H	20	0.11
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG13	1:A:632:ILE:H	20	0.11
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG21	1:A:632:ILE:H	20	0.11
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG22	1:A:632:ILE:H	20	0.11
(1,1087)	1:A:627:VAL:HG23	1:A:632:ILE:H	20	0.11
(1,1038)	1:A:617:VAL:HG21	1:A:621:ASP:HB3	20	0.11
(1,1038)	1:A:617:VAL:HG22	1:A:621:ASP:HB3	20	0.11
(1,1038)	1:A:617:VAL:HG23	1:A:621:ASP:HB3	20	0.11
(1,1009)	1:A:601:ARG:HB3	1:A:601:ARG:HD3	7	0.11
(1,1009)	1:A:601:ARG:HB3	1:A:601:ARG:HD3	15	0.11
(1,100)	1:A:626:LEU:HA	1:A:629:THR:HA	6	0.11
(1,100)	1:A:626:LEU:HA	1:A:629:THR:HA	7	0.11
(1,100)	1:A:626:LEU:HA	1:A:629:THR:HA	19	0.11
(1,100)	1:A:626:LEU:HA	1:A:629:THR:HA	20	0.11

## 10 Dihedral-angle violation analysis

Dihedral angle analysis failed due to data error in the dihedral angle restraints, possibly missing target value