



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Jun 4, 2023 – 03:37 PM EDT

PDB ID : 2LOR  
BMRB ID : 18222  
Title : Backbone structure of human membrane protein TMEM141  
Authors : Bayrhuber, M.; Klammt, C.; Maslennikov, I.; Riek, R.; Choe, S.  
Deposited on : 2012-01-26

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

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

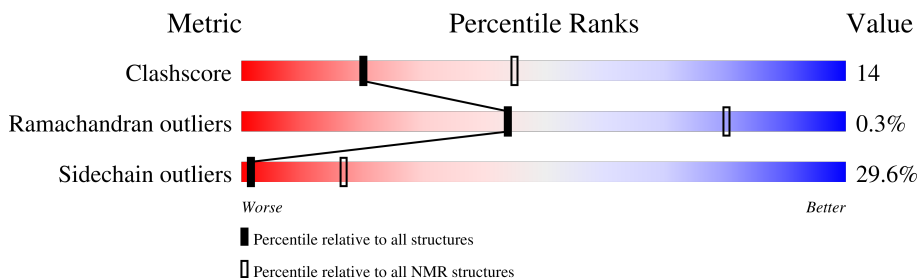
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*SOLUTION NMR*

The overall completeness of chemical shifts assignment is 45%.

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	108	

## 2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 7 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *fewest violations*.

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:7-A:16 (10)	0.16	4
2	A:26-A:40 (15)	0.34	11
3	A:43-A:54 (12)	0.20	12
4	A:62-A:93 (32)	0.29	7

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 4 clusters. No single-model clusters were found.

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

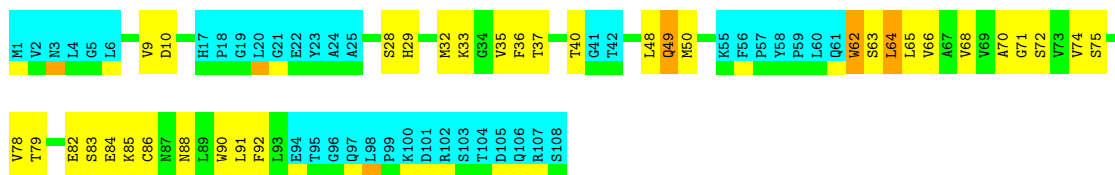
### 3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1665 atoms, of which 831 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Transmembrane protein 141.

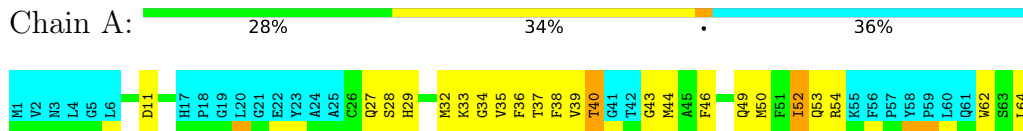
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	108	1665	535	831	143	150	6	0





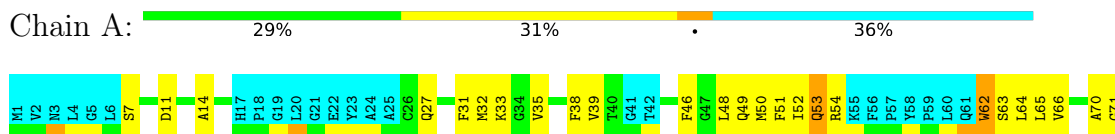
### 4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Transmembrane protein 141



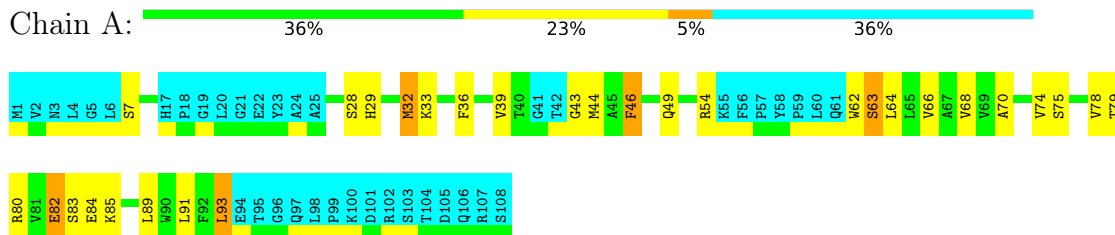
### 4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Transmembrane protein 141



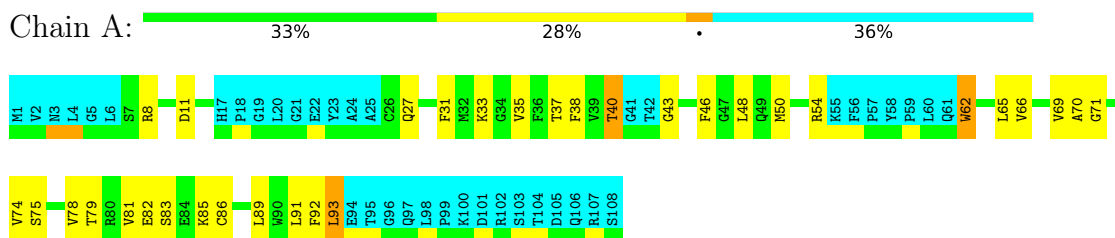
### 4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Transmembrane protein 141



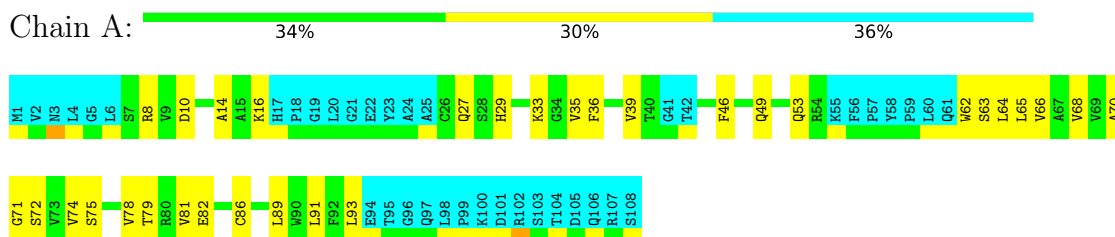
### 4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Transmembrane protein 141



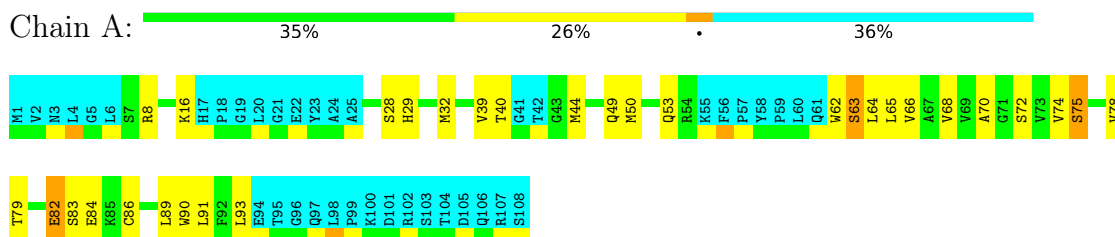
#### 4.2.7 Score per residue for model 7 (medoid)

- Molecule 1: Transmembrane protein 141



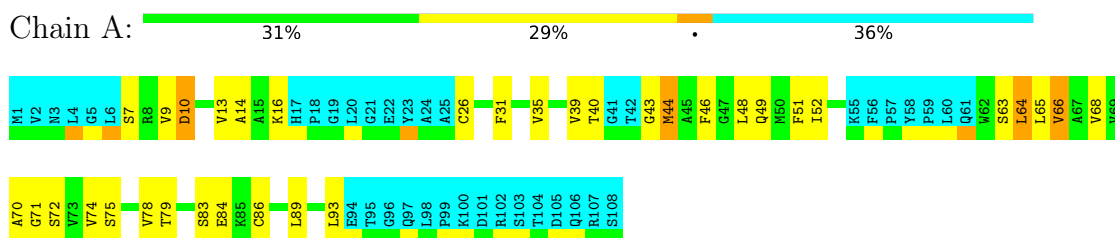
#### 4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Transmembrane protein 141



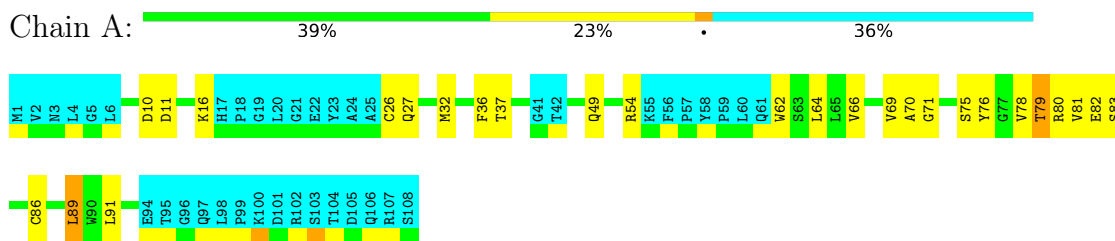
#### 4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Transmembrane protein 141



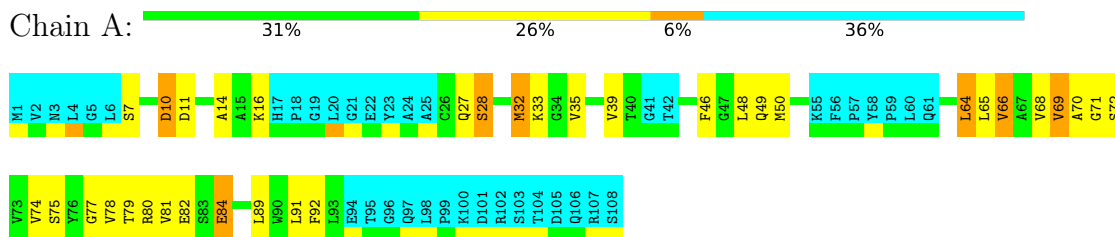
#### 4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Transmembrane protein 141



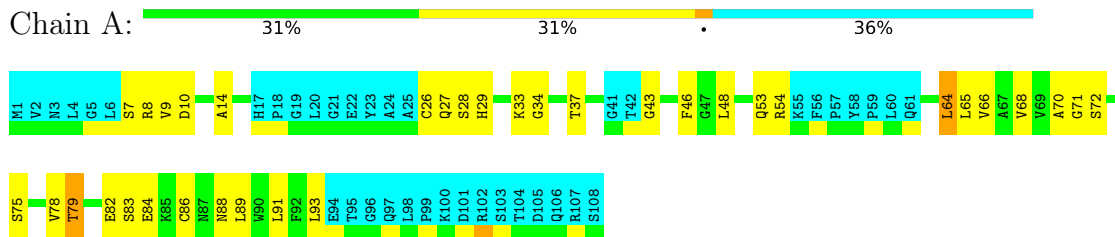
#### 4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Transmembrane protein 141



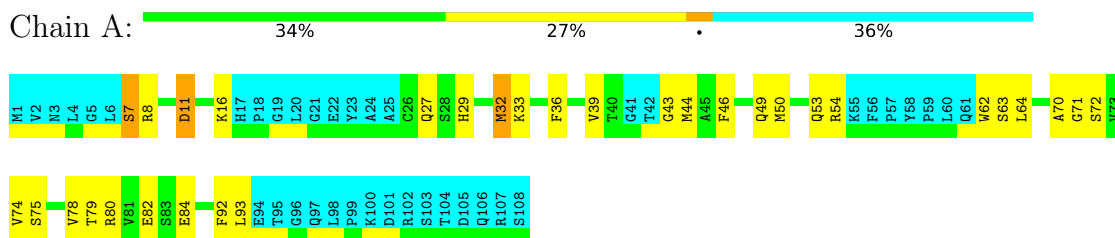
#### 4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Transmembrane protein 141



#### 4.2.13 Score per residue for model 13

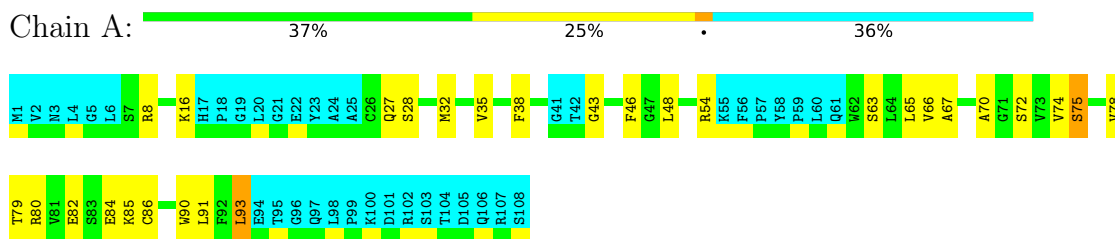
- Molecule 1: Transmembrane protein 141





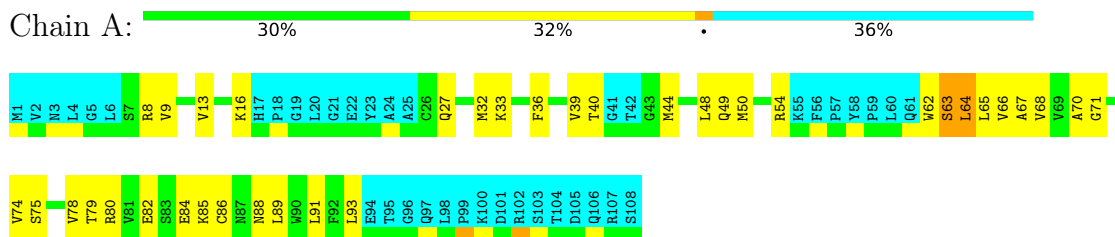
#### 4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Transmembrane protein 141



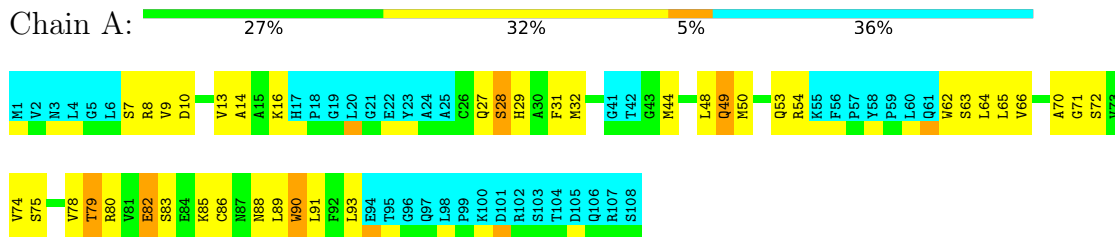
#### 4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Transmembrane protein 141



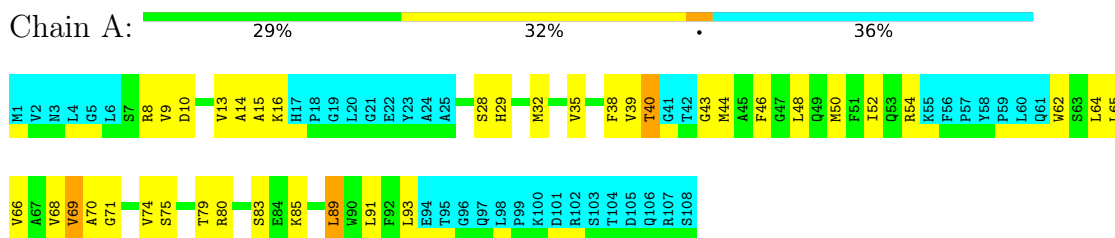
#### 4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Transmembrane protein 141



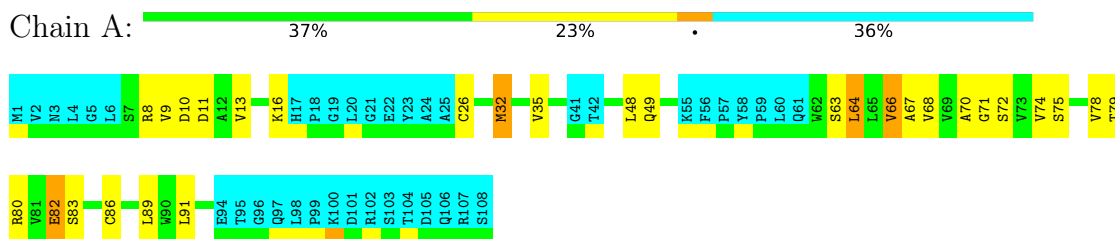
#### 4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Transmembrane protein 141



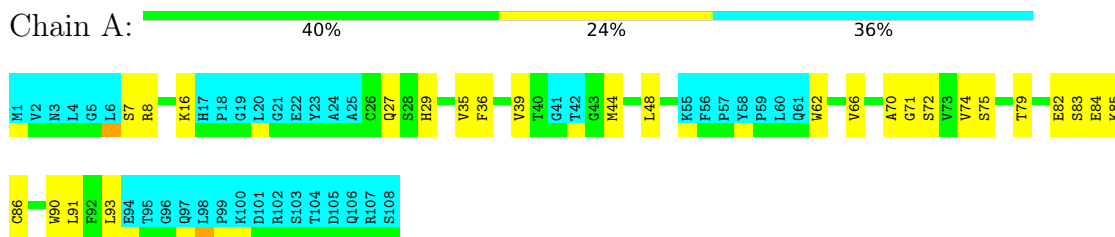
### 4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Transmembrane protein 141



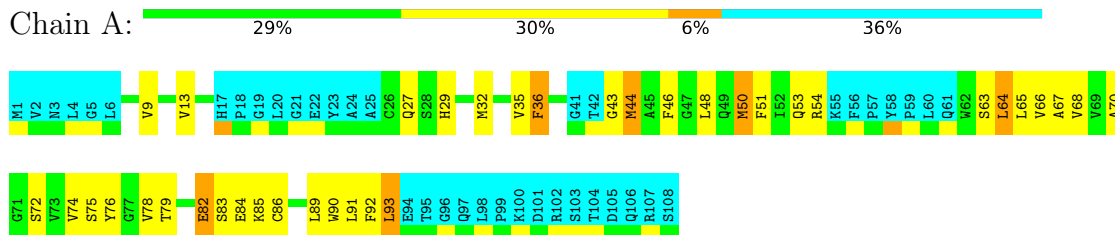
### 4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Transmembrane protein 141



### 4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Transmembrane protein 141



## 5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 200 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *target function*.

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

Software name	Classification	Version
CYANA	structure solution	
CYANA	refinement	

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

Chemical shift file(s)	working_cs.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	611
Number of shifts mapped to atoms	611
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	45%

## 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	534	538	538	15±3
All	All	10680	10760	10760	294

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:62:TRP:O	1:A:66:VAL:HG23	0.80	1.77	10	7
1:A:35:VAL:O	1:A:39:VAL:HG23	0.79	1.77	9	3
1:A:37:THR:O	1:A:40:THR:HG22	0.74	1.82	6	1
1:A:64:LEU:O	1:A:68:VAL:HG23	0.73	1.84	12	13
1:A:9:VAL:O	1:A:13:VAL:HG23	0.71	1.85	1	2
1:A:31:PHE:O	1:A:35:VAL:HG23	0.71	1.86	9	3
1:A:36:PHE:CE1	1:A:76:TYR:CG	0.70	2.80	10	1
1:A:33:LYS:O	1:A:37:THR:HG23	0.70	1.86	2	1
1:A:74:VAL:O	1:A:78:VAL:HG13	0.67	1.89	13	2
1:A:34:GLY:O	1:A:37:THR:HG22	0.64	1.91	12	2
1:A:36:PHE:CE1	1:A:76:TYR:CD1	0.63	2.87	10	1
1:A:89:LEU:O	1:A:93:LEU:HD13	0.63	1.94	15	1
1:A:70:ALA:O	1:A:74:VAL:HG23	0.59	1.98	11	9
1:A:70:ALA:O	1:A:74:VAL:HG12	0.58	1.97	19	4

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:66:VAL:O	1:A:70:ALA:HB3	0.58	1.98	8	18
1:A:63:SER:O	1:A:66:VAL:HG12	0.58	1.99	16	4
1:A:74:VAL:O	1:A:78:VAL:HG23	0.57	1.98	16	7
1:A:89:LEU:HD23	1:A:93:LEU:HD13	0.57	1.75	17	1
1:A:89:LEU:O	1:A:93:LEU:HD23	0.57	2.00	9	1
1:A:32:MET:O	1:A:35:VAL:HG12	0.56	2.01	4	5
1:A:49:GLN:NE2	1:A:64:LEU:CD1	0.55	2.70	4	1
1:A:86:CYS:O	1:A:90:TRP:CD1	0.55	2.60	8	1
1:A:74:VAL:O	1:A:78:VAL:HG12	0.54	2.03	20	2
1:A:74:VAL:O	1:A:78:VAL:HG22	0.54	2.01	6	2
1:A:49:GLN:CG	1:A:64:LEU:HD11	0.54	2.33	4	1
1:A:93:LEU:C	1:A:93:LEU:HD12	0.53	2.24	14	1
1:A:78:VAL:HG12	1:A:82:GLU:CD	0.52	2.25	15	1
1:A:48:LEU:O	1:A:52:ILE:HG22	0.52	2.05	4	1
1:A:69:VAL:CG1	1:A:70:ALA:N	0.52	2.73	11	3
1:A:82:GLU:O	1:A:86:CYS:CB	0.51	2.58	14	8
1:A:79:THR:O	1:A:83:SER:CB	0.51	2.59	20	14
1:A:78:VAL:O	1:A:82:GLU:CB	0.51	2.59	12	10
1:A:10:ASP:O	1:A:14:ALA:HB2	0.51	2.05	17	5
1:A:66:VAL:O	1:A:70:ALA:CB	0.51	2.59	14	18
1:A:35:VAL:O	1:A:39:VAL:HG12	0.51	2.04	19	1
1:A:71:GLY:O	1:A:75:SER:CB	0.50	2.60	18	16
1:A:86:CYS:O	1:A:90:TRP:CD2	0.50	2.64	2	1
1:A:32:MET:O	1:A:36:PHE:CD1	0.50	2.64	2	1
1:A:78:VAL:HA	1:A:81:VAL:HG12	0.50	1.82	10	2
1:A:9:VAL:O	1:A:13:VAL:HG12	0.50	2.07	17	3
1:A:70:ALA:O	1:A:74:VAL:CG1	0.50	2.60	19	3
1:A:32:MET:O	1:A:36:PHE:CB	0.50	2.60	3	4
1:A:70:ALA:O	1:A:74:VAL:CG2	0.50	2.60	3	7
1:A:27:GLN:O	1:A:31:PHE:CB	0.50	2.60	4	1
1:A:49:GLN:O	1:A:53:GLN:CB	0.50	2.60	4	3
1:A:75:SER:O	1:A:79:THR:CB	0.50	2.60	20	16
1:A:64:LEU:HD13	1:A:68:VAL:HG23	0.50	1.83	18	1
1:A:28:SER:O	1:A:32:MET:CB	0.49	2.60	16	2
1:A:78:VAL:O	1:A:82:GLU:CG	0.49	2.60	1	2
1:A:49:GLN:CD	1:A:64:LEU:HD11	0.49	2.27	4	1
1:A:62:TRP:O	1:A:66:VAL:CG2	0.49	2.60	4	5
1:A:90:TRP:C	1:A:90:TRP:CD1	0.49	2.86	16	1
1:A:64:LEU:O	1:A:68:VAL:CG2	0.49	2.60	1	4
1:A:86:CYS:O	1:A:90:TRP:CG	0.48	2.66	2	2
1:A:85:LYS:O	1:A:89:LEU:HD13	0.48	2.08	20	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:65:LEU:O	1:A:69:VAL:HG23	0.47	2.09	6	1
1:A:36:PHE:O	1:A:39:VAL:HG22	0.47	2.08	15	1
1:A:49:GLN:HE22	1:A:64:LEU:HD13	0.47	1.69	7	1
1:A:27:GLN:HG3	1:A:90:TRP:CE2	0.46	2.46	4	1
1:A:89:LEU:O	1:A:93:LEU:CD1	0.45	2.63	15	1
1:A:43:GLY:O	1:A:46:PHE:N	0.45	2.50	14	9
1:A:77:GLY:O	1:A:81:VAL:HG12	0.45	2.12	11	1
1:A:9:VAL:O	1:A:13:VAL:HG13	0.45	2.12	15	2
1:A:71:GLY:HA2	1:A:74:VAL:HG12	0.45	1.88	19	1
1:A:74:VAL:O	1:A:78:VAL:CG1	0.44	2.64	20	2
1:A:36:PHE:CE1	1:A:74:VAL:HG13	0.44	2.47	20	1
1:A:86:CYS:HB3	1:A:90:TRP:CZ2	0.44	2.48	2	2
1:A:46:PHE:O	1:A:50:MET:CE	0.44	2.66	11	1
1:A:90:TRP:O	1:A:90:TRP:CE3	0.44	2.71	19	1
1:A:88:ASN:O	1:A:92:PHE:CD2	0.43	2.71	1	1
1:A:63:SER:O	1:A:67:ALA:CB	0.43	2.66	14	4
1:A:49:GLN:O	1:A:52:ILE:HG22	0.42	2.14	3	1
1:A:69:VAL:HG13	1:A:70:ALA:N	0.42	2.28	10	1
1:A:74:VAL:O	1:A:78:VAL:CG2	0.42	2.67	5	3
1:A:35:VAL:O	1:A:39:VAL:CG2	0.42	2.62	11	1
1:A:71:GLY:CA	1:A:74:VAL:HG12	0.42	2.45	19	1
1:A:43:GLY:O	1:A:44:MET:C	0.42	2.58	9	3
1:A:89:LEU:HD23	1:A:93:LEU:CD1	0.42	2.44	17	1
1:A:93:LEU:HD13	1:A:93:LEU:O	0.41	2.15	4	1
1:A:63:SER:O	1:A:67:ALA:HB2	0.41	2.15	14	1
1:A:93:LEU:C	1:A:93:LEU:HD23	0.41	2.35	16	1
1:A:9:VAL:O	1:A:13:VAL:CG2	0.41	2.65	20	1
1:A:27:GLN:HB2	1:A:90:TRP:CE2	0.41	2.50	4	1
1:A:46:PHE:O	1:A:49:GLN:CG	0.41	2.68	7	1
1:A:36:PHE:CZ	1:A:76:TYR:HB3	0.41	2.51	10	1
1:A:49:GLN:NE2	1:A:64:LEU:HD11	0.41	2.31	4	1
1:A:36:PHE:CD1	1:A:76:TYR:CE1	0.41	3.08	10	1
1:A:27:GLN:HG3	1:A:90:TRP:CD2	0.41	2.51	4	1
1:A:51:PHE:CD1	1:A:51:PHE:C	0.40	2.94	9	1
1:A:49:GLN:HB3	1:A:64:LEU:HD13	0.40	1.92	2	1
1:A:78:VAL:HG12	1:A:82:GLU:OE1	0.40	2.16	15	1
1:A:28:SER:CB	1:A:84:GLU:OE1	0.40	2.68	11	1
1:A:82:GLU:O	1:A:86:CYS:SG	0.40	2.80	6	3
1:A:75:SER:O	1:A:79:THR:OG1	0.40	2.39	4	1
1:A:81:VAL:CG2	1:A:82:GLU:N	0.40	2.84	6	1
1:A:7:SER:O	1:A:11:ASP:OD1	0.40	2.40	13	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:ASP:O	1:A:14:ALA:CB	0.40	2.69	17	1
1:A:46:PHE:O	1:A:50:MET:SD	0.40	2.80	20	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	69/108 (64%)	68±1 (99±1%)	1±1 (1±1%)	0±0 (0±1%)	44	80
All	All	1380/2160 (64%)	1365 (99%)	11 (1%)	4 (0%)	44	80

All 1 unique Ramachandran outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	40	THR	4

### 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	57/89 (64%)	40±3 (70±5%)	17±3 (30±5%)	1	17
All	All	1140/1780 (64%)	802 (70%)	338 (30%)	1	17

All 51 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	91	LEU	16
1	A	72	SER	14
1	A	16	LYS	13

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	89	LEU	13
1	A	48	LEU	12
1	A	84	GLU	12
1	A	27	GLN	12
1	A	54	ARG	12
1	A	49	GLN	11
1	A	93	LEU	11
1	A	80	ARG	11
1	A	8	ARG	11
1	A	44	MET	10
1	A	29	HIS	10
1	A	50	MET	10
1	A	64	LEU	10
1	A	85	LYS	9
1	A	62	TRP	9
1	A	33	LYS	9
1	A	11	ASP	8
1	A	63	SER	8
1	A	28	SER	8
1	A	7	SER	8
1	A	10	ASP	7
1	A	82	GLU	7
1	A	32	MET	7
1	A	53	GLN	6
1	A	26	CYS	5
1	A	65	LEU	5
1	A	38	PHE	5
1	A	52	ILE	4
1	A	66	VAL	4
1	A	79	THR	4
1	A	88	ASN	4
1	A	90	TRP	4
1	A	35	VAL	3
1	A	40	THR	3
1	A	86	CYS	3
1	A	36	PHE	3
1	A	39	VAL	2
1	A	46	PHE	2
1	A	51	PHE	2
1	A	75	SER	2
1	A	69	VAL	2
1	A	78	VAL	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	87	ASN	1
1	A	37	THR	1
1	A	92	PHE	1
1	A	31	PHE	1
1	A	83	SER	1
1	A	76	TYR	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 45% for the well-defined parts and 42% 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	611
Number of shifts mapped to atoms	611
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	0

#### 7.1.2 Chemical shift referencing (i)

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction $\pm$ precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	108	$0.05 \pm 0.28$	None needed ( $< 0.5$ ppm)
$^{13}\text{C}_\beta$	89	$1.12 \pm 0.14$	Should be checked
$^{13}\text{C}'$	0	—	None (insufficient data)
$^{15}\text{N}$	103	$0.35 \pm 0.24$	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 45%, i.e. 420 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 940. 0 out of 17 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	$^1\text{H}$	$^{13}\text{C}$	$^{15}\text{N}$
Backbone	253/350 (72%)	115/143 (80%)	69/138 (50%)	69/69 (100%)
Sidechain	167/490 (34%)	107/325 (33%)	60/148 (41%)	0/17 (0%)

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

	Total	<sup>1</sup> H	<sup>13</sup> C	<sup>15</sup> N
Aromatic	0/100 (0%)	0/50 (0%)	0/47 (0%)	0/3 (0%)
Overall	420/940 (45%)	222/518 (43%)	129/333 (39%)	69/89 (78%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 42%, i.e. 611 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1453. 0 out of 23 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	<sup>1</sup> H	<sup>13</sup> C	<sup>15</sup> N
Backbone	384/542 (71%)	173/222 (78%)	108/216 (50%)	103/104 (99%)
Sidechain	227/776 (29%)	138/510 (27%)	89/237 (38%)	0/29 (0%)
Aromatic	0/135 (0%)	0/67 (0%)	0/64 (0%)	0/4 (0%)
Overall	611/1453 (42%)	311/799 (39%)	197/517 (38%)	103/137 (75%)

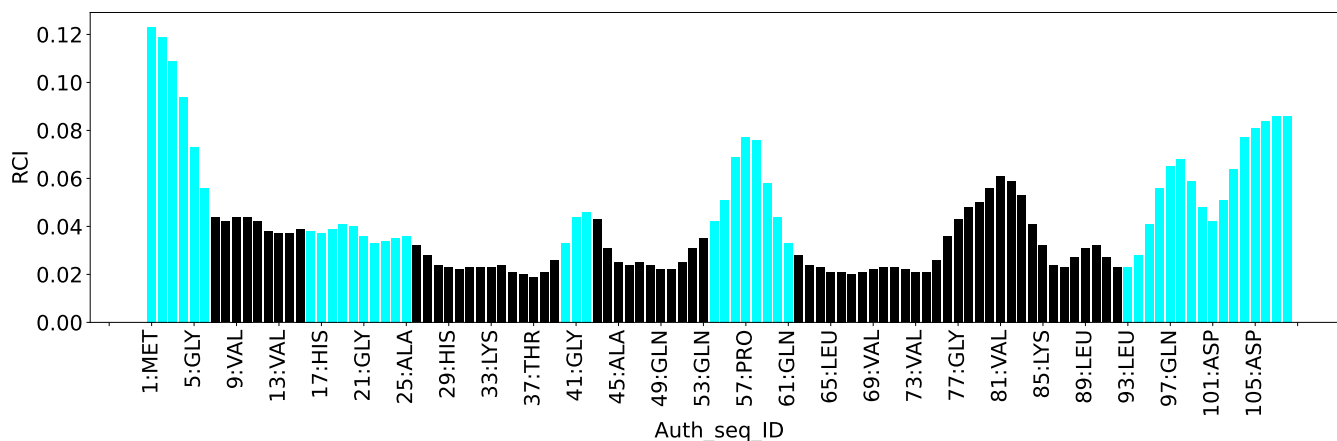
#### 7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

There are no statistically unusual chemical shifts.

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

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

Random coil index (RCI) for chain A:



## 8 NMR restraints analysis

### 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	982
Intra-residue ( $ i-j =0$ )	3
Sequential ( $ i-j =1$ )	306
Medium range ( $ i-j >1$ and $ i-j <5$ )	31
Long range ( $ i-j \geq 5$ )	402
Inter-chain	0
Hydrogen bond restraints	240
Disulfide bond restraints	0
Total dihedral-angle restraints	0
Number of unmapped restraints	0
Number of restraints per residue	9.1
Number of long range restraints per residue <sup>1</sup>	3.7

<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)	15.2	0.2
0.2-0.5 (Medium)	44.5	0.5
>0.5 (Large)	397.1	43.87

### 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

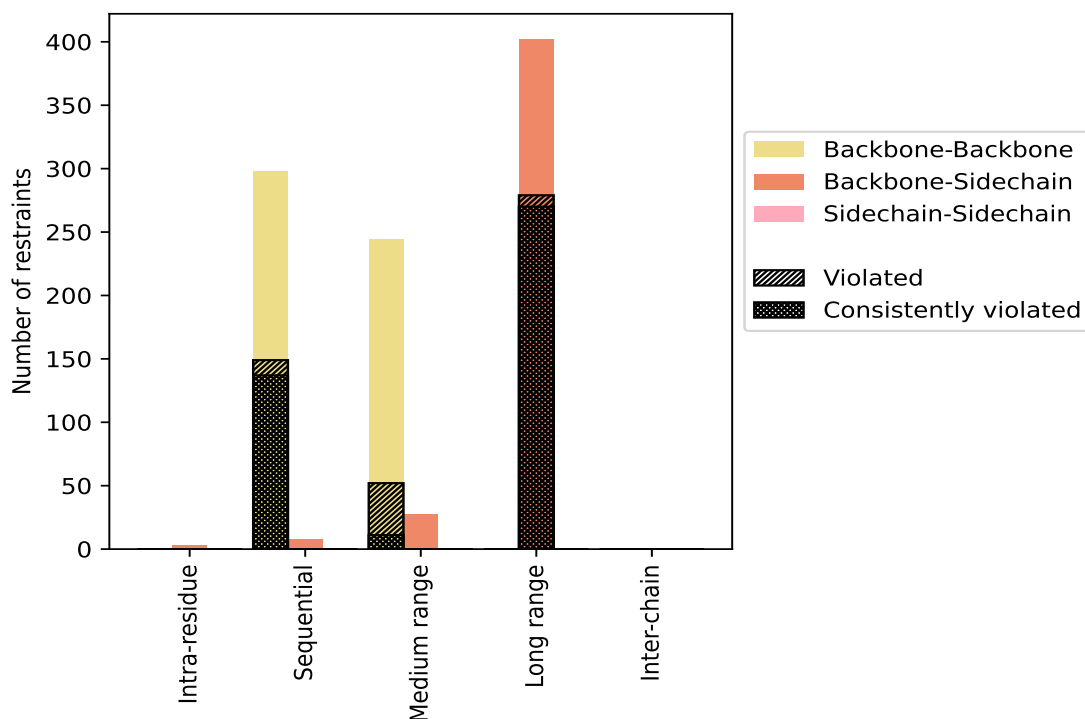
### 9.1 Summary of distance violations i

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>3</b>	<b>0.3</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	3	0.3	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>Sequential (<math> i-j =1</math>)</b>	<b>306</b>	<b>31.2</b>	<b>149</b>	<b>48.7</b>	<b>15.2</b>	<b>137</b>	<b>44.8</b>	<b>14.0</b>
Backbone-Backbone	298	30.3	149	50.0	15.2	137	46.0	14.0
Backbone-Sidechain	8	0.8	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>Medium range (<math> i-j &gt;1</math> &amp; <math> i-j &lt;5</math>)</b>	<b>31</b>	<b>3.2</b>	<b>2</b>	<b>6.5</b>	<b>0.2</b>	<b>2</b>	<b>6.5</b>	<b>0.2</b>
Backbone-Backbone	4	0.4	2	50.0	0.2	2	50.0	0.2
Backbone-Sidechain	27	2.7	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>Long range (<math> i-j \geq 5</math>)</b>	<b>402</b>	<b>40.9</b>	<b>279</b>	<b>69.4</b>	<b>28.4</b>	<b>270</b>	<b>67.2</b>	<b>27.5</b>
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	402	40.9	279	69.4	28.4	270	67.2	27.5
Sidechain-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	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>240</b>	<b>24.4</b>	<b>50</b>	<b>20.8</b>	<b>5.1</b>	<b>9</b>	<b>3.8</b>	<b>0.9</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>982</b>	<b>100.0</b>	<b>480</b>	<b>48.9</b>	<b>48.9</b>	<b>418</b>	<b>42.6</b>	<b>42.6</b>
Backbone-Backbone	542	55.2	201	37.1	20.5	148	27.3	15.1
Backbone-Sidechain	440	44.8	279	63.4	28.4	270	61.4	27.5
Sidechain-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0

<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	0	147	33	277	0	457	8.74	34.06	8.8	6.8
2	0	149	32	277	0	458	9.01	33.23	9.04	6.91
3	0	147	28	278	0	453	9.04	34.07	9.2	6.56
4	0	149	30	276	0	455	8.71	32.63	9.02	5.97
5	0	147	35	278	0	460	8.8	34.4	9.03	6.9
6	0	149	30	275	0	454	9.27	43.87	9.99	6.29
7	0	145	33	276	0	454	8.69	32.75	8.67	6.62
8	0	147	37	277	0	461	8.97	36.96	9.35	6.68
9	0	149	33	279	0	461	9.31	38.35	9.76	6.35
10	0	145	28	277	0	450	8.85	36.76	9.15	6.27
11	0	149	37	277	0	463	8.69	37.55	8.99	5.99

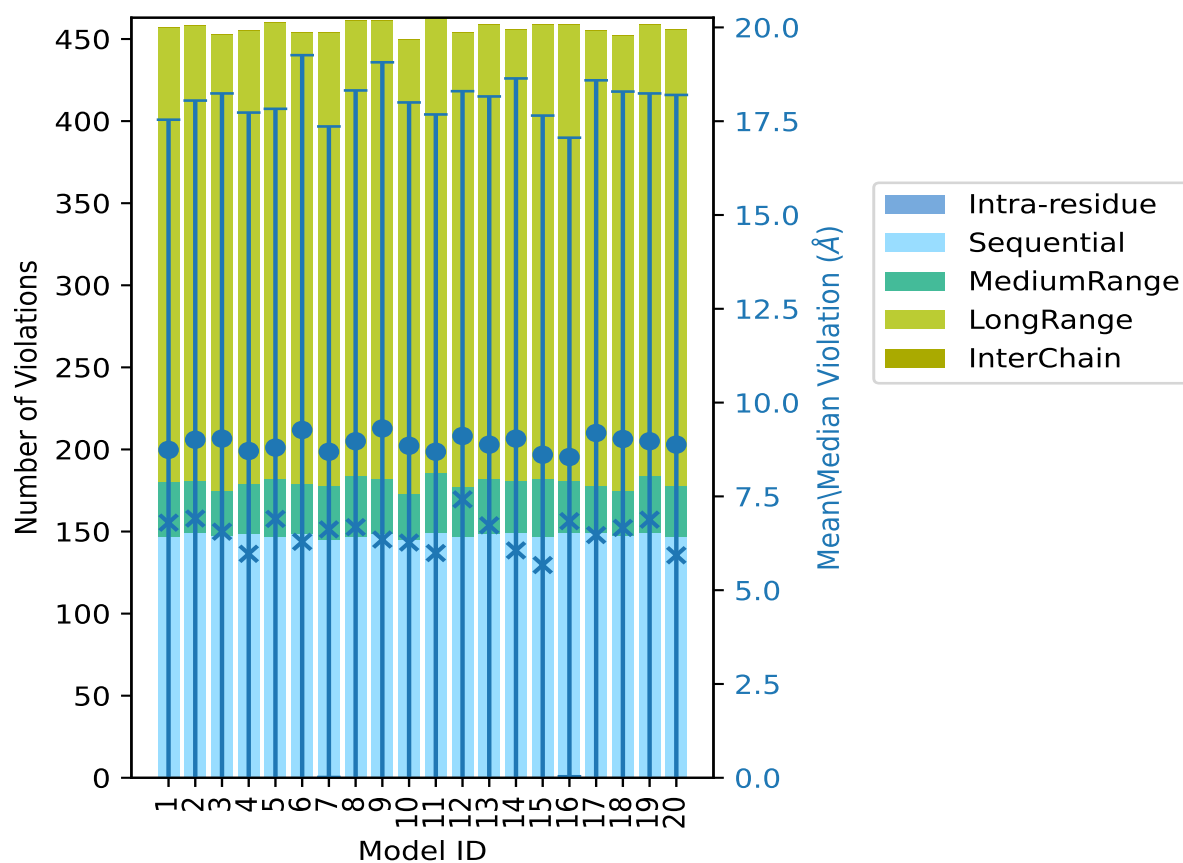
*Continued on next page...*

Continued from previous page...

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				
12	0	147	30	277	0	454	9.11	36.59	9.19	7.42
13	0	149	33	277	0	459	8.88	38.12	9.28	6.73
14	0	149	32	275	0	456	9.04	40.01	9.6	6.06
15	0	147	35	277	0	459	8.61	35.22	9.04	5.67
16	0	149	32	278	0	459	8.55	33.09	8.51	6.84
17	0	149	29	277	0	455	9.19	37.33	9.4	6.47
18	0	147	28	277	0	452	9.03	34.93	9.26	6.66
19	0	149	35	275	0	459	8.97	35.87	9.27	6.88
20	0	147	31	278	0	456	8.88	38.64	9.32	5.93

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

### 9.2.1 Bar graph : Distance Violation statistics for each model [\(i\)](#)



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



### 9.3 Distance violation statistics for the ensemble

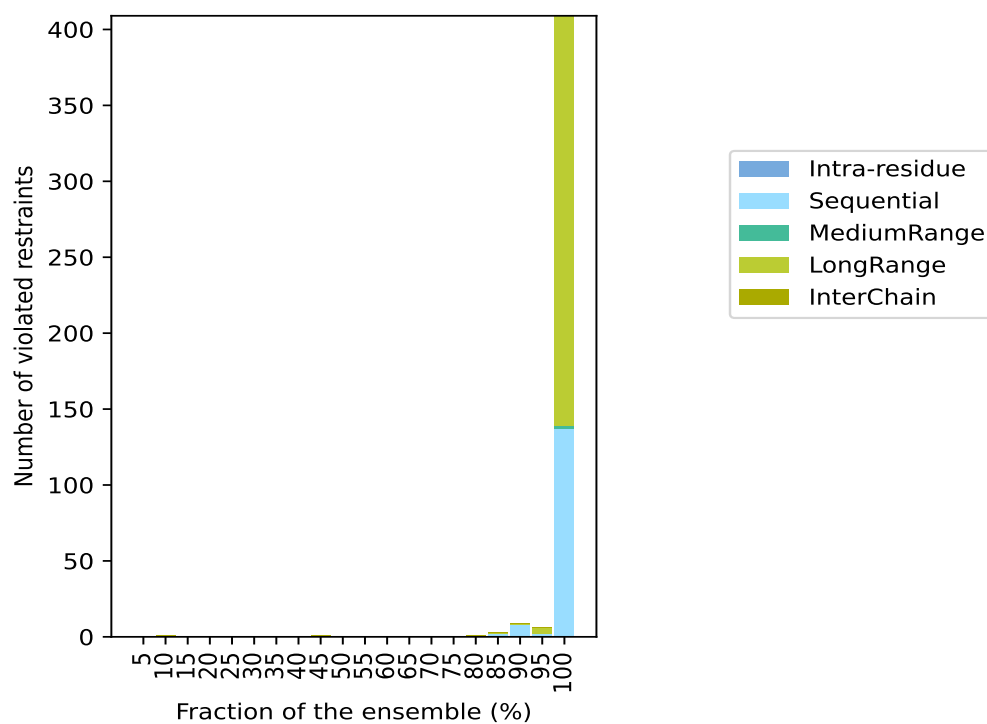
Violation analysis may find that some restraints are violated in few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of the ensemble. In total, 312(IR:3, SQ:157, MR:29, LR:123, IC:0) restraints are not 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>	%
0	0	0	0	0	0	1	5.0
0	0	0	1	0	1	2	10.0
0	0	0	0	0	0	3	15.0
0	0	0	0	0	0	4	20.0
0	0	0	0	0	0	5	25.0
0	0	0	0	0	0	6	30.0
0	0	0	0	0	0	7	35.0
0	0	0	0	0	0	8	40.0
0	0	0	1	0	1	9	45.0
0	0	0	0	0	0	10	50.0
0	0	0	0	0	0	11	55.0
0	0	0	0	0	0	12	60.0
0	0	0	0	0	0	13	65.0
0	0	0	0	0	0	14	70.0
0	0	0	0	0	0	15	75.0
0	0	0	1	0	1	16	80.0
0	2	0	1	0	3	17	85.0
0	8	0	1	0	9	18	90.0
0	2	0	4	0	6	19	95.0
0	137	2	270	0	409	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

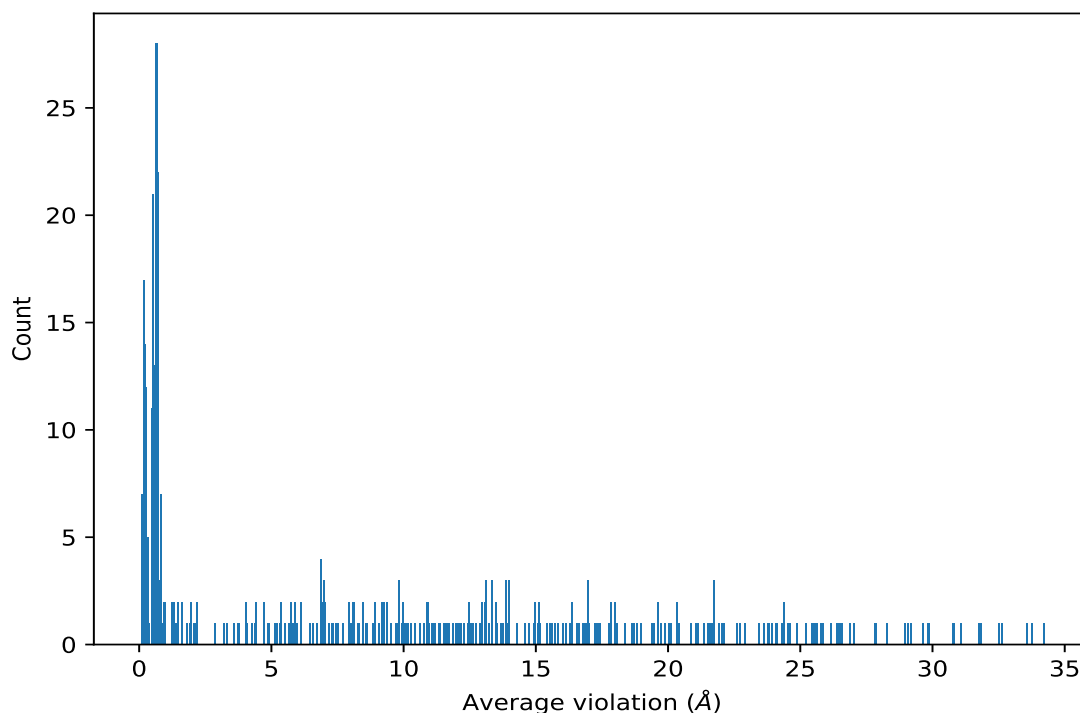
### 9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble [i](#)



## 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)
(4,85)	1:A:49:GLN:CB	1:A:96:GLY:H	20	34.21	1.55	34.06
(4,84)	1:A:49:GLN:CB	1:A:95:THR:H	20	33.76	1.36	33.9
(4,86)	1:A:49:GLN:CB	1:A:97:GLN:H	20	33.55	1.58	33.7
(4,87)	1:A:49:GLN:CB	1:A:98:LEU:H	20	32.61	2.04	32.5
(4,96)	1:A:56:PHE:CB	1:A:2:VAL:H	20	32.51	4.86	32.48
(4,83)	1:A:49:GLN:CB	1:A:94:GLU:H	20	31.84	1.38	31.82
(4,97)	1:A:56:PHE:CB	1:A:3:ASN:H	20	31.76	5.57	31.94
(4,100)	1:A:56:PHE:CB	1:A:6:LEU:H	20	31.07	5.17	29.33
(4,98)	1:A:56:PHE:CB	1:A:4:LEU:H	20	30.8	5.79	30.36
(4,99)	1:A:56:PHE:CB	1:A:5:GLY:H	20	30.78	5.31	30.32
(4,101)	1:A:56:PHE:CB	1:A:7:SER:H	20	29.86	4.81	27.92
(4,82)	1:A:49:GLN:CB	1:A:92:PHE:H	20	29.81	1.08	30.01
(4,103)	1:A:56:PHE:CB	1:A:9:VAL:H	20	29.62	4.22	29.28
(4,102)	1:A:56:PHE:CB	1:A:8:ARG:H	20	29.15	4.39	28.38
(4,104)	1:A:56:PHE:CB	1:A:10:ASP:H	20	29.08	3.8	27.7
(4,81)	1:A:49:GLN:CB	1:A:91:LEU:H	20	28.96	0.99	29.05

*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)
(4,19)	1:A:26:CYS:CB	1:A:62:TRP:H	20	28.29	2.19	28.8
(4,106)	1:A:56:PHE:CB	1:A:12:ALA:H	20	27.85	3.48	28.18
(4,105)	1:A:56:PHE:CB	1:A:11:ASP:H	20	27.82	3.32	27.03
(4,108)	1:A:56:PHE:CB	1:A:16:LYS:H	20	27.02	3.69	28.07
(4,109)	1:A:56:PHE:CB	1:A:17:HIS:H	20	26.86	3.11	27.92
(4,80)	1:A:49:GLN:CB	1:A:90:TRP:H	20	26.59	1.13	26.69
(4,225)	1:A:86:CYS:CB	1:A:54:ARG:H	20	26.52	0.82	26.6
(4,107)	1:A:56:PHE:CB	1:A:15:ALA:H	20	26.45	2.93	27.4
(4,20)	1:A:26:CYS:CB	1:A:63:SER:H	20	26.39	2.42	26.88
(4,153)	1:A:56:PHE:CB	1:A:96:GLY:H	20	26.19	0.78	26.2
(4,223)	1:A:86:CYS:CB	1:A:52:ILE:H	20	25.86	0.85	25.98
(4,154)	1:A:56:PHE:CB	1:A:97:GLN:H	20	25.75	0.92	25.9
(4,79)	1:A:49:GLN:CB	1:A:88:ASN:H	20	25.61	0.79	25.68
(4,152)	1:A:56:PHE:CB	1:A:95:THR:H	20	25.57	0.75	25.64
(4,88)	1:A:49:GLN:CB	1:A:101:ASP:H	20	25.54	3.0	25.84
(4,224)	1:A:86:CYS:CB	1:A:53:GLN:H	20	25.42	0.69	25.49
(4,155)	1:A:56:PHE:CB	1:A:98:LEU:H	20	25.24	1.32	25.6
(1,318)	1:A:75:SER:CB	1:A:16:LYS:H	20	24.89	4.08	25.51
(1,319)	1:A:75:SER:CB	1:A:17:HIS:H	20	24.63	3.35	25.05
(4,111)	1:A:56:PHE:CB	1:A:20:LEU:H	20	24.52	1.51	24.84
(4,21)	1:A:26:CYS:CB	1:A:64:LEU:H	20	24.38	2.18	25.06
(4,22)	1:A:26:CYS:CB	1:A:65:LEU:H	20	24.35	1.91	24.93
(4,110)	1:A:56:PHE:CB	1:A:19:GLY:H	20	24.32	1.38	24.68
(4,222)	1:A:86:CYS:CB	1:A:51:PHE:H	20	24.14	0.93	24.3
(1,331)	1:A:75:SER:CB	1:A:98:LEU:H	20	24.05	0.59	24.07
(1,329)	1:A:75:SER:CB	1:A:96:GLY:H	20	23.92	0.34	23.94
(4,89)	1:A:49:GLN:CB	1:A:102:ARG:H	20	23.8	2.55	24.01
(4,23)	1:A:26:CYS:CB	1:A:66:VAL:H	20	23.77	2.06	24.14
(1,330)	1:A:75:SER:CB	1:A:97:GLN:H	20	23.64	0.18	23.7
(4,151)	1:A:56:PHE:CB	1:A:94:GLU:H	20	23.43	0.72	23.44
(1,328)	1:A:75:SER:CB	1:A:95:THR:H	20	22.93	0.1	22.98
(4,112)	1:A:56:PHE:CB	1:A:21:GLY:H	20	22.73	1.33	23.35
(4,90)	1:A:49:GLN:CB	1:A:103:SER:H	20	22.6	2.94	22.64
(4,91)	1:A:49:GLN:CB	1:A:104:THR:H	20	22.1	3.19	22.28
(4,220)	1:A:86:CYS:CB	1:A:49:GLN:H	20	22.06	1.15	22.25
(4,221)	1:A:86:CYS:CB	1:A:50:MET:H	20	22.02	0.86	22.08
(4,219)	1:A:86:CYS:CB	1:A:48:LEU:H	20	21.93	1.13	22.06
(1,321)	1:A:75:SER:CB	1:A:20:LEU:H	20	21.73	1.11	21.97
(4,150)	1:A:56:PHE:CB	1:A:93:LEU:H	20	21.72	0.74	21.8
(1,320)	1:A:75:SER:CB	1:A:19:GLY:H	20	21.7	1.42	21.84
(4,113)	1:A:56:PHE:CB	1:A:22:GLU:H	20	21.67	1.16	21.56
(4,149)	1:A:56:PHE:CB	1:A:92:PHE:H	20	21.57	0.59	21.65

*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)
(4,24)	1:A:26:CYS:CB	1:A:67:ALA:H	20	21.52	2.1	22.11
(4,78)	1:A:49:GLN:CB	1:A:85:LYS:H	20	21.39	0.78	21.46
(4,114)	1:A:56:PHE:CB	1:A:23:TYR:H	20	21.12	1.19	21.3
(4,92)	1:A:49:GLN:CB	1:A:105:ASP:H	20	21.07	3.46	21.0
(4,25)	1:A:26:CYS:CB	1:A:69:VAL:H	20	20.88	1.76	21.3
(4,47)	1:A:49:GLN:CB	1:A:16:LYS:H	20	20.44	2.87	20.61
(4,48)	1:A:49:GLN:CB	1:A:17:HIS:H	20	20.34	2.4	20.58
(4,148)	1:A:56:PHE:CB	1:A:91:LEU:H	20	20.33	0.47	20.36
(4,26)	1:A:26:CYS:CB	1:A:70:ALA:H	20	20.11	2.11	20.6
(1,322)	1:A:75:SER:CB	1:A:21:GLY:H	20	20.03	0.93	20.18
(4,93)	1:A:49:GLN:CB	1:A:106:GLN:H	20	19.86	4.23	19.78
(4,46)	1:A:49:GLN:CB	1:A:15:ALA:H	20	19.7	2.43	19.69
(4,115)	1:A:56:PHE:CB	1:A:24:ALA:H	20	19.64	1.39	20.12
(4,218)	1:A:86:CYS:CB	1:A:47:GLY:H	20	19.63	1.01	19.78
(4,94)	1:A:49:GLN:CB	1:A:107:ARG:H	20	19.49	4.54	19.77
(1,323)	1:A:75:SER:CB	1:A:22:GLU:H	20	19.36	1.3	19.32
(1,324)	1:A:75:SER:CB	1:A:23:TYR:H	20	18.95	1.1	19.24
(4,95)	1:A:49:GLN:CB	1:A:108:SER:H	20	18.83	5.34	18.68
(4,77)	1:A:49:GLN:CB	1:A:83:SER:H	20	18.74	0.88	18.82
(4,156)	1:A:56:PHE:CB	1:A:101:ASP:H	20	18.6	2.45	18.14
(1,335)	1:A:86:CYS:CB	1:A:70:ALA:H	20	18.36	0.07	18.38
(4,50)	1:A:49:GLN:CB	1:A:20:LEU:H	20	18.06	0.66	18.1
(4,216)	1:A:86:CYS:CB	1:A:44:MET:H	20	18.01	1.13	18.3
(4,147)	1:A:56:PHE:CB	1:A:90:TRP:H	20	17.99	0.56	17.95
(4,217)	1:A:86:CYS:CB	1:A:46:PHE:H	20	17.98	1.11	18.16
(4,116)	1:A:56:PHE:CB	1:A:25:ALA:H	20	17.84	1.04	18.2
(4,27)	1:A:26:CYS:CB	1:A:71:GLY:H	20	17.81	1.95	18.26
(4,49)	1:A:49:GLN:CB	1:A:19:GLY:H	20	17.78	1.06	17.58
(4,18)	1:A:26:CYS:CB	1:A:58:TYR:H	20	17.43	1.53	17.64
(1,325)	1:A:75:SER:CB	1:A:24:ALA:H	20	17.37	0.94	17.63
(4,29)	1:A:26:CYS:CB	1:A:73:VAL:H	20	17.32	2.04	18.18
(4,117)	1:A:56:PHE:CB	1:A:26:CYS:H	20	17.21	0.93	17.22
(4,232)	1:A:86:CYS:CB	1:A:66:VAL:H	20	17.02	0.01	17.02
(4,76)	1:A:49:GLN:CB	1:A:82:GLU:H	20	16.99	0.76	17.07
(4,28)	1:A:26:CYS:CB	1:A:72:SER:H	20	16.96	1.75	17.51
(4,75)	1:A:49:GLN:CB	1:A:81:VAL:H	20	16.96	1.05	17.1
(4,157)	1:A:56:PHE:CB	1:A:102:ARG:H	20	16.9	2.46	16.52
(4,146)	1:A:56:PHE:CB	1:A:88:ASN:H	20	16.89	0.31	16.93
(4,17)	1:A:26:CYS:CB	1:A:56:PHE:H	20	16.8	1.29	16.87
(4,234)	1:A:86:CYS:CB	1:A:68:VAL:H	20	16.75	0.06	16.76
(4,139)	1:A:56:PHE:CB	1:A:77:GLY:H	20	16.61	0.36	16.73
(4,235)	1:A:86:CYS:CB	1:A:69:VAL:H	20	16.59	0.07	16.61

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)
(4,51)	1:A:49:GLN:CB	1:A:21:GLY:H	20	16.38	0.75	16.23
(4,16)	1:A:26:CYS:CB	1:A:55:LYS:H	20	16.38	1.3	16.37
(1,336)	1:A:86:CYS:CB	1:A:71:GLY:H	20	16.27	0.06	16.3
(4,74)	1:A:49:GLN:CB	1:A:80:ARG:H	20	16.12	1.24	16.3
(4,30)	1:A:26:CYS:CB	1:A:74:VAL:H	20	16.01	2.31	16.9
(4,188)	1:A:75:SER:CB	1:A:55:LYS:H	20	15.82	0.64	15.84
(4,215)	1:A:86:CYS:CB	1:A:43:GLY:H	20	15.7	1.2	15.84
(4,158)	1:A:56:PHE:CB	1:A:103:SER:H	20	15.61	2.92	16.02
(4,189)	1:A:75:SER:CB	1:A:56:PHE:H	20	15.52	0.47	15.58
(1,326)	1:A:75:SER:CB	1:A:60:LEU:H	20	15.42	0.1	15.44
(4,52)	1:A:49:GLN:CB	1:A:22:GLU:H	20	15.19	0.86	15.05
(1,337)	1:A:86:CYS:CB	1:A:72:SER:H	20	15.13	0.09	15.14
(4,190)	1:A:75:SER:CB	1:A:58:TYR:H	20	15.12	0.39	15.26
(4,159)	1:A:56:PHE:CB	1:A:104:THR:H	20	15.05	3.44	14.93
(4,136)	1:A:56:PHE:CB	1:A:74:VAL:H	20	14.99	0.18	15.0
(4,138)	1:A:56:PHE:CB	1:A:76:TYR:H	20	14.96	0.24	15.08
(4,233)	1:A:86:CYS:CB	1:A:67:ALA:H	20	14.9	0.04	14.9
(1,338)	1:A:86:CYS:CB	1:A:73:VAL:H	20	14.74	0.1	14.76
(4,118)	1:A:56:PHE:CB	1:A:28:SER:H	20	14.56	1.25	14.88
(4,53)	1:A:49:GLN:CB	1:A:23:TYR:H	20	14.26	0.53	14.16
(4,73)	1:A:49:GLN:CB	1:A:79:THR:H	20	13.99	0.99	14.07
(4,185)	1:A:75:SER:CB	1:A:52:ILE:H	20	13.96	0.81	14.02
(4,187)	1:A:75:SER:CB	1:A:54:ARG:H	20	13.95	0.9	13.92
(4,15)	1:A:26:CYS:CB	1:A:54:ARG:H	20	13.93	1.36	13.9
(4,31)	1:A:26:CYS:CB	1:A:75:SER:H	20	13.87	1.95	14.68
(4,192)	1:A:75:SER:CB	1:A:101:ASP:H	20	13.87	2.06	13.83
(4,214)	1:A:86:CYS:CB	1:A:42:THR:H	20	13.85	1.29	13.87
(4,160)	1:A:56:PHE:CB	1:A:105:ASP:H	20	13.75	3.62	14.02
(4,135)	1:A:56:PHE:CB	1:A:73:VAL:H	20	13.73	0.37	13.9
(4,33)	1:A:26:CYS:CB	1:A:77:GLY:H	20	13.68	2.46	14.9
(4,191)	1:A:75:SER:CB	1:A:100:LYS:H	20	13.52	1.53	13.48
(4,193)	1:A:75:SER:CB	1:A:102:ARG:H	20	13.49	2.77	14.52
(4,32)	1:A:26:CYS:CB	1:A:76:TYR:H	20	13.49	1.97	14.34
(4,194)	1:A:75:SER:CB	1:A:103:SER:H	20	13.34	3.05	14.06
(1,309)	1:A:49:GLN:CB	1:A:39:VAL:H	20	13.34	0.58	13.22
(4,64)	1:A:49:GLN:CB	1:A:37:THR:H	20	13.3	0.34	13.21
(4,227)	1:A:86:CYS:CB	1:A:58:TYR:H	20	13.2	0.33	13.18
(4,14)	1:A:26:CYS:CB	1:A:53:GLN:H	20	13.14	0.96	12.97
(1,327)	1:A:75:SER:CB	1:A:61:GLN:H	20	13.12	0.25	13.1
(4,137)	1:A:56:PHE:CB	1:A:75:SER:H	20	13.1	0.14	13.14
(4,226)	1:A:86:CYS:CB	1:A:55:LYS:H	20	13.08	0.67	13.2
(4,13)	1:A:26:CYS:CB	1:A:52:ILE:H	20	13.06	0.99	13.01

*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)
(4,119)	1:A:56:PHE:CB	1:A:30:ALA:H	20	12.97	0.71	13.05
(4,186)	1:A:75:SER:CB	1:A:53:GLN:H	20	12.97	0.66	13.06
(4,62)	1:A:49:GLN:CB	1:A:35:VAL:H	20	12.86	0.41	12.83
(4,54)	1:A:49:GLN:CB	1:A:24:ALA:H	20	12.72	0.57	12.68
(4,145)	1:A:56:PHE:CB	1:A:85:LYS:H	20	12.61	0.29	12.66
(4,184)	1:A:75:SER:CB	1:A:51:PHE:H	20	12.58	1.05	12.66
(1,317)	1:A:56:PHE:CB	1:A:70:ALA:H	20	12.5	0.17	12.49
(4,72)	1:A:49:GLN:CB	1:A:77:GLY:H	20	12.49	1.57	12.92
(4,3)	1:A:26:CYS:CB	1:A:40:THR:H	20	12.46	0.27	12.43
(4,161)	1:A:56:PHE:CB	1:A:106:GLN:H	20	12.42	4.34	13.06
(4,65)	1:A:49:GLN:CB	1:A:38:PHE:H	20	12.28	0.33	12.31
(4,134)	1:A:56:PHE:CB	1:A:72:SER:H	20	12.16	0.1	12.16
(1,315)	1:A:56:PHE:CB	1:A:46:PHE:H	20	12.13	0.48	12.26
(4,213)	1:A:86:CYS:CB	1:A:41:GLY:H	20	12.05	1.42	11.86
(1,310)	1:A:49:GLN:CB	1:A:40:THR:H	20	11.97	0.51	11.78
(4,120)	1:A:56:PHE:CB	1:A:31:PHE:H	20	11.86	1.11	12.29
(4,164)	1:A:75:SER:CB	1:A:26:CYS:H	20	11.73	1.15	11.82
(4,181)	1:A:75:SER:CB	1:A:48:LEU:H	20	11.6	1.09	11.76
(4,162)	1:A:56:PHE:CB	1:A:107:ARG:H	20	11.55	4.4	11.9
(4,4)	1:A:26:CYS:CB	1:A:41:GLY:H	20	11.54	0.28	11.54
(4,2)	1:A:26:CYS:CB	1:A:39:VAL:H	20	11.38	0.13	11.37
(4,71)	1:A:49:GLN:CB	1:A:76:TYR:H	20	11.31	1.45	11.58
(1,316)	1:A:56:PHE:CB	1:A:47:GLY:H	20	11.15	0.32	11.26
(4,63)	1:A:49:GLN:CB	1:A:36:PHE:H	20	11.14	0.41	10.93
(1,303)	1:A:26:CYS:CB	1:A:37:THR:H	20	11.06	0.23	11.1
(4,182)	1:A:75:SER:CB	1:A:49:GLN:H	20	10.95	1.1	11.24
(4,165)	1:A:75:SER:CB	1:A:27:GLN:H	20	10.92	0.89	10.99
(4,131)	1:A:56:PHE:CB	1:A:43:GLY:H	20	10.92	0.33	10.98
(4,45)	1:A:26:CYS:CB	1:A:108:SER:H	20	10.86	4.71	10.03
(4,12)	1:A:26:CYS:CB	1:A:51:PHE:H	20	10.86	1.31	10.82
(4,133)	1:A:56:PHE:CB	1:A:71:GLY:H	20	10.76	0.26	10.72
(4,163)	1:A:56:PHE:CB	1:A:108:SER:H	20	10.62	5.05	10.23
(4,183)	1:A:75:SER:CB	1:A:50:MET:H	20	10.4	0.95	10.58
(4,35)	1:A:26:CYS:CB	1:A:80:ARG:H	20	10.29	2.4	11.5
(4,34)	1:A:26:CYS:CB	1:A:79:THR:H	20	10.19	2.02	11.15
(4,55)	1:A:49:GLN:CB	1:A:26:CYS:H	20	10.09	0.64	10.06
(4,178)	1:A:75:SER:CB	1:A:44:MET:H	20	10.01	1.13	10.37
(4,212)	1:A:86:CYS:CB	1:A:40:THR:H	20	9.98	1.08	9.64
(4,36)	1:A:26:CYS:CB	1:A:81:VAL:H	20	9.95	2.76	11.24
(1,332)	1:A:86:CYS:CB	1:A:19:GLY:H	20	9.9	0.92	10.38
(1,333)	1:A:86:CYS:CB	1:A:20:LEU:H	20	9.83	0.67	10.13
(4,196)	1:A:86:CYS:CB	1:A:16:LYS:H	20	9.83	3.07	11.0

*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)
(4,121)	1:A:56:PHE:CB	1:A:32:MET:H	20	9.81	0.88	10.02
(4,1)	1:A:26:CYS:CB	1:A:38:PHE:H	20	9.75	0.15	9.73
(4,132)	1:A:56:PHE:CB	1:A:44:MET:H	20	9.72	0.36	9.83
(4,180)	1:A:75:SER:CB	1:A:47:GLY:H	20	9.53	1.14	9.73
(4,144)	1:A:56:PHE:CB	1:A:83:SER:H	20	9.36	0.22	9.41
(4,197)	1:A:86:CYS:CB	1:A:17:HIS:H	20	9.36	2.36	9.54
(4,195)	1:A:86:CYS:CB	1:A:15:ALA:H	20	9.28	3.25	10.66
(4,10)	1:A:26:CYS:CB	1:A:49:GLN:H	20	9.27	0.64	9.27
(4,44)	1:A:26:CYS:CB	1:A:107:ARG:H	20	9.21	4.67	8.8
(4,166)	1:A:75:SER:CB	1:A:28:SER:H	20	9.19	0.6	9.41
(4,11)	1:A:26:CYS:CB	1:A:50:MET:H	20	9.17	1.03	8.89
(1,308)	1:A:26:CYS:CB	1:A:95:THR:H	20	9.08	1.13	9.22
(4,122)	1:A:56:PHE:CB	1:A:33:LYS:H	20	8.91	0.53	9.13
(4,167)	1:A:75:SER:CB	1:A:30:ALA:H	20	8.9	1.01	9.25
(1,340)	1:A:86:CYS:CB	1:A:95:THR:H	20	8.87	0.18	8.86
(4,43)	1:A:26:CYS:CB	1:A:106:GLN:H	20	8.82	4.34	8.41
(4,123)	1:A:56:PHE:CB	1:A:34:GLY:H	20	8.64	0.57	8.67
(1,314)	1:A:49:GLN:CB	1:A:71:GLY:H	20	8.56	0.88	8.57
(4,211)	1:A:86:CYS:CB	1:A:39:VAL:H	20	8.49	1.72	8.1
(1,334)	1:A:86:CYS:CB	1:A:21:GLY:H	20	8.47	1.12	8.22
(4,9)	1:A:26:CYS:CB	1:A:48:LEU:H	20	8.31	0.76	8.36
(4,177)	1:A:75:SER:CB	1:A:43:GLY:H	20	8.27	1.2	8.68
(4,238)	1:A:86:CYS:CB	1:A:98:LEU:H	20	8.12	0.52	8.27
(4,70)	1:A:49:GLN:CB	1:A:74:VAL:H	20	8.11	1.26	8.36
(4,179)	1:A:75:SER:CB	1:A:46:PHE:H	20	8.09	1.01	8.22
(4,210)	1:A:86:CYS:CB	1:A:38:PHE:H	20	8.05	1.87	8.07
(1,313)	1:A:49:GLN:CB	1:A:70:ALA:H	20	8.0	1.31	8.25
(1,305)	1:A:26:CYS:CB	1:A:91:LEU:H	20	7.94	1.42	8.36
(4,143)	1:A:56:PHE:CB	1:A:82:GLU:H	20	7.91	0.29	7.96
(4,228)	1:A:86:CYS:CB	1:A:62:TRP:H	20	7.71	0.15	7.69
(4,142)	1:A:56:PHE:CB	1:A:81:VAL:H	20	7.53	0.25	7.59
(4,176)	1:A:75:SER:CB	1:A:42:THR:H	20	7.43	1.19	7.37
(1,307)	1:A:26:CYS:CB	1:A:94:GLU:H	20	7.33	1.46	7.13
(4,209)	1:A:86:CYS:CB	1:A:37:THR:H	20	7.26	1.09	7.26
(4,56)	1:A:49:GLN:CB	1:A:28:SER:H	20	7.16	0.58	7.02
(4,168)	1:A:75:SER:CB	1:A:34:GLY:H	20	7.03	1.2	7.28
(4,41)	1:A:26:CYS:CB	1:A:104:THR:H	20	7.02	4.31	5.57
(4,236)	1:A:86:CYS:CB	1:A:96:GLY:H	20	6.98	0.34	7.02
(4,175)	1:A:75:SER:CB	1:A:41:GLY:H	20	6.98	1.01	7.18
(4,124)	1:A:56:PHE:CB	1:A:35:VAL:H	20	6.98	1.05	7.35
(4,37)	1:A:26:CYS:CB	1:A:83:SER:H	20	6.94	1.99	7.97
(4,241)	1:A:86:CYS:CB	1:A:103:SER:H	20	6.87	2.52	7.06

*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)
(1,306)	1:A:26:CYS:CB	1:A:93:LEU:H	20	6.87	1.39	6.98
(4,42)	1:A:26:CYS:CB	1:A:105:ASP:H	20	6.86	4.44	5.35
(4,237)	1:A:86:CYS:CB	1:A:97:GLN:H	20	6.85	0.21	6.84
(1,339)	1:A:86:CYS:CB	1:A:94:GLU:H	20	6.72	0.18	6.72
(1,304)	1:A:26:CYS:CB	1:A:90:TRP:H	20	6.59	1.26	6.86
(4,69)	1:A:49:GLN:CB	1:A:72:SER:H	20	6.48	1.3	6.73
(4,141)	1:A:56:PHE:CB	1:A:80:ARG:H	20	6.14	0.23	6.18
(4,172)	1:A:75:SER:CB	1:A:38:PHE:H	20	6.12	1.52	6.54
(4,171)	1:A:75:SER:CB	1:A:37:THR:H	20	5.99	1.08	6.13
(4,40)	1:A:26:CYS:CB	1:A:103:SER:H	20	5.89	4.38	4.26
(4,8)	1:A:26:CYS:CB	1:A:47:GLY:H	20	5.85	0.9	5.7
(4,229)	1:A:86:CYS:CB	1:A:63:SER:H	20	5.83	0.22	5.81
(1,312)	1:A:49:GLN:CB	1:A:66:VAL:H	20	5.76	0.99	5.56
(4,240)	1:A:86:CYS:CB	1:A:102:ARG:H	20	5.71	2.16	6.3
(4,68)	1:A:49:GLN:CB	1:A:69:VAL:H	20	5.7	1.43	5.86
(4,169)	1:A:75:SER:CB	1:A:35:VAL:H	20	5.67	1.35	6.44
(1,311)	1:A:49:GLN:CB	1:A:65:LEU:H	20	5.53	1.34	5.72
(4,174)	1:A:75:SER:CB	1:A:40:THR:H	20	5.38	0.87	5.42
(4,208)	1:A:86:CYS:CB	1:A:36:PHE:H	20	5.38	1.2	5.0
(4,39)	1:A:26:CYS:CB	1:A:88:ASN:H	20	5.31	2.13	6.28
(4,125)	1:A:56:PHE:CB	1:A:36:PHE:H	20	5.21	0.65	5.25
(4,57)	1:A:49:GLN:CB	1:A:30:ALA:H	20	5.13	0.35	5.07
(4,173)	1:A:75:SER:CB	1:A:39:VAL:H	20	4.93	1.26	5.34
(4,170)	1:A:75:SER:CB	1:A:36:PHE:H	20	4.86	0.54	4.73
(4,7)	1:A:26:CYS:CB	1:A:46:PHE:H	20	4.74	0.55	4.78
(4,126)	1:A:56:PHE:CB	1:A:37:THR:H	20	4.7	0.4	4.72
(4,207)	1:A:86:CYS:CB	1:A:35:VAL:H	20	4.43	2.0	3.95
(4,239)	1:A:86:CYS:CB	1:A:101:ASP:H	20	4.4	1.87	4.58
(4,206)	1:A:86:CYS:CB	1:A:34:GLY:H	20	4.38	1.64	4.36
(4,67)	1:A:49:GLN:CB	1:A:68:VAL:H	20	4.26	1.18	4.7
(4,140)	1:A:56:PHE:CB	1:A:79:THR:H	20	4.08	0.19	4.12
(4,230)	1:A:86:CYS:CB	1:A:64:LEU:H	20	4.04	0.16	4.06
(4,127)	1:A:56:PHE:CB	1:A:38:PHE:H	20	4.03	0.72	4.2
(4,58)	1:A:49:GLN:CB	1:A:31:PHE:H	20	3.77	0.38	3.76
(4,198)	1:A:86:CYS:CB	1:A:23:TYR:H	20	3.72	0.67	3.96
(4,231)	1:A:86:CYS:CB	1:A:65:LEU:H	20	3.55	0.09	3.56
(4,205)	1:A:86:CYS:CB	1:A:33:LYS:H	20	3.34	1.01	3.06
(4,6)	1:A:26:CYS:CB	1:A:44:MET:H	20	3.22	0.64	3.2
(4,66)	1:A:49:GLN:CB	1:A:67:ALA:H	20	2.85	1.32	2.8
(4,199)	1:A:86:CYS:CB	1:A:24:ALA:H	20	2.19	1.06	2.11
(4,128)	1:A:56:PHE:CB	1:A:39:VAL:H	20	2.08	1.05	2.33
(1,55)	1:A:36:PHE:H	1:A:38:PHE:H	20	1.98	0.05	2.0

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)
(4,200)	1:A:86:CYS:CB	1:A:26:CYS:H	20	1.91	1.06	1.98
(4,59)	1:A:49:GLN:CB	1:A:32:MET:H	20	1.81	0.48	1.69
(1,144)	1:A:101:ASP:H	1:A:102:ARG:H	20	1.62	0.17	1.66
(1,146)	1:A:102:ARG:H	1:A:101:ASP:H	20	1.62	0.17	1.66
(1,147)	1:A:103:SER:H	1:A:102:ARG:H	20	1.39	0.32	1.53
(1,1)	1:A:4:LEU:H	1:A:5:GLY:H	20	1.24	0.58	1.32
(1,2)	1:A:5:GLY:H	1:A:4:LEU:H	20	1.24	0.58	1.32
(1,65)	1:A:44:MET:H	1:A:45:ALA:H	20	0.97	0.11	1.01
(1,68)	1:A:45:ALA:H	1:A:44:MET:H	20	0.97	0.11	1.01
(1,151)	1:A:97:GLN:H	1:A:98:LEU:H	20	0.83	0.37	1.04
(1,63)	1:A:43:GLY:H	1:A:42:THR:H	20	0.83	0.43	0.76
(1,67)	1:A:42:THR:H	1:A:43:GLY:H	20	0.83	0.43	0.76
(1,69)	1:A:45:ALA:H	1:A:46:PHE:H	20	0.82	0.06	0.84
(1,70)	1:A:46:PHE:H	1:A:45:ALA:H	20	0.82	0.06	0.84
(1,51)	1:A:35:VAL:H	1:A:34:GLY:H	20	0.8	0.06	0.82
(1,13)	1:A:13:VAL:H	1:A:12:ALA:H	20	0.77	0.08	0.76
(1,43)	1:A:30:ALA:H	1:A:31:PHE:H	20	0.76	0.06	0.79
(1,45)	1:A:31:PHE:H	1:A:30:ALA:H	20	0.76	0.06	0.79
(1,24)	1:A:21:GLY:H	1:A:22:GLU:H	20	0.74	0.07	0.76
(1,28)	1:A:21:GLY:H	1:A:22:GLU:H	20	0.74	0.07	0.76
(1,29)	1:A:22:GLU:H	1:A:21:GLY:H	20	0.74	0.07	0.76
(1,54)	1:A:36:PHE:H	1:A:37:THR:H	20	0.74	0.07	0.76
(1,56)	1:A:37:THR:H	1:A:36:PHE:H	20	0.74	0.07	0.76
(1,107)	1:A:77:GLY:H	1:A:76:TYR:H	20	0.74	0.03	0.74
(1,108)	1:A:76:TYR:H	1:A:77:GLY:H	20	0.74	0.03	0.74
(1,44)	1:A:32:MET:H	1:A:31:PHE:H	20	0.73	0.1	0.76
(1,46)	1:A:31:PHE:H	1:A:32:MET:H	20	0.73	0.1	0.76
(1,76)	1:A:51:PHE:H	1:A:52:ILE:H	20	0.72	0.06	0.72
(1,79)	1:A:52:ILE:H	1:A:51:PHE:H	20	0.72	0.06	0.72
(1,119)	1:A:84:GLU:H	1:A:85:LYS:H	20	0.72	0.06	0.74
(4,60)	1:A:49:GLN:CB	1:A:33:LYS:H	20	0.72	0.46	0.57
(1,100)	1:A:69:VAL:H	1:A:70:ALA:H	20	0.72	0.02	0.72
(1,101)	1:A:70:ALA:H	1:A:69:VAL:H	20	0.72	0.02	0.72
(1,47)	1:A:32:MET:H	1:A:33:LYS:H	20	0.71	0.07	0.73
(1,49)	1:A:33:LYS:H	1:A:32:MET:H	20	0.71	0.07	0.73
(1,73)	1:A:49:GLN:H	1:A:48:LEU:H	20	0.7	0.05	0.7
(1,74)	1:A:49:GLN:H	1:A:50:MET:H	20	0.7	0.08	0.72
(1,75)	1:A:50:MET:H	1:A:49:GLN:H	20	0.7	0.08	0.72
(1,130)	1:A:91:LEU:H	1:A:92:PHE:H	20	0.7	0.06	0.71
(1,131)	1:A:92:PHE:H	1:A:91:LEU:H	20	0.7	0.06	0.71
(1,71)	1:A:46:PHE:H	1:A:47:GLY:H	20	0.69	0.04	0.69
(1,72)	1:A:47:GLY:H	1:A:46:PHE:H	20	0.69	0.04	0.69

*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)
(1,7)	1:A:8:ARG:H	1:A:9:VAL:H	20	0.69	0.07	0.7
(1,8)	1:A:9:VAL:H	1:A:8:ARG:H	20	0.69	0.07	0.7
(1,30)	1:A:22:GLU:H	1:A:23:TYR:H	20	0.69	0.06	0.7
(1,31)	1:A:23:TYR:H	1:A:22:GLU:H	20	0.69	0.06	0.7
(1,59)	1:A:39:VAL:H	1:A:38:PHE:H	20	0.69	0.09	0.7
(1,60)	1:A:38:PHE:H	1:A:39:VAL:H	20	0.69	0.09	0.7
(1,133)	1:A:92:PHE:H	1:A:93:LEU:H	20	0.69	0.12	0.72
(1,134)	1:A:93:LEU:H	1:A:92:PHE:H	20	0.69	0.12	0.72
(1,16)	1:A:15:ALA:H	1:A:14:ALA:H	20	0.68	0.05	0.68
(1,25)	1:A:14:ALA:H	1:A:15:ALA:H	20	0.68	0.05	0.68
(1,124)	1:A:88:ASN:H	1:A:89:LEU:H	20	0.68	0.05	0.7
(1,126)	1:A:89:LEU:H	1:A:88:ASN:H	20	0.68	0.05	0.7
(1,123)	1:A:87:ASN:H	1:A:88:ASN:H	20	0.68	0.06	0.68
(1,125)	1:A:88:ASN:H	1:A:87:ASN:H	20	0.68	0.06	0.68
(1,135)	1:A:93:LEU:H	1:A:94:GLU:H	20	0.68	0.09	0.7
(1,136)	1:A:94:GLU:H	1:A:93:LEU:H	20	0.68	0.09	0.7
(1,32)	1:A:23:TYR:H	1:A:24:ALA:H	20	0.67	0.07	0.66
(1,33)	1:A:24:ALA:H	1:A:25:ALA:H	20	0.67	0.09	0.7
(1,34)	1:A:24:ALA:H	1:A:23:TYR:H	20	0.67	0.07	0.66
(1,35)	1:A:25:ALA:H	1:A:24:ALA:H	20	0.67	0.09	0.7
(1,36)	1:A:25:ALA:H	1:A:26:CYS:H	20	0.66	0.07	0.64
(1,127)	1:A:89:LEU:H	1:A:90:TRP:H	20	0.66	0.07	0.68
(1,128)	1:A:90:TRP:H	1:A:89:LEU:H	20	0.66	0.07	0.68
(1,105)	1:A:73:VAL:H	1:A:72:SER:H	20	0.65	0.02	0.64
(1,41)	1:A:28:SER:H	1:A:29:HIS:H	20	0.65	0.06	0.65
(1,42)	1:A:29:HIS:H	1:A:28:SER:H	20	0.65	0.06	0.65
(1,48)	1:A:33:LYS:H	1:A:34:GLY:H	20	0.64	0.08	0.62
(1,50)	1:A:34:GLY:H	1:A:33:LYS:H	20	0.64	0.08	0.62
(1,4)	1:A:7:SER:H	1:A:8:ARG:H	20	0.64	0.06	0.64
(1,6)	1:A:8:ARG:H	1:A:7:SER:H	20	0.64	0.06	0.64
(1,39)	1:A:28:SER:H	1:A:27:GLN:H	20	0.64	0.09	0.66
(1,40)	1:A:27:GLN:H	1:A:28:SER:H	20	0.64	0.09	0.66
(1,117)	1:A:84:GLU:H	1:A:83:SER:H	20	0.64	0.07	0.64
(1,82)	1:A:54:ARG:H	1:A:55:LYS:H	20	0.63	0.03	0.62
(1,83)	1:A:55:LYS:H	1:A:54:ARG:H	20	0.63	0.03	0.62
(1,129)	1:A:90:TRP:H	1:A:91:LEU:H	20	0.63	0.06	0.64
(1,132)	1:A:91:LEU:H	1:A:90:TRP:H	20	0.63	0.06	0.64
(1,137)	1:A:94:GLU:H	1:A:95:THR:H	20	0.63	0.1	0.65
(1,138)	1:A:95:THR:H	1:A:94:GLU:H	20	0.63	0.1	0.65
(1,88)	1:A:63:SER:H	1:A:64:LEU:H	20	0.62	0.06	0.62
(1,89)	1:A:64:LEU:H	1:A:63:SER:H	20	0.62	0.06	0.62
(1,22)	1:A:20:LEU:H	1:A:21:GLY:H	20	0.62	0.19	0.65

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)
(1,23)	1:A:21:GLY:H	1:A:20:LEU:H	20	0.62	0.19	0.65
(1,26)	1:A:20:LEU:H	1:A:21:GLY:H	20	0.62	0.19	0.65
(1,27)	1:A:21:GLY:H	1:A:20:LEU:H	20	0.62	0.19	0.65
(1,52)	1:A:35:VAL:H	1:A:36:PHE:H	20	0.62	0.05	0.61
(1,53)	1:A:36:PHE:H	1:A:35:VAL:H	20	0.62	0.05	0.61
(1,14)	1:A:14:ALA:H	1:A:13:VAL:H	20	0.62	0.08	0.59
(1,15)	1:A:13:VAL:H	1:A:14:ALA:H	20	0.62	0.08	0.59
(1,61)	1:A:39:VAL:H	1:A:40:THR:H	20	0.6	0.11	0.6
(1,62)	1:A:40:THR:H	1:A:39:VAL:H	20	0.6	0.11	0.6
(1,103)	1:A:71:GLY:H	1:A:72:SER:H	20	0.6	0.04	0.59
(1,57)	1:A:37:THR:H	1:A:38:PHE:H	20	0.6	0.05	0.59
(1,58)	1:A:38:PHE:H	1:A:37:THR:H	20	0.6	0.05	0.59
(1,92)	1:A:65:LEU:H	1:A:66:VAL:H	20	0.59	0.03	0.59
(1,93)	1:A:66:VAL:H	1:A:65:LEU:H	20	0.59	0.03	0.59
(1,86)	1:A:62:TRP:H	1:A:63:SER:H	20	0.59	0.09	0.59
(1,87)	1:A:63:SER:H	1:A:62:TRP:H	20	0.59	0.09	0.59
(1,10)	1:A:11:ASP:H	1:A:10:ASP:H	20	0.58	0.04	0.59
(1,121)	1:A:86:CYS:H	1:A:87:ASN:H	20	0.58	0.07	0.58
(1,122)	1:A:87:ASN:H	1:A:86:CYS:H	20	0.58	0.07	0.58
(1,9)	1:A:9:VAL:H	1:A:10:ASP:H	20	0.57	0.07	0.57
(1,11)	1:A:12:ALA:H	1:A:11:ASP:H	20	0.57	0.12	0.52
(1,12)	1:A:11:ASP:H	1:A:12:ALA:H	20	0.57	0.12	0.52
(1,64)	1:A:43:GLY:H	1:A:44:MET:H	20	0.56	0.08	0.53
(1,66)	1:A:44:MET:H	1:A:43:GLY:H	20	0.56	0.08	0.53
(1,112)	1:A:80:ARG:H	1:A:81:VAL:H	20	0.55	0.03	0.55
(1,114)	1:A:83:SER:H	1:A:82:GLU:H	20	0.54	0.06	0.55
(1,115)	1:A:82:GLU:H	1:A:83:SER:H	20	0.54	0.06	0.55
(1,118)	1:A:85:LYS:H	1:A:86:CYS:H	20	0.54	0.06	0.55
(1,120)	1:A:86:CYS:H	1:A:85:LYS:H	20	0.54	0.06	0.55
(1,96)	1:A:68:VAL:H	1:A:69:VAL:H	20	0.54	0.02	0.54
(1,99)	1:A:69:VAL:H	1:A:68:VAL:H	20	0.54	0.02	0.54
(1,106)	1:A:78:VAL:H	1:A:79:THR:H	20	0.54	0.05	0.55
(1,109)	1:A:78:VAL:H	1:A:79:THR:H	20	0.54	0.05	0.55
(1,110)	1:A:79:THR:H	1:A:78:VAL:H	20	0.54	0.05	0.55
(1,113)	1:A:81:VAL:H	1:A:82:GLU:H	20	0.54	0.06	0.55
(1,116)	1:A:82:GLU:H	1:A:81:VAL:H	20	0.54	0.06	0.55
(1,37)	1:A:27:GLN:H	1:A:26:CYS:H	20	0.54	0.03	0.55
(1,38)	1:A:26:CYS:H	1:A:27:GLN:H	20	0.54	0.03	0.55
(1,102)	1:A:71:GLY:H	1:A:70:ALA:H	20	0.54	0.03	0.53
(1,17)	1:A:15:ALA:H	1:A:16:LYS:H	20	0.52	0.05	0.53
(1,90)	1:A:64:LEU:H	1:A:65:LEU:H	20	0.51	0.07	0.47
(1,91)	1:A:65:LEU:H	1:A:64:LEU:H	20	0.51	0.07	0.47

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)
(1,77)	1:A:53:GLN:H	1:A:52:ILE:H	20	0.5	0.06	0.49
(1,78)	1:A:52:ILE:H	1:A:53:GLN:H	20	0.5	0.06	0.49
(1,104)	1:A:80:ARG:H	1:A:79:THR:H	20	0.5	0.03	0.49
(1,111)	1:A:80:ARG:H	1:A:79:THR:H	20	0.5	0.03	0.49
(1,80)	1:A:53:GLN:H	1:A:54:ARG:H	20	0.49	0.07	0.49
(1,81)	1:A:54:ARG:H	1:A:53:GLN:H	20	0.49	0.07	0.49
(1,3)	1:A:7:SER:H	1:A:6:LEU:H	20	0.48	0.16	0.51
(1,5)	1:A:6:LEU:H	1:A:7:SER:H	20	0.48	0.16	0.51
(1,95)	1:A:67:ALA:H	1:A:66:VAL:H	20	0.47	0.01	0.47
(1,97)	1:A:66:VAL:H	1:A:67:ALA:H	20	0.47	0.01	0.47
(1,150)	1:A:36:PHE:H	1:A:34:GLY:H	20	0.47	0.13	0.43
(1,94)	1:A:67:ALA:H	1:A:68:VAL:H	20	0.45	0.01	0.45
(1,98)	1:A:68:VAL:H	1:A:67:ALA:H	20	0.45	0.01	0.45
(3,39)	1:A:69:VAL:O	1:A:73:VAL:N	20	0.3	0.02	0.3
(3,26)	1:A:45:ALA:O	1:A:49:GLN:N	20	0.29	0.02	0.3
(3,47)	1:A:77:GLY:O	1:A:81:VAL:N	20	0.29	0.01	0.29
(3,50)	1:A:80:ARG:O	1:A:84:GLU:N	20	0.28	0.02	0.28
(3,43)	1:A:73:VAL:O	1:A:77:GLY:N	20	0.28	0.04	0.29
(1,18)	1:A:17:HIS:H	1:A:16:LYS:H	20	0.27	0.06	0.29
(1,19)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:HIS:H	20	0.27	0.06	0.29
(3,54)	1:A:84:GLU:O	1:A:88:ASN:N	20	0.25	0.02	0.25
(3,13)	1:A:26:CYS:O	1:A:30:ALA:N	20	0.24	0.04	0.24
(3,21)	1:A:34:GLY:O	1:A:38:PHE:N	20	0.22	0.03	0.22
(3,4)	1:A:9:VAL:O	1:A:13:VAL:N	20	0.2	0.06	0.2
(4,38)	1:A:26:CYS:CB	1:A:85:LYS:H	19	6.93	2.05	7.86
(4,201)	1:A:86:CYS:CB	1:A:27:GLN:H	19	1.27	1.12	1.06
(4,5)	1:A:26:CYS:CB	1:A:43:GLY:H	19	0.87	0.64	0.75
(4,129)	1:A:56:PHE:CB	1:A:40:THR:H	19	0.83	0.7	0.77
(1,140)	1:A:96:GLY:H	1:A:97:GLN:H	19	0.32	0.12	0.29
(1,142)	1:A:97:GLN:H	1:A:96:GLY:H	19	0.32	0.12	0.29
(3,51)	1:A:81:VAL:O	1:A:85:LYS:N	19	0.27	0.03	0.28
(3,29)	1:A:48:LEU:O	1:A:52:ILE:N	19	0.27	0.04	0.27
(4,202)	1:A:86:CYS:CB	1:A:30:ALA:H	18	2.16	0.91	1.85
(1,148)	1:A:103:SER:H	1:A:104:THR:H	18	1.45	0.51	1.66
(1,149)	1:A:104:THR:H	1:A:103:SER:H	18	1.45	0.51	1.66
(1,20)	1:A:19:GLY:H	1:A:20:LEU:H	18	1.3	0.53	1.41
(1,21)	1:A:20:LEU:H	1:A:19:GLY:H	18	1.3	0.53	1.41
(1,84)	1:A:55:LYS:H	1:A:56:PHE:H	18	0.45	0.12	0.45
(1,85)	1:A:56:PHE:H	1:A:55:LYS:H	18	0.45	0.12	0.45
(1,139)	1:A:96:GLY:H	1:A:95:THR:H	18	0.31	0.14	0.28
(1,141)	1:A:95:THR:H	1:A:96:GLY:H	18	0.31	0.14	0.28
(3,17)	1:A:30:ALA:O	1:A:34:GLY:N	18	0.25	0.04	0.25

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)	Median (Å)
(3,23)	1:A:36:PHE:O	1:A:40:THR:N	18	0.19	0.05	0.19
(4,204)	1:A:86:CYS:CB	1:A:32:MET:H	17	1.97	1.5	1.77
(1,143)	1:A:101:ASP:H	1:A:100:LYS:H	17	0.91	0.56	1.04
(1,145)	1:A:100:LYS:H	1:A:101:ASP:H	17	0.91	0.56	1.04
(4,203)	1:A:86:CYS:CB	1:A:31:PHE:H	16	2.12	1.85	1.46
(3,20)	1:A:33:LYS:O	1:A:37:THR:N	16	0.21	0.05	0.23
(3,58)	1:A:88:ASN:O	1:A:92:PHE:N	16	0.18	0.04	0.19
(3,46)	1:A:76:TYR:O	1:A:80:ARG:N	16	0.14	0.02	0.14
(3,5)	1:A:10:ASP:O	1:A:14:ALA:N	15	0.14	0.02	0.14
(3,14)	1:A:27:GLN:O	1:A:31:PHE:N	14	0.27	0.04	0.29
(3,25)	1:A:44:MET:O	1:A:48:LEU:N	14	0.25	0.03	0.25
(3,3)	1:A:8:ARG:O	1:A:12:ALA:N	14	0.17	0.05	0.16
(3,42)	1:A:72:SER:O	1:A:76:TYR:N	14	0.16	0.04	0.15
(3,18)	1:A:31:PHE:O	1:A:35:VAL:N	13	0.22	0.08	0.25
(3,57)	1:A:87:ASN:O	1:A:91:LEU:N	13	0.2	0.04	0.22
(3,28)	1:A:47:GLY:O	1:A:51:PHE:N	13	0.19	0.05	0.19
(3,56)	1:A:86:CYS:O	1:A:90:TRP:N	13	0.16	0.04	0.15
(3,12)	1:A:25:ALA:O	1:A:29:HIS:N	12	0.21	0.05	0.22
(3,19)	1:A:32:MET:O	1:A:36:PHE:N	12	0.18	0.04	0.16
(3,9)	1:A:22:GLU:O	1:A:26:CYS:N	11	0.22	0.05	0.26
(3,24)	1:A:43:GLY:O	1:A:47:GLY:N	11	0.22	0.03	0.21
(3,8)	1:A:21:GLY:O	1:A:25:ALA:N	11	0.21	0.06	0.21
(3,6)	1:A:11:ASP:O	1:A:15:ALA:N	11	0.16	0.03	0.17
(3,16)	1:A:29:HIS:O	1:A:33:LYS:N	10	0.22	0.05	0.23
(3,60)	1:A:90:TRP:O	1:A:94:GLU:N	10	0.2	0.05	0.21
(3,11)	1:A:24:ALA:O	1:A:28:SER:N	10	0.19	0.04	0.18
(3,1)	1:A:6:LEU:O	1:A:10:ASP:N	10	0.17	0.04	0.17
(3,7)	1:A:20:LEU:O	1:A:24:ALA:N	10	0.16	0.06	0.14
(3,33)	1:A:63:SER:O	1:A:67:ALA:N	10	0.14	0.02	0.15
(4,130)	1:A:56:PHE:CB	1:A:41:GLY:H	9	0.38	0.22	0.42
(3,15)	1:A:28:SER:O	1:A:32:MET:N	9	0.18	0.05	0.17
(3,30)	1:A:49:GLN:O	1:A:53:GLN:N	5	0.22	0.02	0.2
(3,53)	1:A:83:SER:O	1:A:87:ASN:N	5	0.17	0.02	0.19
(3,32)	1:A:62:TRP:O	1:A:66:VAL:N	5	0.13	0.02	0.12
(3,2)	1:A:7:SER:O	1:A:11:ASP:N	4	0.17	0.04	0.17
(3,35)	1:A:65:LEU:O	1:A:69:VAL:N	4	0.16	0.03	0.16
(3,27)	1:A:46:PHE:O	1:A:50:MET:N	4	0.14	0.03	0.13
(3,22)	1:A:35:VAL:O	1:A:39:VAL:N	3	0.19	0.02	0.18
(3,55)	1:A:85:LYS:O	1:A:89:LEU:N	3	0.17	0.05	0.14
(4,61)	1:A:49:GLN:CB	1:A:34:GLY:H	2	0.23	0.07	0.23
(3,10)	1:A:23:TYR:O	1:A:27:GLN:N	2	0.12	0.02	0.12
(3,48)	1:A:78:VAL:O	1:A:82:GLU:N	2	0.12	0.01	0.12

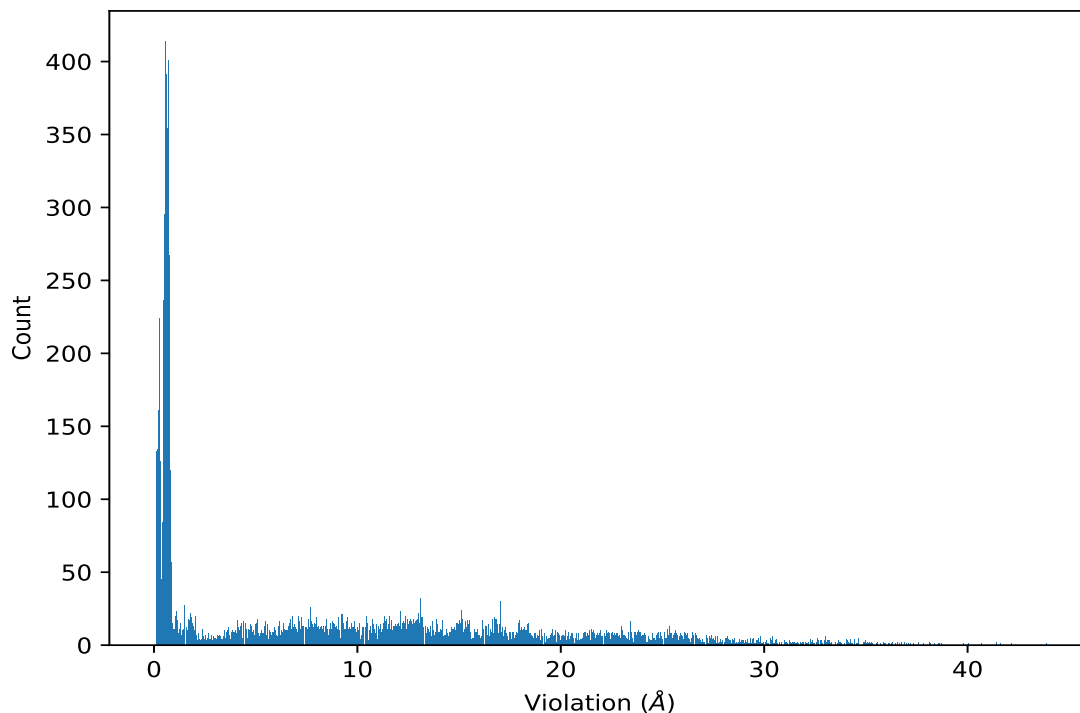


<sup>1</sup>Number of violated models, <sup>2</sup>Standard deviation

## 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)
(4,96)	1:A:56:PHE:CB	1:A:2:VAL:H	6	43.87
(4,100)	1:A:56:PHE:CB	1:A:6:LEU:H	6	42.16
(4,97)	1:A:56:PHE:CB	1:A:3:ASN:H	6	41.61
(4,99)	1:A:56:PHE:CB	1:A:5:GLY:H	6	41.42
(4,98)	1:A:56:PHE:CB	1:A:4:LEU:H	6	41.42
(4,101)	1:A:56:PHE:CB	1:A:7:SER:H	6	40.66
(4,100)	1:A:56:PHE:CB	1:A:6:LEU:H	14	40.01

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,98)	1:A:56:PHE:CB	1:A:4:LEU:H	14	39.78
(4,97)	1:A:56:PHE:CB	1:A:3:ASN:H	14	38.7
(4,96)	1:A:56:PHE:CB	1:A:2:VAL:H	20	38.64
(4,102)	1:A:56:PHE:CB	1:A:8:ARG:H	6	38.58
(4,97)	1:A:56:PHE:CB	1:A:3:ASN:H	9	38.35
(4,99)	1:A:56:PHE:CB	1:A:5:GLY:H	14	38.16
(4,99)	1:A:56:PHE:CB	1:A:5:GLY:H	9	38.12
(4,98)	1:A:56:PHE:CB	1:A:4:LEU:H	13	38.12
(4,103)	1:A:56:PHE:CB	1:A:9:VAL:H	6	37.81
(4,101)	1:A:56:PHE:CB	1:A:7:SER:H	14	37.56
(4,85)	1:A:49:GLN:CB	1:A:96:GLY:H	11	37.55
(4,96)	1:A:56:PHE:CB	1:A:2:VAL:H	17	37.33
(4,97)	1:A:56:PHE:CB	1:A:3:ASN:H	13	37.18
(4,104)	1:A:56:PHE:CB	1:A:10:ASP:H	6	37.08
(4,100)	1:A:56:PHE:CB	1:A:6:LEU:H	8	36.96
(4,97)	1:A:56:PHE:CB	1:A:3:ASN:H	20	36.87
(4,96)	1:A:56:PHE:CB	1:A:2:VAL:H	8	36.85
(4,85)	1:A:49:GLN:CB	1:A:96:GLY:H	10	36.76
(4,103)	1:A:56:PHE:CB	1:A:9:VAL:H	14	36.75
(4,87)	1:A:49:GLN:CB	1:A:98:LEU:H	10	36.69
(4,96)	1:A:56:PHE:CB	1:A:2:VAL:H	12	36.59
(4,86)	1:A:49:GLN:CB	1:A:97:GLN:H	10	36.57
(4,98)	1:A:56:PHE:CB	1:A:4:LEU:H	9	36.48
(4,86)	1:A:49:GLN:CB	1:A:97:GLN:H	11	36.3
(4,100)	1:A:56:PHE:CB	1:A:6:LEU:H	20	36.3
(4,102)	1:A:56:PHE:CB	1:A:8:ARG:H	14	36.29
(4,99)	1:A:56:PHE:CB	1:A:5:GLY:H	13	36.16
(4,87)	1:A:49:GLN:CB	1:A:98:LEU:H	11	36.14
(4,84)	1:A:49:GLN:CB	1:A:95:THR:H	11	35.97
(4,96)	1:A:56:PHE:CB	1:A:2:VAL:H	13	35.9
(4,85)	1:A:49:GLN:CB	1:A:96:GLY:H	6	35.88
(4,97)	1:A:56:PHE:CB	1:A:3:ASN:H	19	35.87
(4,98)	1:A:56:PHE:CB	1:A:4:LEU:H	20	35.71
(4,104)	1:A:56:PHE:CB	1:A:10:ASP:H	14	35.57
(4,101)	1:A:56:PHE:CB	1:A:7:SER:H	8	35.56
(4,98)	1:A:56:PHE:CB	1:A:4:LEU:H	12	35.54
(4,84)	1:A:49:GLN:CB	1:A:95:THR:H	6	35.34
(4,97)	1:A:56:PHE:CB	1:A:3:ASN:H	12	35.27
(4,84)	1:A:49:GLN:CB	1:A:95:THR:H	10	35.25
(4,85)	1:A:49:GLN:CB	1:A:96:GLY:H	15	35.22
(4,85)	1:A:49:GLN:CB	1:A:96:GLY:H	9	35.18
(4,84)	1:A:49:GLN:CB	1:A:95:THR:H	20	35.18

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,100)	1:A:56:PHE:CB	1:A:6:LEU:H	13	35.14
(4,86)	1:A:49:GLN:CB	1:A:97:GLN:H	15	35.09
(4,96)	1:A:56:PHE:CB	1:A:2:VAL:H	9	35.06
(4,105)	1:A:56:PHE:CB	1:A:11:ASP:H	6	35.0
(4,97)	1:A:56:PHE:CB	1:A:3:ASN:H	17	34.99
(4,85)	1:A:49:GLN:CB	1:A:96:GLY:H	20	34.99
(4,100)	1:A:56:PHE:CB	1:A:6:LEU:H	9	34.99
(4,85)	1:A:49:GLN:CB	1:A:96:GLY:H	18	34.93
(4,84)	1:A:49:GLN:CB	1:A:95:THR:H	15	34.9
(4,86)	1:A:49:GLN:CB	1:A:97:GLN:H	6	34.87
(4,85)	1:A:49:GLN:CB	1:A:96:GLY:H	17	34.87
(4,103)	1:A:56:PHE:CB	1:A:9:VAL:H	9	34.64
(4,100)	1:A:56:PHE:CB	1:A:6:LEU:H	12	34.62
(4,86)	1:A:49:GLN:CB	1:A:97:GLN:H	20	34.61
(4,84)	1:A:49:GLN:CB	1:A:95:THR:H	9	34.61
(4,84)	1:A:49:GLN:CB	1:A:95:THR:H	17	34.61
(4,84)	1:A:49:GLN:CB	1:A:95:THR:H	18	34.55
(4,87)	1:A:49:GLN:CB	1:A:98:LEU:H	15	34.51
(4,86)	1:A:49:GLN:CB	1:A:97:GLN:H	18	34.42
(4,96)	1:A:56:PHE:CB	1:A:2:VAL:H	14	34.41
(4,85)	1:A:49:GLN:CB	1:A:96:GLY:H	5	34.4
(4,83)	1:A:49:GLN:CB	1:A:94:GLU:H	11	34.4
(4,101)	1:A:56:PHE:CB	1:A:7:SER:H	12	34.31
(4,99)	1:A:56:PHE:CB	1:A:5:GLY:H	12	34.25
(4,99)	1:A:56:PHE:CB	1:A:5:GLY:H	20	34.24
(4,86)	1:A:49:GLN:CB	1:A:97:GLN:H	17	34.24
(4,84)	1:A:49:GLN:CB	1:A:95:THR:H	5	34.23
(4,96)	1:A:56:PHE:CB	1:A:2:VAL:H	5	34.22
(4,87)	1:A:49:GLN:CB	1:A:98:LEU:H	6	34.15
(4,86)	1:A:49:GLN:CB	1:A:97:GLN:H	8	34.13
(4,101)	1:A:56:PHE:CB	1:A:7:SER:H	20	34.1
(4,86)	1:A:49:GLN:CB	1:A:97:GLN:H	9	34.07
(4,85)	1:A:49:GLN:CB	1:A:96:GLY:H	3	34.07
(4,85)	1:A:49:GLN:CB	1:A:96:GLY:H	1	34.06
(4,87)	1:A:49:GLN:CB	1:A:98:LEU:H	20	34.04
(4,87)	1:A:49:GLN:CB	1:A:98:LEU:H	18	34.03
(4,85)	1:A:49:GLN:CB	1:A:96:GLY:H	14	34.03
(4,84)	1:A:49:GLN:CB	1:A:95:THR:H	3	34.02
(4,85)	1:A:49:GLN:CB	1:A:96:GLY:H	8	33.9
(4,98)	1:A:56:PHE:CB	1:A:4:LEU:H	19	33.82
(4,84)	1:A:49:GLN:CB	1:A:95:THR:H	8	33.79
(4,104)	1:A:56:PHE:CB	1:A:10:ASP:H	8	33.75

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,86)	1:A:49:GLN:CB	1:A:97:GLN:H	5	33.72
(4,87)	1:A:49:GLN:CB	1:A:98:LEU:H	17	33.7
(4,86)	1:A:49:GLN:CB	1:A:97:GLN:H	1	33.67
(4,99)	1:A:56:PHE:CB	1:A:5:GLY:H	19	33.66
(4,84)	1:A:49:GLN:CB	1:A:95:THR:H	1	33.65
(4,101)	1:A:56:PHE:CB	1:A:7:SER:H	13	33.62
(4,99)	1:A:56:PHE:CB	1:A:5:GLY:H	8	33.52
(4,86)	1:A:49:GLN:CB	1:A:97:GLN:H	3	33.5
(4,83)	1:A:49:GLN:CB	1:A:94:GLU:H	6	33.34
(4,103)	1:A:56:PHE:CB	1:A:9:VAL:H	8	33.32
(4,106)	1:A:56:PHE:CB	1:A:12:ALA:H	6	33.25
(4,85)	1:A:49:GLN:CB	1:A:96:GLY:H	2	33.23
(4,100)	1:A:56:PHE:CB	1:A:6:LEU:H	19	33.21
(4,87)	1:A:49:GLN:CB	1:A:98:LEU:H	1	33.2
(4,103)	1:A:56:PHE:CB	1:A:9:VAL:H	19	33.17
(4,85)	1:A:49:GLN:CB	1:A:96:GLY:H	13	33.15
(4,83)	1:A:49:GLN:CB	1:A:94:GLU:H	20	33.15
(4,84)	1:A:49:GLN:CB	1:A:95:THR:H	14	33.14
(4,83)	1:A:49:GLN:CB	1:A:94:GLU:H	9	33.14
(4,83)	1:A:49:GLN:CB	1:A:94:GLU:H	15	33.14
(4,85)	1:A:49:GLN:CB	1:A:96:GLY:H	16	33.09
(4,84)	1:A:49:GLN:CB	1:A:95:THR:H	12	33.05
(4,106)	1:A:56:PHE:CB	1:A:12:ALA:H	9	33.04
(4,104)	1:A:56:PHE:CB	1:A:10:ASP:H	9	33.04
(4,105)	1:A:56:PHE:CB	1:A:11:ASP:H	14	33.03
(4,97)	1:A:56:PHE:CB	1:A:3:ASN:H	8	33.02
(4,102)	1:A:56:PHE:CB	1:A:8:ARG:H	8	33.02
(4,102)	1:A:56:PHE:CB	1:A:8:ARG:H	9	33.01
(4,83)	1:A:49:GLN:CB	1:A:94:GLU:H	10	32.97
(4,85)	1:A:49:GLN:CB	1:A:96:GLY:H	12	32.95
(4,85)	1:A:49:GLN:CB	1:A:96:GLY:H	19	32.95
(4,86)	1:A:49:GLN:CB	1:A:97:GLN:H	14	32.89
(4,84)	1:A:49:GLN:CB	1:A:95:THR:H	13	32.83
(4,102)	1:A:56:PHE:CB	1:A:8:ARG:H	19	32.82
(4,101)	1:A:56:PHE:CB	1:A:7:SER:H	9	32.81
(4,86)	1:A:49:GLN:CB	1:A:97:GLN:H	13	32.77
(4,106)	1:A:56:PHE:CB	1:A:12:ALA:H	14	32.76
(4,85)	1:A:49:GLN:CB	1:A:96:GLY:H	7	32.75
(4,86)	1:A:49:GLN:CB	1:A:97:GLN:H	2	32.66
(4,83)	1:A:49:GLN:CB	1:A:94:GLU:H	18	32.66
(4,84)	1:A:49:GLN:CB	1:A:95:THR:H	7	32.65
(4,97)	1:A:56:PHE:CB	1:A:3:ASN:H	4	32.63

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,87)	1:A:49:GLN:CB	1:A:98:LEU:H	8	32.63
(4,108)	1:A:56:PHE:CB	1:A:16:LYS:H	9	32.62
(4,96)	1:A:56:PHE:CB	1:A:2:VAL:H	4	32.6
(4,83)	1:A:49:GLN:CB	1:A:94:GLU:H	17	32.6
(4,87)	1:A:49:GLN:CB	1:A:98:LEU:H	3	32.57
(4,84)	1:A:49:GLN:CB	1:A:95:THR:H	16	32.55
(4,84)	1:A:49:GLN:CB	1:A:95:THR:H	2	32.45
(4,87)	1:A:49:GLN:CB	1:A:98:LEU:H	9	32.42
(4,83)	1:A:49:GLN:CB	1:A:94:GLU:H	5	32.39
(4,102)	1:A:56:PHE:CB	1:A:8:ARG:H	12	32.39
(4,96)	1:A:56:PHE:CB	1:A:2:VAL:H	15	32.37
(4,84)	1:A:49:GLN:CB	1:A:95:THR:H	19	32.32
(4,103)	1:A:56:PHE:CB	1:A:9:VAL:H	20	32.3
(4,87)	1:A:49:GLN:CB	1:A:98:LEU:H	5	32.29
(4,86)	1:A:49:GLN:CB	1:A:97:GLN:H	12	32.26
(4,87)	1:A:49:GLN:CB	1:A:98:LEU:H	2	32.25
(4,102)	1:A:56:PHE:CB	1:A:8:ARG:H	20	32.25
(4,106)	1:A:56:PHE:CB	1:A:12:ALA:H	19	32.17
(4,100)	1:A:56:PHE:CB	1:A:6:LEU:H	15	32.15
(4,86)	1:A:49:GLN:CB	1:A:97:GLN:H	7	32.11
(4,87)	1:A:49:GLN:CB	1:A:98:LEU:H	13	32.06
(4,87)	1:A:49:GLN:CB	1:A:98:LEU:H	14	32.04
(4,83)	1:A:49:GLN:CB	1:A:94:GLU:H	3	32.01
(4,86)	1:A:49:GLN:CB	1:A:97:GLN:H	16	31.93
(4,96)	1:A:56:PHE:CB	1:A:2:VAL:H	19	31.9
(4,104)	1:A:56:PHE:CB	1:A:10:ASP:H	13	31.87
(4,19)	1:A:26:CYS:CB	1:A:62:TRP:H	4	31.85
(4,103)	1:A:56:PHE:CB	1:A:9:VAL:H	13	31.83
(4,101)	1:A:56:PHE:CB	1:A:7:SER:H	19	31.79
(4,98)	1:A:56:PHE:CB	1:A:4:LEU:H	17	31.76
(4,101)	1:A:56:PHE:CB	1:A:7:SER:H	15	31.67
(4,109)	1:A:56:PHE:CB	1:A:17:HIS:H	9	31.64
(4,83)	1:A:49:GLN:CB	1:A:94:GLU:H	1	31.63
(4,105)	1:A:56:PHE:CB	1:A:11:ASP:H	9	31.57
(4,98)	1:A:56:PHE:CB	1:A:4:LEU:H	8	31.53
(4,83)	1:A:49:GLN:CB	1:A:94:GLU:H	8	31.48
(4,102)	1:A:56:PHE:CB	1:A:8:ARG:H	13	31.46
(4,104)	1:A:56:PHE:CB	1:A:10:ASP:H	20	31.44
(4,82)	1:A:49:GLN:CB	1:A:92:PHE:H	11	31.4
(4,86)	1:A:49:GLN:CB	1:A:97:GLN:H	19	31.37
(4,105)	1:A:56:PHE:CB	1:A:11:ASP:H	8	31.36
(4,108)	1:A:56:PHE:CB	1:A:16:LYS:H	4	31.3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,97)	1:A:56:PHE:CB	1:A:3:ASN:H	5	31.25
(4,82)	1:A:49:GLN:CB	1:A:92:PHE:H	10	31.25
(4,97)	1:A:56:PHE:CB	1:A:3:ASN:H	15	31.24
(4,107)	1:A:56:PHE:CB	1:A:15:ALA:H	9	31.23
(4,96)	1:A:56:PHE:CB	1:A:2:VAL:H	18	31.21
(4,83)	1:A:49:GLN:CB	1:A:94:GLU:H	14	31.14
(4,83)	1:A:49:GLN:CB	1:A:94:GLU:H	16	31.08
(4,87)	1:A:49:GLN:CB	1:A:98:LEU:H	12	31.07
(4,108)	1:A:56:PHE:CB	1:A:16:LYS:H	19	31.04
(4,82)	1:A:49:GLN:CB	1:A:92:PHE:H	6	31.03
(4,104)	1:A:56:PHE:CB	1:A:10:ASP:H	19	30.97
(4,103)	1:A:56:PHE:CB	1:A:9:VAL:H	4	30.97
(4,83)	1:A:49:GLN:CB	1:A:94:GLU:H	12	30.96
(4,99)	1:A:56:PHE:CB	1:A:5:GLY:H	17	30.88
(4,98)	1:A:56:PHE:CB	1:A:4:LEU:H	15	30.87
(4,83)	1:A:49:GLN:CB	1:A:94:GLU:H	19	30.77
(4,82)	1:A:49:GLN:CB	1:A:92:PHE:H	17	30.76
(4,88)	1:A:49:GLN:CB	1:A:101:ASP:H	15	30.65
(4,87)	1:A:49:GLN:CB	1:A:98:LEU:H	7	30.64
(4,97)	1:A:56:PHE:CB	1:A:3:ASN:H	18	30.62
(4,82)	1:A:49:GLN:CB	1:A:92:PHE:H	9	30.62
(4,83)	1:A:49:GLN:CB	1:A:94:GLU:H	13	30.6
(4,83)	1:A:49:GLN:CB	1:A:94:GLU:H	2	30.58
(4,100)	1:A:56:PHE:CB	1:A:6:LEU:H	4	30.57
(4,109)	1:A:56:PHE:CB	1:A:17:HIS:H	4	30.55
(4,83)	1:A:49:GLN:CB	1:A:94:GLU:H	7	30.54
(4,81)	1:A:49:GLN:CB	1:A:91:LEU:H	11	30.49
(4,20)	1:A:26:CYS:CB	1:A:63:SER:H	4	30.43
(4,108)	1:A:56:PHE:CB	1:A:16:LYS:H	10	30.43
(4,87)	1:A:49:GLN:CB	1:A:98:LEU:H	16	30.42
(4,104)	1:A:56:PHE:CB	1:A:10:ASP:H	12	30.42
(4,82)	1:A:49:GLN:CB	1:A:92:PHE:H	20	30.41
(4,108)	1:A:56:PHE:CB	1:A:16:LYS:H	17	30.4
(4,82)	1:A:49:GLN:CB	1:A:92:PHE:H	18	30.36
(4,103)	1:A:56:PHE:CB	1:A:9:VAL:H	12	30.36
(4,81)	1:A:49:GLN:CB	1:A:91:LEU:H	6	30.35
(4,85)	1:A:49:GLN:CB	1:A:96:GLY:H	4	30.34
(4,82)	1:A:49:GLN:CB	1:A:92:PHE:H	15	30.33
(4,99)	1:A:56:PHE:CB	1:A:5:GLY:H	4	30.32
(4,99)	1:A:56:PHE:CB	1:A:5:GLY:H	5	30.32
(4,105)	1:A:56:PHE:CB	1:A:11:ASP:H	19	30.31
(4,107)	1:A:56:PHE:CB	1:A:15:ALA:H	19	30.22

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,82)	1:A:49:GLN:CB	1:A:92:PHE:H	5	30.16
(4,84)	1:A:49:GLN:CB	1:A:95:THR:H	4	30.12
(4,81)	1:A:49:GLN:CB	1:A:91:LEU:H	9	30.12
(4,106)	1:A:56:PHE:CB	1:A:12:ALA:H	4	30.11
(4,88)	1:A:49:GLN:CB	1:A:101:ASP:H	10	30.08
(4,82)	1:A:49:GLN:CB	1:A:92:PHE:H	3	30.05
(1,318)	1:A:75:SER:CB	1:A:16:LYS:H	9	29.97
(4,82)	1:A:49:GLN:CB	1:A:92:PHE:H	8	29.96
(4,86)	1:A:49:GLN:CB	1:A:97:GLN:H	4	29.91
(4,19)	1:A:26:CYS:CB	1:A:62:TRP:H	2	29.87
(4,98)	1:A:56:PHE:CB	1:A:4:LEU:H	3	29.84
(4,19)	1:A:26:CYS:CB	1:A:62:TRP:H	13	29.84
(4,108)	1:A:56:PHE:CB	1:A:16:LYS:H	18	29.83
(4,109)	1:A:56:PHE:CB	1:A:17:HIS:H	17	29.82
(4,82)	1:A:49:GLN:CB	1:A:92:PHE:H	1	29.8
(4,81)	1:A:49:GLN:CB	1:A:91:LEU:H	17	29.8
(4,108)	1:A:56:PHE:CB	1:A:16:LYS:H	5	29.77
(4,106)	1:A:56:PHE:CB	1:A:12:ALA:H	8	29.76
(4,19)	1:A:26:CYS:CB	1:A:62:TRP:H	10	29.74
(4,19)	1:A:26:CYS:CB	1:A:62:TRP:H	16	29.74
(1,318)	1:A:75:SER:CB	1:A:16:LYS:H	4	29.73
(1,318)	1:A:75:SER:CB	1:A:16:LYS:H	19	29.71
(4,104)	1:A:56:PHE:CB	1:A:10:ASP:H	4	29.7
(4,109)	1:A:56:PHE:CB	1:A:17:HIS:H	10	29.68
(4,98)	1:A:56:PHE:CB	1:A:4:LEU:H	5	29.67
(4,98)	1:A:56:PHE:CB	1:A:4:LEU:H	18	29.67
(4,19)	1:A:26:CYS:CB	1:A:62:TRP:H	8	29.63
(4,105)	1:A:56:PHE:CB	1:A:11:ASP:H	12	29.63
(4,102)	1:A:56:PHE:CB	1:A:8:ARG:H	15	29.63
(4,81)	1:A:49:GLN:CB	1:A:91:LEU:H	5	29.57
(4,19)	1:A:26:CYS:CB	1:A:62:TRP:H	17	29.5
(4,81)	1:A:49:GLN:CB	1:A:91:LEU:H	18	29.48
(4,108)	1:A:56:PHE:CB	1:A:16:LYS:H	3	29.48
(4,99)	1:A:56:PHE:CB	1:A:5:GLY:H	15	29.47
(4,82)	1:A:49:GLN:CB	1:A:92:PHE:H	14	29.47
(4,81)	1:A:49:GLN:CB	1:A:91:LEU:H	20	29.45
(4,19)	1:A:26:CYS:CB	1:A:62:TRP:H	19	29.44
(4,109)	1:A:56:PHE:CB	1:A:17:HIS:H	19	29.44
(1,318)	1:A:75:SER:CB	1:A:16:LYS:H	18	29.42
(4,99)	1:A:56:PHE:CB	1:A:5:GLY:H	18	29.4
(4,108)	1:A:56:PHE:CB	1:A:16:LYS:H	14	29.37
(4,105)	1:A:56:PHE:CB	1:A:11:ASP:H	13	29.34

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,107)	1:A:56:PHE:CB	1:A:15:ALA:H	4	29.33
(4,81)	1:A:49:GLN:CB	1:A:91:LEU:H	15	29.32
(4,82)	1:A:49:GLN:CB	1:A:92:PHE:H	12	29.3
(4,103)	1:A:56:PHE:CB	1:A:9:VAL:H	18	29.3
(4,103)	1:A:56:PHE:CB	1:A:9:VAL:H	5	29.25
(4,107)	1:A:56:PHE:CB	1:A:15:ALA:H	6	29.24
(4,81)	1:A:49:GLN:CB	1:A:91:LEU:H	3	29.19
(1,319)	1:A:75:SER:CB	1:A:17:HIS:H	9	29.19
(4,88)	1:A:49:GLN:CB	1:A:101:ASP:H	6	29.16
(4,19)	1:A:26:CYS:CB	1:A:62:TRP:H	3	29.15
(4,81)	1:A:49:GLN:CB	1:A:91:LEU:H	10	29.14
(4,106)	1:A:56:PHE:CB	1:A:12:ALA:H	5	29.13
(4,19)	1:A:26:CYS:CB	1:A:62:TRP:H	7	29.09
(4,82)	1:A:49:GLN:CB	1:A:92:PHE:H	7	29.06
(4,87)	1:A:49:GLN:CB	1:A:98:LEU:H	19	29.05
(4,105)	1:A:56:PHE:CB	1:A:11:ASP:H	20	29.0
(4,82)	1:A:49:GLN:CB	1:A:92:PHE:H	16	28.96
(4,81)	1:A:49:GLN:CB	1:A:91:LEU:H	1	28.96
(4,82)	1:A:49:GLN:CB	1:A:92:PHE:H	19	28.95
(4,82)	1:A:49:GLN:CB	1:A:92:PHE:H	13	28.93
(4,96)	1:A:56:PHE:CB	1:A:2:VAL:H	10	28.92
(4,109)	1:A:56:PHE:CB	1:A:17:HIS:H	18	28.91
(4,102)	1:A:56:PHE:CB	1:A:8:ARG:H	4	28.89
(1,318)	1:A:75:SER:CB	1:A:16:LYS:H	17	28.88
(4,106)	1:A:56:PHE:CB	1:A:12:ALA:H	18	28.85
(4,107)	1:A:56:PHE:CB	1:A:15:ALA:H	14	28.84
(4,109)	1:A:56:PHE:CB	1:A:17:HIS:H	3	28.82
(4,82)	1:A:49:GLN:CB	1:A:92:PHE:H	2	28.78
(4,97)	1:A:56:PHE:CB	1:A:3:ASN:H	10	28.77
(4,81)	1:A:49:GLN:CB	1:A:91:LEU:H	16	28.77
(1,318)	1:A:75:SER:CB	1:A:16:LYS:H	5	28.77
(4,81)	1:A:49:GLN:CB	1:A:91:LEU:H	14	28.71
(1,319)	1:A:75:SER:CB	1:A:17:HIS:H	4	28.71
(4,81)	1:A:49:GLN:CB	1:A:91:LEU:H	19	28.69
(4,81)	1:A:49:GLN:CB	1:A:91:LEU:H	12	28.62
(4,81)	1:A:49:GLN:CB	1:A:91:LEU:H	8	28.61
(4,109)	1:A:56:PHE:CB	1:A:17:HIS:H	5	28.55
(4,80)	1:A:49:GLN:CB	1:A:90:TRP:H	11	28.54
(4,19)	1:A:26:CYS:CB	1:A:62:TRP:H	9	28.52
(4,108)	1:A:56:PHE:CB	1:A:16:LYS:H	6	28.52
(4,106)	1:A:56:PHE:CB	1:A:12:ALA:H	17	28.52
(4,103)	1:A:56:PHE:CB	1:A:9:VAL:H	17	28.52

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,99)	1:A:56:PHE:CB	1:A:5:GLY:H	3	28.49
(4,98)	1:A:56:PHE:CB	1:A:4:LEU:H	4	28.48
(4,107)	1:A:56:PHE:CB	1:A:15:ALA:H	17	28.45
(4,109)	1:A:56:PHE:CB	1:A:17:HIS:H	14	28.44
(4,19)	1:A:26:CYS:CB	1:A:62:TRP:H	11	28.43
(1,318)	1:A:75:SER:CB	1:A:16:LYS:H	3	28.42
(4,107)	1:A:56:PHE:CB	1:A:15:ALA:H	10	28.4
(4,87)	1:A:49:GLN:CB	1:A:98:LEU:H	4	28.38
(4,20)	1:A:26:CYS:CB	1:A:63:SER:H	13	28.34
(4,101)	1:A:56:PHE:CB	1:A:7:SER:H	4	28.33
(4,90)	1:A:49:GLN:CB	1:A:103:SER:H	20	28.3
(4,105)	1:A:56:PHE:CB	1:A:11:ASP:H	4	28.29
(4,19)	1:A:26:CYS:CB	1:A:62:TRP:H	14	28.27
(1,319)	1:A:75:SER:CB	1:A:17:HIS:H	19	28.25
(4,95)	1:A:49:GLN:CB	1:A:108:SER:H	6	28.24
(4,21)	1:A:26:CYS:CB	1:A:64:LEU:H	4	28.22
(1,319)	1:A:75:SER:CB	1:A:17:HIS:H	17	28.22
(4,83)	1:A:49:GLN:CB	1:A:94:GLU:H	4	28.21
(4,106)	1:A:56:PHE:CB	1:A:12:ALA:H	13	28.19
(4,107)	1:A:56:PHE:CB	1:A:15:ALA:H	5	28.18
(4,106)	1:A:56:PHE:CB	1:A:12:ALA:H	10	28.18
(4,88)	1:A:49:GLN:CB	1:A:101:ASP:H	20	28.17
(1,319)	1:A:75:SER:CB	1:A:17:HIS:H	18	28.17
(4,20)	1:A:26:CYS:CB	1:A:63:SER:H	2	28.16
(4,81)	1:A:49:GLN:CB	1:A:91:LEU:H	7	28.14
(4,103)	1:A:56:PHE:CB	1:A:9:VAL:H	10	28.14
(4,97)	1:A:56:PHE:CB	1:A:3:ASN:H	11	28.13
(4,81)	1:A:49:GLN:CB	1:A:91:LEU:H	13	28.11
(4,96)	1:A:56:PHE:CB	1:A:2:VAL:H	3	28.1
(4,107)	1:A:56:PHE:CB	1:A:15:ALA:H	18	28.09
(4,100)	1:A:56:PHE:CB	1:A:6:LEU:H	1	28.09
(1,318)	1:A:75:SER:CB	1:A:16:LYS:H	10	28.08
(4,225)	1:A:86:CYS:CB	1:A:54:ARG:H	8	28.06
(4,20)	1:A:26:CYS:CB	1:A:63:SER:H	10	28.06
(4,109)	1:A:56:PHE:CB	1:A:17:HIS:H	8	28.02
(4,88)	1:A:49:GLN:CB	1:A:101:ASP:H	11	28.0
(4,99)	1:A:56:PHE:CB	1:A:5:GLY:H	10	27.98
(4,103)	1:A:56:PHE:CB	1:A:9:VAL:H	3	27.98
(4,153)	1:A:56:PHE:CB	1:A:96:GLY:H	11	27.96
(4,20)	1:A:26:CYS:CB	1:A:63:SER:H	8	27.92
(4,19)	1:A:26:CYS:CB	1:A:62:TRP:H	1	27.92
(4,80)	1:A:49:GLN:CB	1:A:90:TRP:H	6	27.88

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,20)	1:A:26:CYS:CB	1:A:63:SER:H	16	27.87
(4,102)	1:A:56:PHE:CB	1:A:8:ARG:H	5	27.87
(4,19)	1:A:26:CYS:CB	1:A:62:TRP:H	12	27.86
(4,89)	1:A:49:GLN:CB	1:A:102:ARG:H	15	27.82
(4,109)	1:A:56:PHE:CB	1:A:17:HIS:H	6	27.82
(4,106)	1:A:56:PHE:CB	1:A:12:ALA:H	3	27.75
(4,102)	1:A:56:PHE:CB	1:A:8:ARG:H	2	27.74
(4,106)	1:A:56:PHE:CB	1:A:12:ALA:H	20	27.73
(4,93)	1:A:49:GLN:CB	1:A:106:GLN:H	15	27.71
(4,20)	1:A:26:CYS:CB	1:A:63:SER:H	19	27.71
(4,104)	1:A:56:PHE:CB	1:A:10:ASP:H	15	27.71
(4,80)	1:A:49:GLN:CB	1:A:90:TRP:H	9	27.7
(4,104)	1:A:56:PHE:CB	1:A:10:ASP:H	18	27.68
(4,20)	1:A:26:CYS:CB	1:A:63:SER:H	17	27.64
(4,81)	1:A:49:GLN:CB	1:A:91:LEU:H	2	27.63
(4,104)	1:A:56:PHE:CB	1:A:10:ASP:H	5	27.63
(4,22)	1:A:26:CYS:CB	1:A:65:LEU:H	4	27.62
(4,108)	1:A:56:PHE:CB	1:A:16:LYS:H	8	27.62
(1,319)	1:A:75:SER:CB	1:A:17:HIS:H	3	27.61
(4,103)	1:A:56:PHE:CB	1:A:9:VAL:H	15	27.58
(4,91)	1:A:49:GLN:CB	1:A:104:THR:H	20	27.57
(4,89)	1:A:49:GLN:CB	1:A:102:ARG:H	10	27.55
(4,19)	1:A:26:CYS:CB	1:A:62:TRP:H	18	27.54
(4,95)	1:A:49:GLN:CB	1:A:108:SER:H	14	27.53
(4,100)	1:A:56:PHE:CB	1:A:6:LEU:H	5	27.53
(4,80)	1:A:49:GLN:CB	1:A:90:TRP:H	20	27.51
(4,101)	1:A:56:PHE:CB	1:A:7:SER:H	2	27.5
(4,80)	1:A:49:GLN:CB	1:A:90:TRP:H	10	27.48
(4,90)	1:A:49:GLN:CB	1:A:103:SER:H	15	27.47
(4,104)	1:A:56:PHE:CB	1:A:10:ASP:H	17	27.47
(4,88)	1:A:49:GLN:CB	1:A:101:ASP:H	1	27.45
(4,100)	1:A:56:PHE:CB	1:A:6:LEU:H	18	27.44
(4,80)	1:A:49:GLN:CB	1:A:90:TRP:H	17	27.43
(4,100)	1:A:56:PHE:CB	1:A:6:LEU:H	17	27.43
(1,319)	1:A:75:SER:CB	1:A:17:HIS:H	5	27.43
(4,107)	1:A:56:PHE:CB	1:A:15:ALA:H	3	27.41
(4,225)	1:A:86:CYS:CB	1:A:54:ARG:H	9	27.4
(4,107)	1:A:56:PHE:CB	1:A:15:ALA:H	8	27.4
(4,20)	1:A:26:CYS:CB	1:A:63:SER:H	7	27.39
(4,102)	1:A:56:PHE:CB	1:A:8:ARG:H	18	27.39
(4,153)	1:A:56:PHE:CB	1:A:96:GLY:H	10	27.38
(4,92)	1:A:49:GLN:CB	1:A:105:ASP:H	15	27.36

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,225)	1:A:86:CYS:CB	1:A:54:ARG:H	17	27.36
(4,89)	1:A:49:GLN:CB	1:A:102:ARG:H	20	27.33
(4,104)	1:A:56:PHE:CB	1:A:10:ASP:H	10	27.33
(4,95)	1:A:49:GLN:CB	1:A:108:SER:H	15	27.31
(4,88)	1:A:49:GLN:CB	1:A:101:ASP:H	18	27.31
(4,19)	1:A:26:CYS:CB	1:A:62:TRP:H	6	27.31
(4,96)	1:A:56:PHE:CB	1:A:2:VAL:H	2	27.3
(4,88)	1:A:49:GLN:CB	1:A:101:ASP:H	9	27.27
(4,80)	1:A:49:GLN:CB	1:A:90:TRP:H	15	27.24
(4,225)	1:A:86:CYS:CB	1:A:54:ARG:H	2	27.24
(4,20)	1:A:26:CYS:CB	1:A:63:SER:H	3	27.23
(4,80)	1:A:49:GLN:CB	1:A:90:TRP:H	18	27.2
(4,225)	1:A:86:CYS:CB	1:A:54:ARG:H	13	27.2
(4,154)	1:A:56:PHE:CB	1:A:97:GLN:H	15	27.19
(4,225)	1:A:86:CYS:CB	1:A:54:ARG:H	7	27.18
(4,223)	1:A:86:CYS:CB	1:A:52:ILE:H	9	27.17
(4,80)	1:A:49:GLN:CB	1:A:90:TRP:H	5	27.16
(4,96)	1:A:56:PHE:CB	1:A:2:VAL:H	1	27.15
(4,23)	1:A:26:CYS:CB	1:A:66:VAL:H	4	27.15
(1,318)	1:A:75:SER:CB	1:A:16:LYS:H	6	27.15
(4,105)	1:A:56:PHE:CB	1:A:11:ASP:H	5	27.07
(4,225)	1:A:86:CYS:CB	1:A:54:ARG:H	20	27.06
(4,154)	1:A:56:PHE:CB	1:A:97:GLN:H	10	27.03
(4,106)	1:A:56:PHE:CB	1:A:12:ALA:H	12	27.03
(4,105)	1:A:56:PHE:CB	1:A:11:ASP:H	15	26.99
(4,225)	1:A:86:CYS:CB	1:A:54:ARG:H	15	26.98
(4,105)	1:A:56:PHE:CB	1:A:11:ASP:H	2	26.97
(4,104)	1:A:56:PHE:CB	1:A:10:ASP:H	3	26.95
(4,223)	1:A:86:CYS:CB	1:A:52:ILE:H	17	26.92
(4,153)	1:A:56:PHE:CB	1:A:96:GLY:H	15	26.91
(4,89)	1:A:49:GLN:CB	1:A:102:ARG:H	6	26.87
(4,80)	1:A:49:GLN:CB	1:A:90:TRP:H	3	26.87
(1,319)	1:A:75:SER:CB	1:A:17:HIS:H	10	26.87
(4,79)	1:A:49:GLN:CB	1:A:88:ASN:H	6	26.84
(4,155)	1:A:56:PHE:CB	1:A:98:LEU:H	18	26.84
(4,154)	1:A:56:PHE:CB	1:A:97:GLN:H	11	26.83
(4,223)	1:A:86:CYS:CB	1:A:52:ILE:H	11	26.82
(4,155)	1:A:56:PHE:CB	1:A:98:LEU:H	15	26.82
(4,101)	1:A:56:PHE:CB	1:A:7:SER:H	5	26.79
(4,225)	1:A:86:CYS:CB	1:A:54:ARG:H	12	26.78
(4,223)	1:A:86:CYS:CB	1:A:52:ILE:H	20	26.77
(4,105)	1:A:56:PHE:CB	1:A:11:ASP:H	18	26.77

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,155)	1:A:56:PHE:CB	1:A:98:LEU:H	20	26.74
(4,109)	1:A:56:PHE:CB	1:A:17:HIS:H	13	26.73
(4,97)	1:A:56:PHE:CB	1:A:3:ASN:H	3	26.71
(4,225)	1:A:86:CYS:CB	1:A:54:ARG:H	11	26.7
(4,152)	1:A:56:PHE:CB	1:A:95:THR:H	15	26.7
(4,152)	1:A:56:PHE:CB	1:A:95:THR:H	20	26.69
(4,19)	1:A:26:CYS:CB	1:A:62:TRP:H	5	26.68
(4,91)	1:A:49:GLN:CB	1:A:104:THR:H	6	26.66
(4,153)	1:A:56:PHE:CB	1:A:96:GLY:H	9	26.66
(4,152)	1:A:56:PHE:CB	1:A:95:THR:H	11	26.66
(4,79)	1:A:49:GLN:CB	1:A:88:ASN:H	9	26.65
(4,79)	1:A:49:GLN:CB	1:A:88:ASN:H	17	26.65
(4,111)	1:A:56:PHE:CB	1:A:20:LEU:H	8	26.63
(4,82)	1:A:49:GLN:CB	1:A:92:PHE:H	4	26.62
(4,153)	1:A:56:PHE:CB	1:A:96:GLY:H	18	26.62
(4,154)	1:A:56:PHE:CB	1:A:97:GLN:H	20	26.61
(4,100)	1:A:56:PHE:CB	1:A:6:LEU:H	10	26.61
(4,88)	1:A:49:GLN:CB	1:A:101:ASP:H	8	26.6
(4,155)	1:A:56:PHE:CB	1:A:98:LEU:H	10	26.6
(4,153)	1:A:56:PHE:CB	1:A:96:GLY:H	6	26.6
(4,20)	1:A:26:CYS:CB	1:A:63:SER:H	9	26.54
(4,105)	1:A:56:PHE:CB	1:A:11:ASP:H	17	26.54
(4,153)	1:A:56:PHE:CB	1:A:96:GLY:H	20	26.53
(4,98)	1:A:56:PHE:CB	1:A:4:LEU:H	10	26.51
(4,92)	1:A:49:GLN:CB	1:A:105:ASP:H	6	26.51
(4,80)	1:A:49:GLN:CB	1:A:90:TRP:H	1	26.51
(4,223)	1:A:86:CYS:CB	1:A:52:ILE:H	15	26.5
(4,88)	1:A:49:GLN:CB	1:A:101:ASP:H	2	26.49
(4,225)	1:A:86:CYS:CB	1:A:54:ARG:H	3	26.49
(4,107)	1:A:56:PHE:CB	1:A:15:ALA:H	2	26.49
(4,154)	1:A:56:PHE:CB	1:A:97:GLN:H	18	26.48
(4,225)	1:A:86:CYS:CB	1:A:54:ARG:H	18	26.47
(4,21)	1:A:26:CYS:CB	1:A:64:LEU:H	10	26.46
(4,100)	1:A:56:PHE:CB	1:A:6:LEU:H	11	26.46
(4,20)	1:A:26:CYS:CB	1:A:63:SER:H	14	26.45
(4,153)	1:A:56:PHE:CB	1:A:96:GLY:H	2	26.45
(4,101)	1:A:56:PHE:CB	1:A:7:SER:H	18	26.44
(4,225)	1:A:86:CYS:CB	1:A:54:ARG:H	1	26.43
(4,102)	1:A:56:PHE:CB	1:A:8:ARG:H	17	26.43
(4,155)	1:A:56:PHE:CB	1:A:98:LEU:H	1	26.42
(4,20)	1:A:26:CYS:CB	1:A:63:SER:H	11	26.4
(4,224)	1:A:86:CYS:CB	1:A:53:GLN:H	9	26.38

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,223)	1:A:86:CYS:CB	1:A:52:ILE:H	5	26.36
(4,111)	1:A:56:PHE:CB	1:A:20:LEU:H	2	26.33
(4,111)	1:A:56:PHE:CB	1:A:20:LEU:H	11	26.33
(4,110)	1:A:56:PHE:CB	1:A:19:GLY:H	9	26.31
(4,224)	1:A:86:CYS:CB	1:A:53:GLN:H	17	26.3
(4,79)	1:A:49:GLN:CB	1:A:88:ASN:H	5	26.28
(4,155)	1:A:56:PHE:CB	1:A:98:LEU:H	11	26.28
(4,100)	1:A:56:PHE:CB	1:A:6:LEU:H	3	26.28
(4,225)	1:A:86:CYS:CB	1:A:54:ARG:H	5	26.26
(4,153)	1:A:56:PHE:CB	1:A:96:GLY:H	1	26.25
(4,80)	1:A:49:GLN:CB	1:A:90:TRP:H	16	26.23
(4,225)	1:A:86:CYS:CB	1:A:54:ARG:H	6	26.23
(4,96)	1:A:56:PHE:CB	1:A:2:VAL:H	11	26.22
(4,224)	1:A:86:CYS:CB	1:A:53:GLN:H	11	26.22
(4,106)	1:A:56:PHE:CB	1:A:12:ALA:H	2	26.22
(4,105)	1:A:56:PHE:CB	1:A:11:ASP:H	10	26.21
(4,223)	1:A:86:CYS:CB	1:A:52:ILE:H	3	26.2
(4,153)	1:A:56:PHE:CB	1:A:96:GLY:H	13	26.2
(4,153)	1:A:56:PHE:CB	1:A:96:GLY:H	17	26.19
(4,224)	1:A:86:CYS:CB	1:A:53:GLN:H	20	26.17
(4,154)	1:A:56:PHE:CB	1:A:97:GLN:H	1	26.17
(4,153)	1:A:56:PHE:CB	1:A:96:GLY:H	3	26.17
(4,110)	1:A:56:PHE:CB	1:A:19:GLY:H	4	26.17
(4,153)	1:A:56:PHE:CB	1:A:96:GLY:H	14	26.15
(4,152)	1:A:56:PHE:CB	1:A:95:THR:H	10	26.15
(4,80)	1:A:49:GLN:CB	1:A:90:TRP:H	14	26.14
(4,223)	1:A:86:CYS:CB	1:A:52:ILE:H	6	26.14
(4,155)	1:A:56:PHE:CB	1:A:98:LEU:H	17	26.14
(4,20)	1:A:26:CYS:CB	1:A:63:SER:H	12	26.13
(4,154)	1:A:56:PHE:CB	1:A:97:GLN:H	8	26.12
(4,110)	1:A:56:PHE:CB	1:A:19:GLY:H	10	26.12
(4,99)	1:A:56:PHE:CB	1:A:5:GLY:H	2	26.11
(4,153)	1:A:56:PHE:CB	1:A:96:GLY:H	8	26.11
(4,80)	1:A:49:GLN:CB	1:A:90:TRP:H	8	26.09
(4,79)	1:A:49:GLN:CB	1:A:88:ASN:H	11	26.09
(4,224)	1:A:86:CYS:CB	1:A:53:GLN:H	15	26.09
(4,223)	1:A:86:CYS:CB	1:A:52:ILE:H	18	26.08
(4,80)	1:A:49:GLN:CB	1:A:90:TRP:H	19	26.07
(4,80)	1:A:49:GLN:CB	1:A:90:TRP:H	12	26.06
(4,152)	1:A:56:PHE:CB	1:A:95:THR:H	18	26.06
(1,319)	1:A:75:SER:CB	1:A:17:HIS:H	6	26.06
(4,100)	1:A:56:PHE:CB	1:A:6:LEU:H	2	26.05

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,104)	1:A:56:PHE:CB	1:A:10:ASP:H	1	26.04
(4,81)	1:A:49:GLN:CB	1:A:91:LEU:H	4	26.02
(4,154)	1:A:56:PHE:CB	1:A:97:GLN:H	6	26.01
(4,97)	1:A:56:PHE:CB	1:A:3:ASN:H	1	26.0
(4,102)	1:A:56:PHE:CB	1:A:8:ARG:H	10	25.99
(4,223)	1:A:86:CYS:CB	1:A:52:ILE:H	12	25.98
(4,111)	1:A:56:PHE:CB	1:A:20:LEU:H	13	25.98
(4,223)	1:A:86:CYS:CB	1:A:52:ILE:H	10	25.97
(4,94)	1:A:49:GLN:CB	1:A:107:ARG:H	6	25.96
(4,94)	1:A:49:GLN:CB	1:A:107:ARG:H	15	25.95
(4,108)	1:A:56:PHE:CB	1:A:16:LYS:H	13	25.94
(4,152)	1:A:56:PHE:CB	1:A:95:THR:H	6	25.93
(4,154)	1:A:56:PHE:CB	1:A:97:GLN:H	3	25.91
(4,154)	1:A:56:PHE:CB	1:A:97:GLN:H	9	25.91
(4,79)	1:A:49:GLN:CB	1:A:88:ASN:H	10	25.9
(4,223)	1:A:86:CYS:CB	1:A:52:ILE:H	1	25.9
(4,21)	1:A:26:CYS:CB	1:A:64:LEU:H	2	25.9
(4,154)	1:A:56:PHE:CB	1:A:97:GLN:H	13	25.89
(4,102)	1:A:56:PHE:CB	1:A:8:ARG:H	3	25.89
(4,154)	1:A:56:PHE:CB	1:A:97:GLN:H	2	25.88
(4,154)	1:A:56:PHE:CB	1:A:97:GLN:H	17	25.88
(4,152)	1:A:56:PHE:CB	1:A:95:THR:H	9	25.88
(4,96)	1:A:56:PHE:CB	1:A:2:VAL:H	7	25.87
(4,21)	1:A:26:CYS:CB	1:A:64:LEU:H	13	25.87
(4,79)	1:A:49:GLN:CB	1:A:88:ASN:H	3	25.85
(4,152)	1:A:56:PHE:CB	1:A:95:THR:H	8	25.83
(4,101)	1:A:56:PHE:CB	1:A:7:SER:H	1	25.82
(4,79)	1:A:49:GLN:CB	1:A:88:ASN:H	18	25.81
(4,223)	1:A:86:CYS:CB	1:A:52:ILE:H	7	25.8
(4,152)	1:A:56:PHE:CB	1:A:95:THR:H	3	25.8
(4,111)	1:A:56:PHE:CB	1:A:20:LEU:H	12	25.8
(4,20)	1:A:26:CYS:CB	1:A:63:SER:H	1	25.77
(4,105)	1:A:56:PHE:CB	1:A:11:ASP:H	3	25.76
(4,79)	1:A:49:GLN:CB	1:A:88:ASN:H	8	25.75
(4,155)	1:A:56:PHE:CB	1:A:98:LEU:H	6	25.74
(4,153)	1:A:56:PHE:CB	1:A:96:GLY:H	7	25.74
(4,224)	1:A:86:CYS:CB	1:A:53:GLN:H	6	25.73
(4,153)	1:A:56:PHE:CB	1:A:96:GLY:H	5	25.73
(4,101)	1:A:56:PHE:CB	1:A:7:SER:H	17	25.73
(4,90)	1:A:49:GLN:CB	1:A:103:SER:H	6	25.71
(4,155)	1:A:56:PHE:CB	1:A:98:LEU:H	3	25.71
(4,79)	1:A:49:GLN:CB	1:A:88:ASN:H	16	25.69

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,22)	1:A:26:CYS:CB	1:A:65:LEU:H	2	25.68
(4,79)	1:A:49:GLN:CB	1:A:88:ASN:H	19	25.67
(4,110)	1:A:56:PHE:CB	1:A:19:GLY:H	17	25.67
(4,79)	1:A:49:GLN:CB	1:A:88:ASN:H	14	25.66
(4,152)	1:A:56:PHE:CB	1:A:95:THR:H	17	25.66
(4,223)	1:A:86:CYS:CB	1:A:52:ILE:H	13	25.65
(4,155)	1:A:56:PHE:CB	1:A:98:LEU:H	2	25.65
(4,224)	1:A:86:CYS:CB	1:A:53:GLN:H	18	25.64
(4,225)	1:A:86:CYS:CB	1:A:54:ARG:H	10	25.63
(4,22)	1:A:26:CYS:CB	1:A:65:LEU:H	16	25.63
(4,21)	1:A:26:CYS:CB	1:A:64:LEU:H	8	25.63
(4,224)	1:A:86:CYS:CB	1:A:53:GLN:H	5	25.62
(4,22)	1:A:26:CYS:CB	1:A:65:LEU:H	17	25.61
(4,153)	1:A:56:PHE:CB	1:A:96:GLY:H	12	25.61
(4,152)	1:A:56:PHE:CB	1:A:95:THR:H	13	25.61
(4,96)	1:A:56:PHE:CB	1:A:2:VAL:H	16	25.6
(4,224)	1:A:86:CYS:CB	1:A:53:GLN:H	3	25.6
(4,222)	1:A:86:CYS:CB	1:A:51:PHE:H	8	25.59
(1,318)	1:A:75:SER:CB	1:A:16:LYS:H	8	25.59
(4,79)	1:A:49:GLN:CB	1:A:88:ASN:H	12	25.58
(4,80)	1:A:49:GLN:CB	1:A:90:TRP:H	7	25.57
(4,91)	1:A:49:GLN:CB	1:A:104:THR:H	18	25.56
(4,224)	1:A:86:CYS:CB	1:A:53:GLN:H	8	25.56
(4,223)	1:A:86:CYS:CB	1:A:52:ILE:H	2	25.56
(4,80)	1:A:49:GLN:CB	1:A:90:TRP:H	13	25.55
(4,98)	1:A:56:PHE:CB	1:A:4:LEU:H	11	25.54
(4,22)	1:A:26:CYS:CB	1:A:65:LEU:H	13	25.54
(4,20)	1:A:26:CYS:CB	1:A:63:SER:H	6	25.54
(4,155)	1:A:56:PHE:CB	1:A:98:LEU:H	13	25.54
(4,152)	1:A:56:PHE:CB	1:A:95:THR:H	1	25.54
(4,21)	1:A:26:CYS:CB	1:A:64:LEU:H	16	25.53
(4,103)	1:A:56:PHE:CB	1:A:9:VAL:H	1	25.5
(4,107)	1:A:56:PHE:CB	1:A:15:ALA:H	13	25.49
(1,319)	1:A:75:SER:CB	1:A:17:HIS:H	8	25.48
(4,111)	1:A:56:PHE:CB	1:A:20:LEU:H	7	25.47
(4,79)	1:A:49:GLN:CB	1:A:88:ASN:H	1	25.46
(4,109)	1:A:56:PHE:CB	1:A:17:HIS:H	11	25.46
(4,154)	1:A:56:PHE:CB	1:A:97:GLN:H	5	25.44
(4,152)	1:A:56:PHE:CB	1:A:95:THR:H	2	25.43
(4,224)	1:A:86:CYS:CB	1:A:53:GLN:H	12	25.42
(4,101)	1:A:56:PHE:CB	1:A:7:SER:H	10	25.42
(1,318)	1:A:75:SER:CB	1:A:16:LYS:H	14	25.42

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,152)	1:A:56:PHE:CB	1:A:95:THR:H	7	25.41
(4,101)	1:A:56:PHE:CB	1:A:7:SER:H	11	25.41
(4,224)	1:A:86:CYS:CB	1:A:53:GLN:H	7	25.4
(4,21)	1:A:26:CYS:CB	1:A:64:LEU:H	19	25.39
(4,152)	1:A:56:PHE:CB	1:A:95:THR:H	12	25.39
(4,104)	1:A:56:PHE:CB	1:A:10:ASP:H	11	25.37
(4,103)	1:A:56:PHE:CB	1:A:9:VAL:H	2	25.37
(4,100)	1:A:56:PHE:CB	1:A:6:LEU:H	7	25.37
(4,79)	1:A:49:GLN:CB	1:A:88:ASN:H	20	25.36
(4,21)	1:A:26:CYS:CB	1:A:64:LEU:H	17	25.36
(4,154)	1:A:56:PHE:CB	1:A:97:GLN:H	14	25.36
(4,89)	1:A:49:GLN:CB	1:A:102:ARG:H	14	25.34
(4,23)	1:A:26:CYS:CB	1:A:66:VAL:H	2	25.34
(4,224)	1:A:86:CYS:CB	1:A:53:GLN:H	10	25.34
(4,223)	1:A:86:CYS:CB	1:A:52:ILE:H	8	25.34
(4,21)	1:A:26:CYS:CB	1:A:64:LEU:H	11	25.34
(4,22)	1:A:26:CYS:CB	1:A:65:LEU:H	19	25.32
(4,152)	1:A:56:PHE:CB	1:A:95:THR:H	5	25.32
(4,104)	1:A:56:PHE:CB	1:A:10:ASP:H	2	25.32
(4,98)	1:A:56:PHE:CB	1:A:4:LEU:H	2	25.31
(4,225)	1:A:86:CYS:CB	1:A:54:ARG:H	14	25.31
(4,225)	1:A:86:CYS:CB	1:A:54:ARG:H	19	25.31
(4,94)	1:A:49:GLN:CB	1:A:107:ARG:H	14	25.3
(4,155)	1:A:56:PHE:CB	1:A:98:LEU:H	14	25.3
(4,89)	1:A:49:GLN:CB	1:A:102:ARG:H	3	25.27
(4,22)	1:A:26:CYS:CB	1:A:65:LEU:H	3	25.27
(4,111)	1:A:56:PHE:CB	1:A:20:LEU:H	17	25.27
(4,47)	1:A:49:GLN:CB	1:A:16:LYS:H	9	25.26
(4,110)	1:A:56:PHE:CB	1:A:19:GLY:H	11	25.26
(4,89)	1:A:49:GLN:CB	1:A:102:ARG:H	17	25.25
(4,23)	1:A:26:CYS:CB	1:A:66:VAL:H	13	25.25
(4,224)	1:A:86:CYS:CB	1:A:53:GLN:H	1	25.24
(4,109)	1:A:56:PHE:CB	1:A:17:HIS:H	7	25.24
(4,225)	1:A:86:CYS:CB	1:A:54:ARG:H	16	25.23
(4,80)	1:A:49:GLN:CB	1:A:90:TRP:H	2	25.21
(4,224)	1:A:86:CYS:CB	1:A:53:GLN:H	2	25.21
(4,111)	1:A:56:PHE:CB	1:A:20:LEU:H	4	25.21
(4,110)	1:A:56:PHE:CB	1:A:19:GLY:H	8	25.21
(4,101)	1:A:56:PHE:CB	1:A:7:SER:H	3	25.21
(4,88)	1:A:49:GLN:CB	1:A:101:ASP:H	17	25.2
(4,222)	1:A:86:CYS:CB	1:A:51:PHE:H	9	25.2
(4,22)	1:A:26:CYS:CB	1:A:65:LEU:H	10	25.2

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,23)	1:A:26:CYS:CB	1:A:66:VAL:H	16	25.19
(4,154)	1:A:56:PHE:CB	1:A:97:GLN:H	7	25.18
(4,22)	1:A:26:CYS:CB	1:A:65:LEU:H	8	25.17
(4,154)	1:A:56:PHE:CB	1:A:97:GLN:H	12	25.17
(4,224)	1:A:86:CYS:CB	1:A:53:GLN:H	13	25.16
(1,331)	1:A:75:SER:CB	1:A:98:LEU:H	18	25.13
(4,23)	1:A:26:CYS:CB	1:A:66:VAL:H	17	25.12
(4,110)	1:A:56:PHE:CB	1:A:19:GLY:H	2	25.12
(4,225)	1:A:86:CYS:CB	1:A:54:ARG:H	4	25.11
(4,79)	1:A:49:GLN:CB	1:A:88:ASN:H	7	25.1
(4,109)	1:A:56:PHE:CB	1:A:17:HIS:H	1	25.09
(4,98)	1:A:56:PHE:CB	1:A:4:LEU:H	1	25.08
(4,222)	1:A:86:CYS:CB	1:A:51:PHE:H	13	25.07
(4,21)	1:A:26:CYS:CB	1:A:64:LEU:H	7	25.07
(4,24)	1:A:26:CYS:CB	1:A:67:ALA:H	4	25.05
(4,22)	1:A:26:CYS:CB	1:A:65:LEU:H	7	25.05
(4,21)	1:A:26:CYS:CB	1:A:64:LEU:H	3	25.05
(4,20)	1:A:26:CYS:CB	1:A:63:SER:H	18	25.05
(4,101)	1:A:56:PHE:CB	1:A:7:SER:H	16	25.05
(4,79)	1:A:49:GLN:CB	1:A:88:ASN:H	13	25.04
(4,152)	1:A:56:PHE:CB	1:A:95:THR:H	14	25.03
(4,93)	1:A:49:GLN:CB	1:A:106:GLN:H	14	25.02
(4,91)	1:A:49:GLN:CB	1:A:104:THR:H	14	25.01
(4,110)	1:A:56:PHE:CB	1:A:19:GLY:H	18	24.99
(4,223)	1:A:86:CYS:CB	1:A:52:ILE:H	16	24.98
(4,153)	1:A:56:PHE:CB	1:A:96:GLY:H	16	24.97
(4,93)	1:A:49:GLN:CB	1:A:106:GLN:H	19	24.96
(4,222)	1:A:86:CYS:CB	1:A:51:PHE:H	17	24.96
(1,331)	1:A:75:SER:CB	1:A:98:LEU:H	17	24.96
(4,93)	1:A:49:GLN:CB	1:A:106:GLN:H	6	24.94
(4,153)	1:A:56:PHE:CB	1:A:96:GLY:H	19	24.94
(4,99)	1:A:56:PHE:CB	1:A:5:GLY:H	1	24.93
(4,79)	1:A:49:GLN:CB	1:A:88:ASN:H	15	24.93
(4,88)	1:A:49:GLN:CB	1:A:101:ASP:H	3	24.91
(4,110)	1:A:56:PHE:CB	1:A:19:GLY:H	13	24.91
(4,89)	1:A:49:GLN:CB	1:A:102:ARG:H	9	24.9
(4,111)	1:A:56:PHE:CB	1:A:20:LEU:H	1	24.9
(1,331)	1:A:75:SER:CB	1:A:98:LEU:H	1	24.9
(1,331)	1:A:75:SER:CB	1:A:98:LEU:H	14	24.89
(4,23)	1:A:26:CYS:CB	1:A:66:VAL:H	7	24.88
(4,223)	1:A:86:CYS:CB	1:A:52:ILE:H	14	24.86
(4,155)	1:A:56:PHE:CB	1:A:98:LEU:H	9	24.86

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,111)	1:A:56:PHE:CB	1:A:20:LEU:H	9	24.86
(4,94)	1:A:49:GLN:CB	1:A:107:ARG:H	19	24.84
(4,90)	1:A:49:GLN:CB	1:A:103:SER:H	14	24.83
(4,23)	1:A:26:CYS:CB	1:A:66:VAL:H	19	24.83
(4,151)	1:A:56:PHE:CB	1:A:94:GLU:H	11	24.83
(4,222)	1:A:86:CYS:CB	1:A:51:PHE:H	7	24.82
(4,111)	1:A:56:PHE:CB	1:A:20:LEU:H	10	24.82
(4,22)	1:A:26:CYS:CB	1:A:65:LEU:H	9	24.81
(4,107)	1:A:56:PHE:CB	1:A:15:ALA:H	12	24.81
(4,223)	1:A:86:CYS:CB	1:A:52:ILE:H	19	24.8
(4,91)	1:A:49:GLN:CB	1:A:104:THR:H	3	24.79
(4,90)	1:A:49:GLN:CB	1:A:103:SER:H	11	24.79
(4,23)	1:A:26:CYS:CB	1:A:66:VAL:H	3	24.79
(4,108)	1:A:56:PHE:CB	1:A:16:LYS:H	2	24.79
(4,99)	1:A:56:PHE:CB	1:A:5:GLY:H	11	24.77
(4,90)	1:A:49:GLN:CB	1:A:103:SER:H	18	24.76
(4,224)	1:A:86:CYS:CB	1:A:53:GLN:H	19	24.76
(4,110)	1:A:56:PHE:CB	1:A:19:GLY:H	3	24.76
(4,222)	1:A:86:CYS:CB	1:A:51:PHE:H	2	24.74
(4,222)	1:A:86:CYS:CB	1:A:51:PHE:H	20	24.74
(4,22)	1:A:26:CYS:CB	1:A:65:LEU:H	11	24.74
(4,79)	1:A:49:GLN:CB	1:A:88:ASN:H	2	24.73
(4,109)	1:A:56:PHE:CB	1:A:17:HIS:H	20	24.73
(4,23)	1:A:26:CYS:CB	1:A:66:VAL:H	8	24.72
(4,111)	1:A:56:PHE:CB	1:A:20:LEU:H	20	24.72
(4,224)	1:A:86:CYS:CB	1:A:53:GLN:H	14	24.68
(4,155)	1:A:56:PHE:CB	1:A:98:LEU:H	8	24.66
(4,151)	1:A:56:PHE:CB	1:A:94:GLU:H	15	24.66
(4,20)	1:A:26:CYS:CB	1:A:63:SER:H	5	24.62
(4,106)	1:A:56:PHE:CB	1:A:12:ALA:H	15	24.62
(4,102)	1:A:56:PHE:CB	1:A:8:ARG:H	16	24.62
(1,319)	1:A:75:SER:CB	1:A:17:HIS:H	14	24.62
(4,110)	1:A:56:PHE:CB	1:A:19:GLY:H	5	24.61
(4,222)	1:A:86:CYS:CB	1:A:51:PHE:H	11	24.58
(4,153)	1:A:56:PHE:CB	1:A:96:GLY:H	4	24.57
(4,91)	1:A:49:GLN:CB	1:A:104:THR:H	15	24.56
(4,155)	1:A:56:PHE:CB	1:A:98:LEU:H	12	24.56
(4,109)	1:A:56:PHE:CB	1:A:17:HIS:H	2	24.56
(4,155)	1:A:56:PHE:CB	1:A:98:LEU:H	5	24.54
(4,110)	1:A:56:PHE:CB	1:A:19:GLY:H	19	24.54
(4,224)	1:A:86:CYS:CB	1:A:53:GLN:H	16	24.53
(4,48)	1:A:49:GLN:CB	1:A:17:HIS:H	9	24.52

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,21)	1:A:26:CYS:CB	1:A:64:LEU:H	14	24.52
(4,93)	1:A:49:GLN:CB	1:A:106:GLN:H	2	24.51
(4,108)	1:A:56:PHE:CB	1:A:16:LYS:H	20	24.51
(4,21)	1:A:26:CYS:CB	1:A:64:LEU:H	9	24.5
(4,222)	1:A:86:CYS:CB	1:A:51:PHE:H	15	24.49
(4,47)	1:A:49:GLN:CB	1:A:16:LYS:H	19	24.46
(4,92)	1:A:49:GLN:CB	1:A:105:ASP:H	20	24.45
(4,112)	1:A:56:PHE:CB	1:A:21:GLY:H	8	24.44
(1,329)	1:A:75:SER:CB	1:A:96:GLY:H	11	24.43
(4,22)	1:A:26:CYS:CB	1:A:65:LEU:H	14	24.4
(4,23)	1:A:26:CYS:CB	1:A:66:VAL:H	9	24.38
(1,331)	1:A:75:SER:CB	1:A:98:LEU:H	2	24.38
(1,329)	1:A:75:SER:CB	1:A:96:GLY:H	14	24.38
(4,151)	1:A:56:PHE:CB	1:A:94:GLU:H	20	24.35
(4,107)	1:A:56:PHE:CB	1:A:15:ALA:H	20	24.33
(1,329)	1:A:75:SER:CB	1:A:96:GLY:H	19	24.33
(4,222)	1:A:86:CYS:CB	1:A:51:PHE:H	3	24.32
(4,90)	1:A:49:GLN:CB	1:A:103:SER:H	9	24.31
(1,331)	1:A:75:SER:CB	1:A:98:LEU:H	13	24.3
(1,331)	1:A:75:SER:CB	1:A:98:LEU:H	20	24.3
(4,222)	1:A:86:CYS:CB	1:A:51:PHE:H	12	24.29
(1,331)	1:A:75:SER:CB	1:A:98:LEU:H	3	24.26
(4,103)	1:A:56:PHE:CB	1:A:9:VAL:H	11	24.2
(1,329)	1:A:75:SER:CB	1:A:96:GLY:H	10	24.2
(4,89)	1:A:49:GLN:CB	1:A:102:ARG:H	1	24.19
(4,222)	1:A:86:CYS:CB	1:A:51:PHE:H	5	24.19
(4,154)	1:A:56:PHE:CB	1:A:97:GLN:H	4	24.18
(1,329)	1:A:75:SER:CB	1:A:96:GLY:H	9	24.18
(1,331)	1:A:75:SER:CB	1:A:98:LEU:H	15	24.17
(4,222)	1:A:86:CYS:CB	1:A:51:PHE:H	1	24.16
(4,152)	1:A:56:PHE:CB	1:A:95:THR:H	19	24.15
(4,152)	1:A:56:PHE:CB	1:A:95:THR:H	4	24.13
(4,111)	1:A:56:PHE:CB	1:A:20:LEU:H	3	24.13
(4,111)	1:A:56:PHE:CB	1:A:20:LEU:H	15	24.13
(4,111)	1:A:56:PHE:CB	1:A:20:LEU:H	18	24.12
(4,22)	1:A:26:CYS:CB	1:A:65:LEU:H	12	24.11
(1,331)	1:A:75:SER:CB	1:A:98:LEU:H	6	24.11
(4,154)	1:A:56:PHE:CB	1:A:97:GLN:H	16	24.1
(1,329)	1:A:75:SER:CB	1:A:96:GLY:H	2	24.1
(4,152)	1:A:56:PHE:CB	1:A:95:THR:H	16	24.09
(1,329)	1:A:75:SER:CB	1:A:96:GLY:H	16	24.09
(4,222)	1:A:86:CYS:CB	1:A:51:PHE:H	18	24.06

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,22)	1:A:26:CYS:CB	1:A:65:LEU:H	1	24.06
(4,155)	1:A:56:PHE:CB	1:A:98:LEU:H	7	24.06
(4,89)	1:A:49:GLN:CB	1:A:102:ARG:H	11	24.05
(1,329)	1:A:75:SER:CB	1:A:96:GLY:H	6	24.05
(4,108)	1:A:56:PHE:CB	1:A:16:LYS:H	1	24.04
(4,100)	1:A:56:PHE:CB	1:A:6:LEU:H	16	24.04
(4,151)	1:A:56:PHE:CB	1:A:94:GLU:H	9	24.03
(1,331)	1:A:75:SER:CB	1:A:98:LEU:H	5	24.03
(4,112)	1:A:56:PHE:CB	1:A:21:GLY:H	13	24.01
(4,104)	1:A:56:PHE:CB	1:A:10:ASP:H	7	24.01
(1,329)	1:A:75:SER:CB	1:A:96:GLY:H	13	24.01
(4,88)	1:A:49:GLN:CB	1:A:101:ASP:H	5	23.99
(4,94)	1:A:49:GLN:CB	1:A:107:ARG:H	16	23.98
(4,47)	1:A:49:GLN:CB	1:A:16:LYS:H	5	23.98
(4,110)	1:A:56:PHE:CB	1:A:19:GLY:H	12	23.97
(1,329)	1:A:75:SER:CB	1:A:96:GLY:H	4	23.97
(4,89)	1:A:49:GLN:CB	1:A:102:ARG:H	2	23.96
(4,22)	1:A:26:CYS:CB	1:A:65:LEU:H	18	23.94
(4,112)	1:A:56:PHE:CB	1:A:21:GLY:H	2	23.94
(4,112)	1:A:56:PHE:CB	1:A:21:GLY:H	4	23.94
(4,97)	1:A:56:PHE:CB	1:A:3:ASN:H	2	23.92
(1,329)	1:A:75:SER:CB	1:A:96:GLY:H	17	23.92
(4,90)	1:A:49:GLN:CB	1:A:103:SER:H	10	23.91
(4,21)	1:A:26:CYS:CB	1:A:64:LEU:H	12	23.91
(4,23)	1:A:26:CYS:CB	1:A:66:VAL:H	12	23.9
(4,102)	1:A:56:PHE:CB	1:A:8:ARG:H	1	23.9
(4,23)	1:A:26:CYS:CB	1:A:66:VAL:H	10	23.89
(1,330)	1:A:75:SER:CB	1:A:97:GLN:H	18	23.88
(1,331)	1:A:75:SER:CB	1:A:98:LEU:H	16	23.87
(1,330)	1:A:75:SER:CB	1:A:97:GLN:H	1	23.87
(4,151)	1:A:56:PHE:CB	1:A:94:GLU:H	10	23.86
(4,151)	1:A:56:PHE:CB	1:A:94:GLU:H	18	23.86
(4,112)	1:A:56:PHE:CB	1:A:21:GLY:H	11	23.86
(1,329)	1:A:75:SER:CB	1:A:96:GLY:H	5	23.86
(1,331)	1:A:75:SER:CB	1:A:98:LEU:H	12	23.85
(4,46)	1:A:49:GLN:CB	1:A:15:ALA:H	6	23.84
(1,329)	1:A:75:SER:CB	1:A:96:GLY:H	18	23.84
(4,23)	1:A:26:CYS:CB	1:A:66:VAL:H	14	23.83
(1,330)	1:A:75:SER:CB	1:A:97:GLN:H	8	23.83
(1,330)	1:A:75:SER:CB	1:A:97:GLN:H	14	23.82
(1,330)	1:A:75:SER:CB	1:A:97:GLN:H	15	23.82
(1,329)	1:A:75:SER:CB	1:A:96:GLY:H	1	23.82

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,112)	1:A:56:PHE:CB	1:A:21:GLY:H	12	23.81
(4,112)	1:A:56:PHE:CB	1:A:21:GLY:H	20	23.81
(1,330)	1:A:75:SER:CB	1:A:97:GLN:H	5	23.81
(4,23)	1:A:26:CYS:CB	1:A:66:VAL:H	1	23.79
(4,222)	1:A:86:CYS:CB	1:A:51:PHE:H	10	23.79
(4,21)	1:A:26:CYS:CB	1:A:64:LEU:H	1	23.79
(1,330)	1:A:75:SER:CB	1:A:97:GLN:H	10	23.78
(1,329)	1:A:75:SER:CB	1:A:96:GLY:H	7	23.77
(4,95)	1:A:49:GLN:CB	1:A:108:SER:H	2	23.76
(4,108)	1:A:56:PHE:CB	1:A:16:LYS:H	7	23.76
(4,108)	1:A:56:PHE:CB	1:A:16:LYS:H	11	23.76
(1,330)	1:A:75:SER:CB	1:A:97:GLN:H	17	23.76
(1,330)	1:A:75:SER:CB	1:A:97:GLN:H	13	23.74
(4,220)	1:A:86:CYS:CB	1:A:49:GLN:H	11	23.73
(4,222)	1:A:86:CYS:CB	1:A:51:PHE:H	6	23.72
(4,154)	1:A:56:PHE:CB	1:A:97:GLN:H	19	23.72
(1,330)	1:A:75:SER:CB	1:A:97:GLN:H	4	23.71
(4,110)	1:A:56:PHE:CB	1:A:19:GLY:H	7	23.7
(1,329)	1:A:75:SER:CB	1:A:96:GLY:H	3	23.7
(1,330)	1:A:75:SER:CB	1:A:97:GLN:H	2	23.69
(4,92)	1:A:49:GLN:CB	1:A:105:ASP:H	18	23.68
(4,113)	1:A:56:PHE:CB	1:A:22:GLU:H	4	23.68
(4,105)	1:A:56:PHE:CB	1:A:11:ASP:H	1	23.68
(1,331)	1:A:75:SER:CB	1:A:98:LEU:H	11	23.68
(1,329)	1:A:75:SER:CB	1:A:96:GLY:H	8	23.68
(1,329)	1:A:75:SER:CB	1:A:96:GLY:H	12	23.68
(4,92)	1:A:49:GLN:CB	1:A:105:ASP:H	14	23.65
(4,91)	1:A:49:GLN:CB	1:A:104:THR:H	2	23.65
(4,221)	1:A:86:CYS:CB	1:A:50:MET:H	8	23.64
(4,151)	1:A:56:PHE:CB	1:A:94:GLU:H	8	23.64
(4,89)	1:A:49:GLN:CB	1:A:102:ARG:H	18	23.63
(4,151)	1:A:56:PHE:CB	1:A:94:GLU:H	6	23.63
(1,331)	1:A:75:SER:CB	1:A:98:LEU:H	10	23.63
(4,46)	1:A:49:GLN:CB	1:A:15:ALA:H	9	23.61
(4,23)	1:A:26:CYS:CB	1:A:66:VAL:H	18	23.6
(1,331)	1:A:75:SER:CB	1:A:98:LEU:H	9	23.6
(1,330)	1:A:75:SER:CB	1:A:97:GLN:H	9	23.6
(4,112)	1:A:56:PHE:CB	1:A:21:GLY:H	17	23.56
(4,25)	1:A:26:CYS:CB	1:A:69:VAL:H	4	23.55
(1,330)	1:A:75:SER:CB	1:A:97:GLN:H	3	23.54
(1,330)	1:A:75:SER:CB	1:A:97:GLN:H	6	23.54
(4,151)	1:A:56:PHE:CB	1:A:94:GLU:H	2	23.53

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,330)	1:A:75:SER:CB	1:A:97:GLN:H	11	23.51
(4,92)	1:A:49:GLN:CB	1:A:105:ASP:H	3	23.5
(4,151)	1:A:56:PHE:CB	1:A:94:GLU:H	3	23.49
(1,320)	1:A:75:SER:CB	1:A:19:GLY:H	4	23.49
(4,156)	1:A:56:PHE:CB	1:A:101:ASP:H	15	23.48
(4,112)	1:A:56:PHE:CB	1:A:21:GLY:H	7	23.47
(4,101)	1:A:56:PHE:CB	1:A:7:SER:H	7	23.47
(4,223)	1:A:86:CYS:CB	1:A:52:ILE:H	4	23.46
(4,112)	1:A:56:PHE:CB	1:A:21:GLY:H	9	23.46
(1,320)	1:A:75:SER:CB	1:A:19:GLY:H	9	23.46
(4,103)	1:A:56:PHE:CB	1:A:9:VAL:H	7	23.45
(4,91)	1:A:49:GLN:CB	1:A:104:THR:H	11	23.44
(4,80)	1:A:49:GLN:CB	1:A:90:TRP:H	4	23.44
(4,110)	1:A:56:PHE:CB	1:A:19:GLY:H	1	23.44
(4,105)	1:A:56:PHE:CB	1:A:11:ASP:H	11	23.44
(1,330)	1:A:75:SER:CB	1:A:97:GLN:H	16	23.44
(4,111)	1:A:56:PHE:CB	1:A:20:LEU:H	5	23.43
(4,224)	1:A:86:CYS:CB	1:A:53:GLN:H	4	23.42
(4,219)	1:A:86:CYS:CB	1:A:48:LEU:H	9	23.42
(1,331)	1:A:75:SER:CB	1:A:98:LEU:H	4	23.42
(1,330)	1:A:75:SER:CB	1:A:97:GLN:H	12	23.42
(1,330)	1:A:75:SER:CB	1:A:97:GLN:H	19	23.42
(1,320)	1:A:75:SER:CB	1:A:19:GLY:H	17	23.42
(4,105)	1:A:56:PHE:CB	1:A:11:ASP:H	16	23.41
(4,220)	1:A:86:CYS:CB	1:A:49:GLN:H	9	23.4
(4,151)	1:A:56:PHE:CB	1:A:94:GLU:H	17	23.4
(1,319)	1:A:75:SER:CB	1:A:17:HIS:H	13	23.4
(4,21)	1:A:26:CYS:CB	1:A:64:LEU:H	6	23.38
(4,220)	1:A:86:CYS:CB	1:A:49:GLN:H	20	23.35
(4,155)	1:A:56:PHE:CB	1:A:98:LEU:H	16	23.35
(1,330)	1:A:75:SER:CB	1:A:97:GLN:H	7	23.34
(1,329)	1:A:75:SER:CB	1:A:96:GLY:H	15	23.34
(4,46)	1:A:49:GLN:CB	1:A:15:ALA:H	19	23.33
(4,219)	1:A:86:CYS:CB	1:A:48:LEU:H	11	23.33
(4,219)	1:A:86:CYS:CB	1:A:48:LEU:H	20	23.33
(4,151)	1:A:56:PHE:CB	1:A:94:GLU:H	13	23.31
(4,106)	1:A:56:PHE:CB	1:A:12:ALA:H	1	23.31
(4,151)	1:A:56:PHE:CB	1:A:94:GLU:H	1	23.3
(1,330)	1:A:75:SER:CB	1:A:97:GLN:H	20	23.3
(4,92)	1:A:49:GLN:CB	1:A:105:ASP:H	2	23.28
(4,88)	1:A:49:GLN:CB	1:A:101:ASP:H	12	23.27
(4,21)	1:A:26:CYS:CB	1:A:64:LEU:H	18	23.27

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,331)	1:A:75:SER:CB	1:A:98:LEU:H	8	23.26
(4,26)	1:A:26:CYS:CB	1:A:70:ALA:H	4	23.24
(4,112)	1:A:56:PHE:CB	1:A:21:GLY:H	15	23.24
(4,88)	1:A:49:GLN:CB	1:A:101:ASP:H	14	23.23
(4,109)	1:A:56:PHE:CB	1:A:17:HIS:H	12	23.21
(4,22)	1:A:26:CYS:CB	1:A:65:LEU:H	6	23.2
(1,331)	1:A:75:SER:CB	1:A:98:LEU:H	7	23.19
(4,79)	1:A:49:GLN:CB	1:A:88:ASN:H	4	23.18
(4,151)	1:A:56:PHE:CB	1:A:94:GLU:H	7	23.17
(4,89)	1:A:49:GLN:CB	1:A:102:ARG:H	8	23.16
(4,48)	1:A:49:GLN:CB	1:A:17:HIS:H	5	23.15
(4,48)	1:A:49:GLN:CB	1:A:17:HIS:H	19	23.15
(1,331)	1:A:75:SER:CB	1:A:98:LEU:H	19	23.14
(4,47)	1:A:49:GLN:CB	1:A:16:LYS:H	14	23.13
(4,102)	1:A:56:PHE:CB	1:A:8:ARG:H	11	23.13
(4,151)	1:A:56:PHE:CB	1:A:94:GLU:H	5	23.12
(4,113)	1:A:56:PHE:CB	1:A:22:GLU:H	9	23.1
(4,112)	1:A:56:PHE:CB	1:A:21:GLY:H	1	23.1
(1,321)	1:A:75:SER:CB	1:A:20:LEU:H	12	23.1
(4,24)	1:A:26:CYS:CB	1:A:67:ALA:H	2	23.08
(4,220)	1:A:86:CYS:CB	1:A:49:GLN:H	17	23.08
(4,19)	1:A:26:CYS:CB	1:A:62:TRP:H	20	23.08
(4,113)	1:A:56:PHE:CB	1:A:22:GLU:H	17	23.08
(4,24)	1:A:26:CYS:CB	1:A:67:ALA:H	13	23.07
(4,151)	1:A:56:PHE:CB	1:A:94:GLU:H	12	23.06
(4,111)	1:A:56:PHE:CB	1:A:20:LEU:H	19	23.05
(4,95)	1:A:49:GLN:CB	1:A:108:SER:H	19	23.03
(1,321)	1:A:75:SER:CB	1:A:20:LEU:H	13	23.02
(4,113)	1:A:56:PHE:CB	1:A:22:GLU:H	11	23.01
(1,328)	1:A:75:SER:CB	1:A:95:THR:H	5	23.0
(1,328)	1:A:75:SER:CB	1:A:95:THR:H	6	23.0
(1,328)	1:A:75:SER:CB	1:A:95:THR:H	7	23.0
(1,328)	1:A:75:SER:CB	1:A:95:THR:H	9	23.0
(1,328)	1:A:75:SER:CB	1:A:95:THR:H	11	23.0
(1,328)	1:A:75:SER:CB	1:A:95:THR:H	13	23.0
(1,328)	1:A:75:SER:CB	1:A:95:THR:H	19	23.0
(4,90)	1:A:49:GLN:CB	1:A:103:SER:H	3	22.99
(1,328)	1:A:75:SER:CB	1:A:95:THR:H	12	22.99
(1,328)	1:A:75:SER:CB	1:A:95:THR:H	15	22.99
(1,328)	1:A:75:SER:CB	1:A:95:THR:H	17	22.99
(1,328)	1:A:75:SER:CB	1:A:95:THR:H	4	22.98
(1,328)	1:A:75:SER:CB	1:A:95:THR:H	8	22.98

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,329)	1:A:75:SER:CB	1:A:96:GLY:H	20	22.97
(1,328)	1:A:75:SER:CB	1:A:95:THR:H	3	22.97
(1,328)	1:A:75:SER:CB	1:A:95:THR:H	20	22.97
(4,88)	1:A:49:GLN:CB	1:A:101:ASP:H	7	22.96
(4,221)	1:A:86:CYS:CB	1:A:50:MET:H	9	22.95
(4,219)	1:A:86:CYS:CB	1:A:48:LEU:H	17	22.95
(1,321)	1:A:75:SER:CB	1:A:20:LEU:H	2	22.95
(4,220)	1:A:86:CYS:CB	1:A:49:GLN:H	6	22.94
(4,47)	1:A:49:GLN:CB	1:A:16:LYS:H	6	22.92
(4,114)	1:A:56:PHE:CB	1:A:23:TYR:H	11	22.92
(1,328)	1:A:75:SER:CB	1:A:95:THR:H	18	22.92
(1,318)	1:A:75:SER:CB	1:A:16:LYS:H	2	22.91
(4,150)	1:A:56:PHE:CB	1:A:93:LEU:H	11	22.89
(4,88)	1:A:49:GLN:CB	1:A:101:ASP:H	13	22.87
(4,220)	1:A:86:CYS:CB	1:A:49:GLN:H	5	22.87
(1,321)	1:A:75:SER:CB	1:A:20:LEU:H	8	22.87
(1,320)	1:A:75:SER:CB	1:A:19:GLY:H	18	22.86
(4,220)	1:A:86:CYS:CB	1:A:49:GLN:H	10	22.85
(1,321)	1:A:75:SER:CB	1:A:20:LEU:H	17	22.85
(4,24)	1:A:26:CYS:CB	1:A:67:ALA:H	16	22.84
(1,328)	1:A:75:SER:CB	1:A:95:THR:H	14	22.84
(4,155)	1:A:56:PHE:CB	1:A:98:LEU:H	4	22.83
(4,110)	1:A:56:PHE:CB	1:A:19:GLY:H	6	22.83
(4,23)	1:A:26:CYS:CB	1:A:66:VAL:H	11	22.82
(1,328)	1:A:75:SER:CB	1:A:95:THR:H	10	22.81
(4,151)	1:A:56:PHE:CB	1:A:94:GLU:H	14	22.77
(1,328)	1:A:75:SER:CB	1:A:95:THR:H	1	22.77
(4,88)	1:A:49:GLN:CB	1:A:101:ASP:H	16	22.76
(4,150)	1:A:56:PHE:CB	1:A:93:LEU:H	15	22.76
(4,221)	1:A:86:CYS:CB	1:A:50:MET:H	11	22.75
(4,221)	1:A:86:CYS:CB	1:A:50:MET:H	17	22.75
(4,220)	1:A:86:CYS:CB	1:A:49:GLN:H	15	22.75
(1,320)	1:A:75:SER:CB	1:A:19:GLY:H	19	22.75
(4,97)	1:A:56:PHE:CB	1:A:3:ASN:H	7	22.74
(4,22)	1:A:26:CYS:CB	1:A:65:LEU:H	5	22.74
(4,219)	1:A:86:CYS:CB	1:A:48:LEU:H	5	22.73
(4,110)	1:A:56:PHE:CB	1:A:19:GLY:H	20	22.73
(4,108)	1:A:56:PHE:CB	1:A:16:LYS:H	12	22.72
(1,328)	1:A:75:SER:CB	1:A:95:THR:H	2	22.72
(4,24)	1:A:26:CYS:CB	1:A:67:ALA:H	17	22.71
(1,328)	1:A:75:SER:CB	1:A:95:THR:H	16	22.71
(1,320)	1:A:75:SER:CB	1:A:19:GLY:H	3	22.69

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,319)	1:A:75:SER:CB	1:A:17:HIS:H	1	22.69
(4,90)	1:A:49:GLN:CB	1:A:103:SER:H	7	22.68
(4,222)	1:A:86:CYS:CB	1:A:51:PHE:H	16	22.68
(4,222)	1:A:86:CYS:CB	1:A:51:PHE:H	19	22.68
(4,113)	1:A:56:PHE:CB	1:A:22:GLU:H	8	22.67
(1,321)	1:A:75:SER:CB	1:A:20:LEU:H	7	22.66
(4,150)	1:A:56:PHE:CB	1:A:93:LEU:H	10	22.64
(4,113)	1:A:56:PHE:CB	1:A:22:GLU:H	2	22.64
(4,221)	1:A:86:CYS:CB	1:A:50:MET:H	13	22.63
(4,24)	1:A:26:CYS:CB	1:A:67:ALA:H	8	22.62
(4,24)	1:A:26:CYS:CB	1:A:67:ALA:H	7	22.61
(4,78)	1:A:49:GLN:CB	1:A:85:LYS:H	6	22.6
(4,25)	1:A:26:CYS:CB	1:A:69:VAL:H	17	22.6
(4,107)	1:A:56:PHE:CB	1:A:15:ALA:H	11	22.6
(4,91)	1:A:49:GLN:CB	1:A:104:THR:H	19	22.59
(4,90)	1:A:49:GLN:CB	1:A:103:SER:H	2	22.59
(4,219)	1:A:86:CYS:CB	1:A:48:LEU:H	15	22.59
(4,221)	1:A:86:CYS:CB	1:A:50:MET:H	20	22.58
(4,113)	1:A:56:PHE:CB	1:A:22:GLU:H	13	22.57
(4,222)	1:A:86:CYS:CB	1:A:51:PHE:H	14	22.56
(4,219)	1:A:86:CYS:CB	1:A:48:LEU:H	3	22.56
(4,48)	1:A:49:GLN:CB	1:A:17:HIS:H	6	22.54
(1,320)	1:A:75:SER:CB	1:A:19:GLY:H	10	22.54
(4,47)	1:A:49:GLN:CB	1:A:16:LYS:H	17	22.51
(4,23)	1:A:26:CYS:CB	1:A:66:VAL:H	5	22.51
(4,220)	1:A:86:CYS:CB	1:A:49:GLN:H	3	22.51
(4,150)	1:A:56:PHE:CB	1:A:93:LEU:H	20	22.51
(4,149)	1:A:56:PHE:CB	1:A:92:PHE:H	15	22.51
(4,48)	1:A:49:GLN:CB	1:A:17:HIS:H	14	22.5
(4,23)	1:A:26:CYS:CB	1:A:66:VAL:H	6	22.5
(4,106)	1:A:56:PHE:CB	1:A:12:ALA:H	11	22.49
(4,24)	1:A:26:CYS:CB	1:A:67:ALA:H	19	22.48
(1,321)	1:A:75:SER:CB	1:A:20:LEU:H	1	22.48
(1,319)	1:A:75:SER:CB	1:A:17:HIS:H	7	22.48
(4,114)	1:A:56:PHE:CB	1:A:23:TYR:H	4	22.47
(4,78)	1:A:49:GLN:CB	1:A:85:LYS:H	17	22.46
(4,219)	1:A:86:CYS:CB	1:A:48:LEU:H	10	22.45
(4,110)	1:A:56:PHE:CB	1:A:19:GLY:H	16	22.45
(4,92)	1:A:49:GLN:CB	1:A:105:ASP:H	19	22.43
(4,21)	1:A:26:CYS:CB	1:A:64:LEU:H	5	22.4
(4,149)	1:A:56:PHE:CB	1:A:92:PHE:H	11	22.4
(4,111)	1:A:56:PHE:CB	1:A:20:LEU:H	16	22.4

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,220)	1:A:86:CYS:CB	1:A:49:GLN:H	18	22.39
(4,112)	1:A:56:PHE:CB	1:A:21:GLY:H	10	22.39
(4,24)	1:A:26:CYS:CB	1:A:67:ALA:H	3	22.38
(4,114)	1:A:56:PHE:CB	1:A:23:TYR:H	2	22.38
(4,47)	1:A:49:GLN:CB	1:A:16:LYS:H	10	22.37
(4,114)	1:A:56:PHE:CB	1:A:23:TYR:H	8	22.37
(4,107)	1:A:56:PHE:CB	1:A:15:ALA:H	1	22.37
(4,91)	1:A:49:GLN:CB	1:A:104:THR:H	10	22.35
(1,321)	1:A:75:SER:CB	1:A:20:LEU:H	11	22.34
(1,318)	1:A:75:SER:CB	1:A:16:LYS:H	13	22.34
(4,151)	1:A:56:PHE:CB	1:A:94:GLU:H	16	22.33
(4,110)	1:A:56:PHE:CB	1:A:19:GLY:H	14	22.33
(1,320)	1:A:75:SER:CB	1:A:19:GLY:H	5	22.33
(4,219)	1:A:86:CYS:CB	1:A:48:LEU:H	6	22.32
(4,114)	1:A:56:PHE:CB	1:A:23:TYR:H	13	22.32
(4,221)	1:A:86:CYS:CB	1:A:50:MET:H	15	22.3
(4,107)	1:A:56:PHE:CB	1:A:15:ALA:H	15	22.3
(4,90)	1:A:49:GLN:CB	1:A:103:SER:H	12	22.29
(4,221)	1:A:86:CYS:CB	1:A:50:MET:H	2	22.28
(4,19)	1:A:26:CYS:CB	1:A:62:TRP:H	15	22.28
(4,89)	1:A:49:GLN:CB	1:A:102:ARG:H	5	22.27
(4,24)	1:A:26:CYS:CB	1:A:67:ALA:H	10	22.27
(4,47)	1:A:49:GLN:CB	1:A:16:LYS:H	18	22.26
(4,78)	1:A:49:GLN:CB	1:A:85:LYS:H	9	22.25
(4,221)	1:A:86:CYS:CB	1:A:50:MET:H	7	22.25
(4,48)	1:A:49:GLN:CB	1:A:17:HIS:H	17	22.24
(4,25)	1:A:26:CYS:CB	1:A:69:VAL:H	3	22.24
(4,25)	1:A:26:CYS:CB	1:A:69:VAL:H	16	22.24
(4,149)	1:A:56:PHE:CB	1:A:92:PHE:H	10	22.24
(4,89)	1:A:49:GLN:CB	1:A:102:ARG:H	19	22.23
(4,150)	1:A:56:PHE:CB	1:A:93:LEU:H	18	22.23
(4,91)	1:A:49:GLN:CB	1:A:104:THR:H	9	22.21
(4,149)	1:A:56:PHE:CB	1:A:92:PHE:H	20	22.21
(1,319)	1:A:75:SER:CB	1:A:17:HIS:H	2	22.21
(1,320)	1:A:75:SER:CB	1:A:19:GLY:H	13	22.2
(4,155)	1:A:56:PHE:CB	1:A:98:LEU:H	19	22.19
(4,151)	1:A:56:PHE:CB	1:A:94:GLU:H	19	22.19
(4,104)	1:A:56:PHE:CB	1:A:10:ASP:H	16	22.18
(4,222)	1:A:86:CYS:CB	1:A:51:PHE:H	4	22.17
(4,93)	1:A:49:GLN:CB	1:A:106:GLN:H	16	22.16
(4,46)	1:A:49:GLN:CB	1:A:15:ALA:H	14	22.16
(4,25)	1:A:26:CYS:CB	1:A:69:VAL:H	2	22.14

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,151)	1:A:56:PHE:CB	1:A:94:GLU:H	4	22.14
(4,219)	1:A:86:CYS:CB	1:A:48:LEU:H	12	22.13
(4,106)	1:A:56:PHE:CB	1:A:12:ALA:H	16	22.13
(1,321)	1:A:75:SER:CB	1:A:20:LEU:H	4	22.13
(4,112)	1:A:56:PHE:CB	1:A:21:GLY:H	3	22.12
(4,220)	1:A:86:CYS:CB	1:A:49:GLN:H	12	22.11
(4,221)	1:A:86:CYS:CB	1:A:50:MET:H	5	22.1
(4,150)	1:A:56:PHE:CB	1:A:93:LEU:H	9	22.09
(4,221)	1:A:86:CYS:CB	1:A:50:MET:H	6	22.07
(4,221)	1:A:86:CYS:CB	1:A:50:MET:H	18	22.07
(4,113)	1:A:56:PHE:CB	1:A:22:GLU:H	12	22.07
(1,321)	1:A:75:SER:CB	1:A:20:LEU:H	9	22.06
(4,221)	1:A:86:CYS:CB	1:A:50:MET:H	3	22.05
(4,46)	1:A:49:GLN:CB	1:A:15:ALA:H	5	22.04
(4,156)	1:A:56:PHE:CB	1:A:101:ASP:H	20	22.04
(4,111)	1:A:56:PHE:CB	1:A:20:LEU:H	14	22.03
(4,78)	1:A:49:GLN:CB	1:A:85:LYS:H	8	22.02
(4,78)	1:A:49:GLN:CB	1:A:85:LYS:H	5	22.01
(4,219)	1:A:86:CYS:CB	1:A:48:LEU:H	1	22.0
(4,94)	1:A:49:GLN:CB	1:A:107:ARG:H	2	21.99
(4,149)	1:A:56:PHE:CB	1:A:92:PHE:H	18	21.99
(4,220)	1:A:86:CYS:CB	1:A:49:GLN:H	1	21.98
(4,114)	1:A:56:PHE:CB	1:A:23:TYR:H	17	21.98
(4,78)	1:A:49:GLN:CB	1:A:85:LYS:H	10	21.96
(4,25)	1:A:26:CYS:CB	1:A:69:VAL:H	19	21.96
(4,24)	1:A:26:CYS:CB	1:A:67:ALA:H	9	21.95
(4,150)	1:A:56:PHE:CB	1:A:93:LEU:H	3	21.95
(4,112)	1:A:56:PHE:CB	1:A:21:GLY:H	18	21.95
(4,107)	1:A:56:PHE:CB	1:A:15:ALA:H	16	21.95
(4,25)	1:A:26:CYS:CB	1:A:69:VAL:H	13	21.94
(4,150)	1:A:56:PHE:CB	1:A:93:LEU:H	6	21.94
(4,105)	1:A:56:PHE:CB	1:A:11:ASP:H	7	21.94
(4,113)	1:A:56:PHE:CB	1:A:22:GLU:H	3	21.93
(4,26)	1:A:26:CYS:CB	1:A:70:ALA:H	17	21.92
(4,103)	1:A:56:PHE:CB	1:A:9:VAL:H	16	21.92
(4,221)	1:A:86:CYS:CB	1:A:50:MET:H	10	21.91
(4,219)	1:A:86:CYS:CB	1:A:48:LEU:H	18	21.9
(4,221)	1:A:86:CYS:CB	1:A:50:MET:H	12	21.89
(4,25)	1:A:26:CYS:CB	1:A:69:VAL:H	9	21.88
(1,323)	1:A:75:SER:CB	1:A:22:GLU:H	17	21.88
(1,321)	1:A:75:SER:CB	1:A:20:LEU:H	3	21.88
(1,320)	1:A:75:SER:CB	1:A:19:GLY:H	2	21.87

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,107)	1:A:56:PHE:CB	1:A:15:ALA:H	7	21.86
(4,106)	1:A:56:PHE:CB	1:A:12:ALA:H	7	21.85
(4,221)	1:A:86:CYS:CB	1:A:50:MET:H	1	21.84
(4,150)	1:A:56:PHE:CB	1:A:93:LEU:H	8	21.84
(4,114)	1:A:56:PHE:CB	1:A:23:TYR:H	7	21.84
(4,47)	1:A:49:GLN:CB	1:A:16:LYS:H	4	21.83
(4,150)	1:A:56:PHE:CB	1:A:93:LEU:H	1	21.82
(1,320)	1:A:75:SER:CB	1:A:19:GLY:H	8	21.82
(4,26)	1:A:26:CYS:CB	1:A:70:ALA:H	2	21.81
(4,114)	1:A:56:PHE:CB	1:A:23:TYR:H	12	21.81
(4,99)	1:A:56:PHE:CB	1:A:5:GLY:H	16	21.79
(4,150)	1:A:56:PHE:CB	1:A:93:LEU:H	2	21.79
(4,149)	1:A:56:PHE:CB	1:A:92:PHE:H	3	21.79
(4,113)	1:A:56:PHE:CB	1:A:22:GLU:H	7	21.78
(4,149)	1:A:56:PHE:CB	1:A:92:PHE:H	9	21.77
(4,88)	1:A:49:GLN:CB	1:A:101:ASP:H	19	21.75
(4,219)	1:A:86:CYS:CB	1:A:48:LEU:H	13	21.75
(4,150)	1:A:56:PHE:CB	1:A:93:LEU:H	17	21.74
(1,320)	1:A:75:SER:CB	1:A:19:GLY:H	12	21.73
(4,156)	1:A:56:PHE:CB	1:A:101:ASP:H	6	21.71
(4,78)	1:A:49:GLN:CB	1:A:85:LYS:H	16	21.7
(1,322)	1:A:75:SER:CB	1:A:21:GLY:H	17	21.7
(4,25)	1:A:26:CYS:CB	1:A:69:VAL:H	7	21.69
(4,158)	1:A:56:PHE:CB	1:A:103:SER:H	20	21.69
(4,149)	1:A:56:PHE:CB	1:A:92:PHE:H	17	21.69
(4,149)	1:A:56:PHE:CB	1:A:92:PHE:H	1	21.68
(4,149)	1:A:56:PHE:CB	1:A:92:PHE:H	6	21.67
(4,48)	1:A:49:GLN:CB	1:A:17:HIS:H	18	21.66
(4,114)	1:A:56:PHE:CB	1:A:23:TYR:H	9	21.66
(4,150)	1:A:56:PHE:CB	1:A:93:LEU:H	13	21.65
(4,48)	1:A:49:GLN:CB	1:A:17:HIS:H	10	21.64
(4,91)	1:A:49:GLN:CB	1:A:104:THR:H	12	21.63
(4,89)	1:A:49:GLN:CB	1:A:102:ARG:H	12	21.63
(4,26)	1:A:26:CYS:CB	1:A:70:ALA:H	13	21.63
(4,149)	1:A:56:PHE:CB	1:A:92:PHE:H	8	21.63
(4,102)	1:A:56:PHE:CB	1:A:8:ARG:H	7	21.63
(4,219)	1:A:86:CYS:CB	1:A:48:LEU:H	8	21.62
(4,95)	1:A:49:GLN:CB	1:A:108:SER:H	16	21.61
(4,78)	1:A:49:GLN:CB	1:A:85:LYS:H	19	21.61
(4,99)	1:A:56:PHE:CB	1:A:5:GLY:H	7	21.6
(4,26)	1:A:26:CYS:CB	1:A:70:ALA:H	3	21.58
(4,149)	1:A:56:PHE:CB	1:A:92:PHE:H	7	21.58

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,321)	1:A:75:SER:CB	1:A:20:LEU:H	10	21.58
(4,78)	1:A:49:GLN:CB	1:A:85:LYS:H	3	21.57
(4,24)	1:A:26:CYS:CB	1:A:67:ALA:H	14	21.57
(4,90)	1:A:49:GLN:CB	1:A:103:SER:H	8	21.55
(4,89)	1:A:49:GLN:CB	1:A:102:ARG:H	7	21.55
(4,25)	1:A:26:CYS:CB	1:A:69:VAL:H	18	21.55
(1,320)	1:A:75:SER:CB	1:A:19:GLY:H	7	21.55
(4,219)	1:A:86:CYS:CB	1:A:48:LEU:H	7	21.54
(4,150)	1:A:56:PHE:CB	1:A:93:LEU:H	7	21.54
(1,318)	1:A:75:SER:CB	1:A:16:LYS:H	1	21.54
(4,26)	1:A:26:CYS:CB	1:A:70:ALA:H	16	21.53
(4,24)	1:A:26:CYS:CB	1:A:67:ALA:H	12	21.53
(4,149)	1:A:56:PHE:CB	1:A:92:PHE:H	12	21.52
(1,323)	1:A:75:SER:CB	1:A:22:GLU:H	9	21.52
(1,319)	1:A:75:SER:CB	1:A:17:HIS:H	11	21.52
(4,149)	1:A:56:PHE:CB	1:A:92:PHE:H	2	21.51
(1,321)	1:A:75:SER:CB	1:A:20:LEU:H	18	21.51
(4,78)	1:A:49:GLN:CB	1:A:85:LYS:H	14	21.5
(4,156)	1:A:56:PHE:CB	1:A:101:ASP:H	1	21.49
(4,149)	1:A:56:PHE:CB	1:A:92:PHE:H	13	21.49
(1,320)	1:A:75:SER:CB	1:A:19:GLY:H	1	21.45
(4,26)	1:A:26:CYS:CB	1:A:70:ALA:H	19	21.44
(4,220)	1:A:86:CYS:CB	1:A:49:GLN:H	19	21.43
(4,150)	1:A:56:PHE:CB	1:A:93:LEU:H	12	21.43
(4,78)	1:A:49:GLN:CB	1:A:85:LYS:H	11	21.41
(4,220)	1:A:86:CYS:CB	1:A:49:GLN:H	16	21.41
(1,321)	1:A:75:SER:CB	1:A:20:LEU:H	20	21.41
(4,47)	1:A:49:GLN:CB	1:A:16:LYS:H	3	21.4
(4,24)	1:A:26:CYS:CB	1:A:67:ALA:H	1	21.4
(4,150)	1:A:56:PHE:CB	1:A:93:LEU:H	5	21.4
(4,114)	1:A:56:PHE:CB	1:A:23:TYR:H	10	21.4
(4,26)	1:A:26:CYS:CB	1:A:70:ALA:H	7	21.37
(4,115)	1:A:56:PHE:CB	1:A:24:ALA:H	11	21.37
(1,323)	1:A:75:SER:CB	1:A:22:GLU:H	4	21.37
(1,322)	1:A:75:SER:CB	1:A:21:GLY:H	9	21.37
(4,78)	1:A:49:GLN:CB	1:A:85:LYS:H	12	21.35
(4,148)	1:A:56:PHE:CB	1:A:91:LEU:H	11	21.35
(4,110)	1:A:56:PHE:CB	1:A:19:GLY:H	15	21.35
(4,113)	1:A:56:PHE:CB	1:A:22:GLU:H	14	21.34
(4,91)	1:A:49:GLN:CB	1:A:104:THR:H	5	21.32
(4,113)	1:A:56:PHE:CB	1:A:22:GLU:H	20	21.32
(4,97)	1:A:56:PHE:CB	1:A:3:ASN:H	16	21.3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,92)	1:A:49:GLN:CB	1:A:105:ASP:H	7	21.3
(4,78)	1:A:49:GLN:CB	1:A:85:LYS:H	18	21.3
(4,48)	1:A:49:GLN:CB	1:A:17:HIS:H	4	21.3
(4,220)	1:A:86:CYS:CB	1:A:49:GLN:H	8	21.3
(4,219)	1:A:86:CYS:CB	1:A:48:LEU:H	2	21.29
(4,113)	1:A:56:PHE:CB	1:A:22:GLU:H	1	21.29
(4,157)	1:A:56:PHE:CB	1:A:102:ARG:H	20	21.28
(4,115)	1:A:56:PHE:CB	1:A:24:ALA:H	8	21.28
(1,319)	1:A:75:SER:CB	1:A:17:HIS:H	12	21.27
(4,149)	1:A:56:PHE:CB	1:A:92:PHE:H	14	21.25
(4,220)	1:A:86:CYS:CB	1:A:49:GLN:H	14	21.23
(4,150)	1:A:56:PHE:CB	1:A:93:LEU:H	14	21.23
(4,148)	1:A:56:PHE:CB	1:A:91:LEU:H	15	21.23
(4,113)	1:A:56:PHE:CB	1:A:22:GLU:H	10	21.23
(1,320)	1:A:75:SER:CB	1:A:19:GLY:H	16	21.22
(4,149)	1:A:56:PHE:CB	1:A:92:PHE:H	5	21.21
(4,114)	1:A:56:PHE:CB	1:A:23:TYR:H	3	21.21
(4,112)	1:A:56:PHE:CB	1:A:21:GLY:H	5	21.21
(4,159)	1:A:56:PHE:CB	1:A:104:THR:H	20	21.2
(4,89)	1:A:49:GLN:CB	1:A:102:ARG:H	16	21.19
(4,112)	1:A:56:PHE:CB	1:A:21:GLY:H	14	21.19
(4,78)	1:A:49:GLN:CB	1:A:85:LYS:H	1	21.18
(4,220)	1:A:86:CYS:CB	1:A:49:GLN:H	13	21.17
(4,115)	1:A:56:PHE:CB	1:A:24:ALA:H	13	21.17
(4,114)	1:A:56:PHE:CB	1:A:23:TYR:H	1	21.17
(4,113)	1:A:56:PHE:CB	1:A:22:GLU:H	18	21.17
(4,78)	1:A:49:GLN:CB	1:A:85:LYS:H	13	21.16
(1,320)	1:A:75:SER:CB	1:A:19:GLY:H	6	21.16
(4,48)	1:A:49:GLN:CB	1:A:17:HIS:H	3	21.14
(4,24)	1:A:26:CYS:CB	1:A:67:ALA:H	18	21.14
(4,220)	1:A:86:CYS:CB	1:A:49:GLN:H	7	21.14
(4,78)	1:A:49:GLN:CB	1:A:85:LYS:H	7	21.11
(4,218)	1:A:86:CYS:CB	1:A:47:GLY:H	8	21.11
(4,93)	1:A:49:GLN:CB	1:A:106:GLN:H	9	21.1
(4,26)	1:A:26:CYS:CB	1:A:70:ALA:H	9	21.1
(4,24)	1:A:26:CYS:CB	1:A:67:ALA:H	11	21.1
(4,98)	1:A:56:PHE:CB	1:A:4:LEU:H	16	21.06
(1,318)	1:A:75:SER:CB	1:A:16:LYS:H	7	21.06
(4,25)	1:A:26:CYS:CB	1:A:69:VAL:H	1	21.05
(1,322)	1:A:75:SER:CB	1:A:21:GLY:H	4	21.05
(1,318)	1:A:75:SER:CB	1:A:16:LYS:H	16	21.05
(4,115)	1:A:56:PHE:CB	1:A:24:ALA:H	2	21.04

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,319)	1:A:75:SER:CB	1:A:17:HIS:H	20	21.04
(4,92)	1:A:49:GLN:CB	1:A:105:ASP:H	11	21.02
(4,25)	1:A:26:CYS:CB	1:A:69:VAL:H	12	21.02
(4,92)	1:A:49:GLN:CB	1:A:105:ASP:H	16	20.98
(4,25)	1:A:26:CYS:CB	1:A:69:VAL:H	8	20.98
(4,90)	1:A:49:GLN:CB	1:A:103:SER:H	17	20.96
(1,321)	1:A:75:SER:CB	1:A:20:LEU:H	19	20.96
(4,94)	1:A:49:GLN:CB	1:A:107:ARG:H	3	20.94
(4,221)	1:A:86:CYS:CB	1:A:50:MET:H	16	20.92
(4,221)	1:A:86:CYS:CB	1:A:50:MET:H	19	20.9
(4,220)	1:A:86:CYS:CB	1:A:49:GLN:H	2	20.89
(4,93)	1:A:49:GLN:CB	1:A:106:GLN:H	20	20.88
(4,27)	1:A:26:CYS:CB	1:A:71:GLY:H	4	20.88
(1,323)	1:A:75:SER:CB	1:A:22:GLU:H	3	20.88
(1,321)	1:A:75:SER:CB	1:A:20:LEU:H	15	20.88
(4,94)	1:A:49:GLN:CB	1:A:107:ARG:H	20	20.87
(1,320)	1:A:75:SER:CB	1:A:19:GLY:H	11	20.86
(4,148)	1:A:56:PHE:CB	1:A:91:LEU:H	20	20.85
(4,90)	1:A:49:GLN:CB	1:A:103:SER:H	1	20.82
(4,115)	1:A:56:PHE:CB	1:A:24:ALA:H	20	20.82
(1,321)	1:A:75:SER:CB	1:A:20:LEU:H	5	20.81
(1,322)	1:A:75:SER:CB	1:A:21:GLY:H	12	20.79
(4,219)	1:A:86:CYS:CB	1:A:48:LEU:H	16	20.78
(4,219)	1:A:86:CYS:CB	1:A:48:LEU:H	19	20.78
(4,115)	1:A:56:PHE:CB	1:A:24:ALA:H	12	20.77
(4,111)	1:A:56:PHE:CB	1:A:20:LEU:H	6	20.77
(4,221)	1:A:86:CYS:CB	1:A:50:MET:H	14	20.76
(4,114)	1:A:56:PHE:CB	1:A:23:TYR:H	20	20.76
(1,322)	1:A:75:SER:CB	1:A:21:GLY:H	13	20.76
(4,218)	1:A:86:CYS:CB	1:A:47:GLY:H	11	20.74
(4,218)	1:A:86:CYS:CB	1:A:47:GLY:H	9	20.73
(4,20)	1:A:26:CYS:CB	1:A:63:SER:H	20	20.73
(4,114)	1:A:56:PHE:CB	1:A:23:TYR:H	18	20.73
(4,148)	1:A:56:PHE:CB	1:A:91:LEU:H	9	20.71
(4,109)	1:A:56:PHE:CB	1:A:17:HIS:H	15	20.69
(4,115)	1:A:56:PHE:CB	1:A:24:ALA:H	7	20.63
(4,26)	1:A:26:CYS:CB	1:A:70:ALA:H	18	20.62
(4,148)	1:A:56:PHE:CB	1:A:91:LEU:H	18	20.61
(4,91)	1:A:49:GLN:CB	1:A:104:THR:H	17	20.6
(4,218)	1:A:86:CYS:CB	1:A:47:GLY:H	20	20.6
(4,156)	1:A:56:PHE:CB	1:A:101:ASP:H	9	20.59
(4,95)	1:A:49:GLN:CB	1:A:108:SER:H	7	20.58

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,92)	1:A:49:GLN:CB	1:A:105:ASP:H	9	20.57
(4,26)	1:A:26:CYS:CB	1:A:70:ALA:H	8	20.57
(1,318)	1:A:75:SER:CB	1:A:16:LYS:H	12	20.57
(4,78)	1:A:49:GLN:CB	1:A:85:LYS:H	2	20.56
(4,26)	1:A:26:CYS:CB	1:A:70:ALA:H	12	20.56
(1,322)	1:A:75:SER:CB	1:A:21:GLY:H	2	20.56
(4,113)	1:A:56:PHE:CB	1:A:22:GLU:H	6	20.54
(4,149)	1:A:56:PHE:CB	1:A:92:PHE:H	19	20.53
(4,113)	1:A:56:PHE:CB	1:A:22:GLU:H	15	20.53
(1,318)	1:A:75:SER:CB	1:A:16:LYS:H	20	20.53
(4,78)	1:A:49:GLN:CB	1:A:85:LYS:H	20	20.52
(1,322)	1:A:75:SER:CB	1:A:21:GLY:H	3	20.52
(4,45)	1:A:26:CYS:CB	1:A:108:SER:H	12	20.5
(4,25)	1:A:26:CYS:CB	1:A:69:VAL:H	14	20.5
(1,322)	1:A:75:SER:CB	1:A:21:GLY:H	8	20.49
(4,26)	1:A:26:CYS:CB	1:A:70:ALA:H	1	20.48
(4,150)	1:A:56:PHE:CB	1:A:93:LEU:H	16	20.48
(4,94)	1:A:49:GLN:CB	1:A:107:ARG:H	18	20.47
(4,112)	1:A:56:PHE:CB	1:A:21:GLY:H	19	20.47
(4,219)	1:A:86:CYS:CB	1:A:48:LEU:H	14	20.46
(1,322)	1:A:75:SER:CB	1:A:21:GLY:H	7	20.42
(4,156)	1:A:56:PHE:CB	1:A:101:ASP:H	2	20.41
(4,91)	1:A:49:GLN:CB	1:A:104:THR:H	16	20.4
(4,148)	1:A:56:PHE:CB	1:A:91:LEU:H	6	20.4
(4,149)	1:A:56:PHE:CB	1:A:92:PHE:H	4	20.39
(4,148)	1:A:56:PHE:CB	1:A:91:LEU:H	3	20.39
(4,46)	1:A:49:GLN:CB	1:A:15:ALA:H	17	20.37
(4,148)	1:A:56:PHE:CB	1:A:91:LEU:H	10	20.37
(4,148)	1:A:56:PHE:CB	1:A:91:LEU:H	7	20.36
(4,148)	1:A:56:PHE:CB	1:A:91:LEU:H	13	20.36
(1,324)	1:A:75:SER:CB	1:A:23:TYR:H	17	20.36
(4,148)	1:A:56:PHE:CB	1:A:91:LEU:H	1	20.35
(4,112)	1:A:56:PHE:CB	1:A:21:GLY:H	6	20.35
(4,112)	1:A:56:PHE:CB	1:A:21:GLY:H	16	20.34
(4,46)	1:A:49:GLN:CB	1:A:15:ALA:H	10	20.33
(4,148)	1:A:56:PHE:CB	1:A:91:LEU:H	12	20.33
(4,149)	1:A:56:PHE:CB	1:A:92:PHE:H	16	20.31
(1,322)	1:A:75:SER:CB	1:A:21:GLY:H	1	20.31
(4,148)	1:A:56:PHE:CB	1:A:91:LEU:H	8	20.3
(4,108)	1:A:56:PHE:CB	1:A:16:LYS:H	15	20.29
(4,46)	1:A:49:GLN:CB	1:A:15:ALA:H	18	20.28
(4,156)	1:A:56:PHE:CB	1:A:101:ASP:H	18	20.28

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,150)	1:A:56:PHE:CB	1:A:93:LEU:H	19	20.24
(1,324)	1:A:75:SER:CB	1:A:23:TYR:H	4	20.23
(4,95)	1:A:49:GLN:CB	1:A:108:SER:H	9	20.22
(4,91)	1:A:49:GLN:CB	1:A:104:THR:H	7	20.21
(4,78)	1:A:49:GLN:CB	1:A:85:LYS:H	15	20.21
(4,218)	1:A:86:CYS:CB	1:A:47:GLY:H	17	20.21
(4,115)	1:A:56:PHE:CB	1:A:24:ALA:H	1	20.21
(4,148)	1:A:56:PHE:CB	1:A:91:LEU:H	17	20.2
(4,115)	1:A:56:PHE:CB	1:A:24:ALA:H	4	20.2
(4,115)	1:A:56:PHE:CB	1:A:24:ALA:H	15	20.2
(4,24)	1:A:26:CYS:CB	1:A:67:ALA:H	6	20.19
(4,93)	1:A:49:GLN:CB	1:A:106:GLN:H	11	20.18
(4,150)	1:A:56:PHE:CB	1:A:93:LEU:H	4	20.18
(4,90)	1:A:49:GLN:CB	1:A:103:SER:H	19	20.17
(4,218)	1:A:86:CYS:CB	1:A:47:GLY:H	5	20.16
(4,108)	1:A:56:PHE:CB	1:A:16:LYS:H	16	20.15
(4,218)	1:A:86:CYS:CB	1:A:47:GLY:H	13	20.14
(4,148)	1:A:56:PHE:CB	1:A:91:LEU:H	2	20.14
(4,157)	1:A:56:PHE:CB	1:A:102:ARG:H	15	20.13
(4,49)	1:A:49:GLN:CB	1:A:19:GLY:H	9	20.12
(1,321)	1:A:75:SER:CB	1:A:20:LEU:H	16	20.11
(1,318)	1:A:75:SER:CB	1:A:16:LYS:H	11	20.11
(4,24)	1:A:26:CYS:CB	1:A:67:ALA:H	5	20.1
(4,218)	1:A:86:CYS:CB	1:A:47:GLY:H	7	20.09
(4,45)	1:A:26:CYS:CB	1:A:108:SER:H	13	20.08
(1,324)	1:A:75:SER:CB	1:A:23:TYR:H	13	20.08
(4,25)	1:A:26:CYS:CB	1:A:69:VAL:H	11	20.07
(4,148)	1:A:56:PHE:CB	1:A:91:LEU:H	5	20.06
(1,322)	1:A:75:SER:CB	1:A:21:GLY:H	20	20.05
(1,319)	1:A:75:SER:CB	1:A:17:HIS:H	16	20.05
(4,91)	1:A:49:GLN:CB	1:A:104:THR:H	1	20.03
(4,115)	1:A:56:PHE:CB	1:A:24:ALA:H	10	20.03
(4,113)	1:A:56:PHE:CB	1:A:22:GLU:H	19	20.03
(4,114)	1:A:56:PHE:CB	1:A:23:TYR:H	19	20.02
(4,48)	1:A:49:GLN:CB	1:A:17:HIS:H	1	20.01
(4,218)	1:A:86:CYS:CB	1:A:47:GLY:H	15	20.01
(4,93)	1:A:49:GLN:CB	1:A:106:GLN:H	3	19.99
(4,216)	1:A:86:CYS:CB	1:A:44:MET:H	11	19.99
(4,46)	1:A:49:GLN:CB	1:A:15:ALA:H	12	19.96
(4,77)	1:A:49:GLN:CB	1:A:83:SER:H	6	19.94
(4,92)	1:A:49:GLN:CB	1:A:105:ASP:H	1	19.93
(4,48)	1:A:49:GLN:CB	1:A:17:HIS:H	20	19.93

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,22)	1:A:26:CYS:CB	1:A:65:LEU:H	20	19.93
(4,148)	1:A:56:PHE:CB	1:A:91:LEU:H	14	19.93
(4,114)	1:A:56:PHE:CB	1:A:23:TYR:H	16	19.91
(4,109)	1:A:56:PHE:CB	1:A:17:HIS:H	16	19.9
(4,217)	1:A:86:CYS:CB	1:A:46:PHE:H	11	19.89
(1,324)	1:A:75:SER:CB	1:A:23:TYR:H	2	19.88
(1,324)	1:A:75:SER:CB	1:A:23:TYR:H	12	19.88
(4,25)	1:A:26:CYS:CB	1:A:69:VAL:H	5	19.87
(1,323)	1:A:75:SER:CB	1:A:22:GLU:H	13	19.87
(4,77)	1:A:49:GLN:CB	1:A:83:SER:H	17	19.86
(4,218)	1:A:86:CYS:CB	1:A:47:GLY:H	3	19.86
(4,94)	1:A:49:GLN:CB	1:A:107:ARG:H	9	19.85
(4,20)	1:A:26:CYS:CB	1:A:63:SER:H	15	19.83
(4,47)	1:A:49:GLN:CB	1:A:16:LYS:H	20	19.82
(1,324)	1:A:75:SER:CB	1:A:23:TYR:H	7	19.82
(1,323)	1:A:75:SER:CB	1:A:22:GLU:H	18	19.82
(4,18)	1:A:26:CYS:CB	1:A:58:TYR:H	4	19.81
(4,113)	1:A:56:PHE:CB	1:A:22:GLU:H	16	19.81
(1,323)	1:A:75:SER:CB	1:A:22:GLU:H	2	19.81
(1,322)	1:A:75:SER:CB	1:A:21:GLY:H	11	19.81
(4,26)	1:A:26:CYS:CB	1:A:70:ALA:H	14	19.8
(1,322)	1:A:75:SER:CB	1:A:21:GLY:H	18	19.78
(4,221)	1:A:86:CYS:CB	1:A:50:MET:H	4	19.75
(4,48)	1:A:49:GLN:CB	1:A:17:HIS:H	13	19.74
(4,98)	1:A:56:PHE:CB	1:A:4:LEU:H	7	19.73
(4,77)	1:A:49:GLN:CB	1:A:83:SER:H	5	19.73
(4,46)	1:A:49:GLN:CB	1:A:15:ALA:H	4	19.73
(4,163)	1:A:56:PHE:CB	1:A:108:SER:H	14	19.73
(4,90)	1:A:49:GLN:CB	1:A:103:SER:H	5	19.72
(4,29)	1:A:26:CYS:CB	1:A:73:VAL:H	4	19.71
(4,115)	1:A:56:PHE:CB	1:A:24:ALA:H	17	19.71
(4,114)	1:A:56:PHE:CB	1:A:23:TYR:H	15	19.71
(4,218)	1:A:86:CYS:CB	1:A:47:GLY:H	2	19.7
(4,95)	1:A:49:GLN:CB	1:A:108:SER:H	3	19.69
(4,94)	1:A:49:GLN:CB	1:A:107:ARG:H	4	19.69
(4,157)	1:A:56:PHE:CB	1:A:102:ARG:H	6	19.67
(4,157)	1:A:56:PHE:CB	1:A:102:ARG:H	14	19.67
(1,321)	1:A:75:SER:CB	1:A:20:LEU:H	6	19.67
(4,148)	1:A:56:PHE:CB	1:A:91:LEU:H	19	19.65
(1,324)	1:A:75:SER:CB	1:A:23:TYR:H	3	19.65
(4,46)	1:A:49:GLN:CB	1:A:15:ALA:H	2	19.64
(4,158)	1:A:56:PHE:CB	1:A:103:SER:H	15	19.62

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,323)	1:A:75:SER:CB	1:A:22:GLU:H	12	19.62
(4,77)	1:A:49:GLN:CB	1:A:83:SER:H	9	19.61
(4,114)	1:A:56:PHE:CB	1:A:23:TYR:H	5	19.61
(1,324)	1:A:75:SER:CB	1:A:23:TYR:H	9	19.6
(4,218)	1:A:86:CYS:CB	1:A:47:GLY:H	6	19.58
(4,218)	1:A:86:CYS:CB	1:A:47:GLY:H	10	19.58
(4,218)	1:A:86:CYS:CB	1:A:47:GLY:H	12	19.58
(4,93)	1:A:49:GLN:CB	1:A:106:GLN:H	18	19.57
(1,322)	1:A:75:SER:CB	1:A:21:GLY:H	15	19.57
(4,94)	1:A:49:GLN:CB	1:A:107:ARG:H	7	19.56
(4,93)	1:A:49:GLN:CB	1:A:106:GLN:H	7	19.56
(4,148)	1:A:56:PHE:CB	1:A:91:LEU:H	16	19.56
(1,322)	1:A:75:SER:CB	1:A:21:GLY:H	6	19.56
(4,90)	1:A:49:GLN:CB	1:A:103:SER:H	16	19.55
(4,25)	1:A:26:CYS:CB	1:A:69:VAL:H	10	19.55
(4,218)	1:A:86:CYS:CB	1:A:47:GLY:H	1	19.54
(4,114)	1:A:56:PHE:CB	1:A:23:TYR:H	14	19.54
(4,113)	1:A:56:PHE:CB	1:A:22:GLU:H	5	19.54
(4,77)	1:A:49:GLN:CB	1:A:83:SER:H	16	19.53
(4,29)	1:A:26:CYS:CB	1:A:73:VAL:H	17	19.53
(4,148)	1:A:56:PHE:CB	1:A:91:LEU:H	4	19.52
(4,28)	1:A:26:CYS:CB	1:A:72:SER:H	4	19.51
(4,48)	1:A:49:GLN:CB	1:A:17:HIS:H	8	19.5
(4,49)	1:A:49:GLN:CB	1:A:19:GLY:H	5	19.47
(4,92)	1:A:49:GLN:CB	1:A:105:ASP:H	17	19.46
(4,25)	1:A:26:CYS:CB	1:A:69:VAL:H	6	19.46
(4,218)	1:A:86:CYS:CB	1:A:47:GLY:H	18	19.46
(1,324)	1:A:75:SER:CB	1:A:23:TYR:H	1	19.46
(4,27)	1:A:26:CYS:CB	1:A:71:GLY:H	17	19.45
(4,21)	1:A:26:CYS:CB	1:A:64:LEU:H	20	19.45
(1,324)	1:A:75:SER:CB	1:A:23:TYR:H	11	19.43
(1,320)	1:A:75:SER:CB	1:A:19:GLY:H	20	19.43
(1,323)	1:A:75:SER:CB	1:A:22:GLU:H	14	19.42
(4,44)	1:A:26:CYS:CB	1:A:107:ARG:H	13	19.41
(4,115)	1:A:56:PHE:CB	1:A:24:ALA:H	9	19.41
(4,77)	1:A:49:GLN:CB	1:A:83:SER:H	19	19.37
(4,95)	1:A:49:GLN:CB	1:A:108:SER:H	11	19.36
(4,50)	1:A:49:GLN:CB	1:A:20:LEU:H	17	19.36
(1,322)	1:A:75:SER:CB	1:A:21:GLY:H	10	19.36
(1,323)	1:A:75:SER:CB	1:A:22:GLU:H	7	19.35
(4,27)	1:A:26:CYS:CB	1:A:71:GLY:H	2	19.33
(4,157)	1:A:56:PHE:CB	1:A:102:ARG:H	3	19.33

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,47)	1:A:49:GLN:CB	1:A:16:LYS:H	1	19.32
(1,321)	1:A:75:SER:CB	1:A:20:LEU:H	14	19.3
(4,26)	1:A:26:CYS:CB	1:A:70:ALA:H	5	19.29
(4,116)	1:A:56:PHE:CB	1:A:25:ALA:H	11	19.29
(1,323)	1:A:75:SER:CB	1:A:22:GLU:H	6	19.29
(4,78)	1:A:49:GLN:CB	1:A:85:LYS:H	4	19.28
(4,77)	1:A:49:GLN:CB	1:A:83:SER:H	14	19.27
(4,50)	1:A:49:GLN:CB	1:A:20:LEU:H	9	19.26
(4,93)	1:A:49:GLN:CB	1:A:106:GLN:H	5	19.24
(1,322)	1:A:75:SER:CB	1:A:21:GLY:H	14	19.23
(4,89)	1:A:49:GLN:CB	1:A:102:ARG:H	13	19.19
(4,29)	1:A:26:CYS:CB	1:A:73:VAL:H	3	19.19
(4,27)	1:A:26:CYS:CB	1:A:71:GLY:H	13	19.18
(4,47)	1:A:49:GLN:CB	1:A:16:LYS:H	13	19.17
(4,18)	1:A:26:CYS:CB	1:A:58:TYR:H	17	19.17
(1,323)	1:A:75:SER:CB	1:A:22:GLU:H	1	19.16
(4,92)	1:A:49:GLN:CB	1:A:105:ASP:H	12	19.15
(4,46)	1:A:49:GLN:CB	1:A:15:ALA:H	20	19.15
(4,92)	1:A:49:GLN:CB	1:A:105:ASP:H	10	19.14
(4,217)	1:A:86:CYS:CB	1:A:46:PHE:H	10	19.14
(4,216)	1:A:86:CYS:CB	1:A:44:MET:H	9	19.14
(4,46)	1:A:49:GLN:CB	1:A:15:ALA:H	3	19.1
(4,216)	1:A:86:CYS:CB	1:A:44:MET:H	20	19.1
(4,156)	1:A:56:PHE:CB	1:A:101:ASP:H	3	19.1
(4,116)	1:A:56:PHE:CB	1:A:25:ALA:H	4	19.09
(4,27)	1:A:26:CYS:CB	1:A:71:GLY:H	3	19.08
(4,49)	1:A:49:GLN:CB	1:A:19:GLY:H	17	19.07
(4,47)	1:A:49:GLN:CB	1:A:16:LYS:H	8	19.07
(4,27)	1:A:26:CYS:CB	1:A:71:GLY:H	16	19.07
(4,217)	1:A:86:CYS:CB	1:A:46:PHE:H	20	19.07
(4,147)	1:A:56:PHE:CB	1:A:90:TRP:H	11	19.07
(4,46)	1:A:49:GLN:CB	1:A:15:ALA:H	8	19.06
(4,22)	1:A:26:CYS:CB	1:A:65:LEU:H	15	19.06
(4,217)	1:A:86:CYS:CB	1:A:46:PHE:H	9	19.06
(1,320)	1:A:75:SER:CB	1:A:19:GLY:H	14	19.05
(4,77)	1:A:49:GLN:CB	1:A:83:SER:H	12	19.04
(1,324)	1:A:75:SER:CB	1:A:23:TYR:H	8	19.04
(4,49)	1:A:49:GLN:CB	1:A:19:GLY:H	19	19.0
(4,94)	1:A:49:GLN:CB	1:A:107:ARG:H	11	18.99
(4,161)	1:A:56:PHE:CB	1:A:106:GLN:H	2	18.99
(4,29)	1:A:26:CYS:CB	1:A:73:VAL:H	16	18.98
(4,116)	1:A:56:PHE:CB	1:A:25:ALA:H	20	18.98

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,94)	1:A:49:GLN:CB	1:A:107:ARG:H	5	18.97
(4,77)	1:A:49:GLN:CB	1:A:83:SER:H	3	18.97
(4,147)	1:A:56:PHE:CB	1:A:90:TRP:H	15	18.97
(1,324)	1:A:75:SER:CB	1:A:23:TYR:H	18	18.97
(4,157)	1:A:56:PHE:CB	1:A:102:ARG:H	17	18.96
(1,323)	1:A:75:SER:CB	1:A:22:GLU:H	11	18.95
(4,27)	1:A:26:CYS:CB	1:A:71:GLY:H	19	18.94
(4,27)	1:A:26:CYS:CB	1:A:71:GLY:H	7	18.92
(4,159)	1:A:56:PHE:CB	1:A:104:THR:H	14	18.92
(4,116)	1:A:56:PHE:CB	1:A:25:ALA:H	8	18.91
(1,324)	1:A:75:SER:CB	1:A:23:TYR:H	16	18.91
(4,23)	1:A:26:CYS:CB	1:A:66:VAL:H	20	18.9
(4,30)	1:A:26:CYS:CB	1:A:74:VAL:H	4	18.88
(4,29)	1:A:26:CYS:CB	1:A:73:VAL:H	2	18.88
(4,159)	1:A:56:PHE:CB	1:A:104:THR:H	3	18.87
(4,115)	1:A:56:PHE:CB	1:A:24:ALA:H	5	18.87
(4,50)	1:A:49:GLN:CB	1:A:20:LEU:H	12	18.86
(1,323)	1:A:75:SER:CB	1:A:22:GLU:H	19	18.86
(1,324)	1:A:75:SER:CB	1:A:23:TYR:H	19	18.85
(4,77)	1:A:49:GLN:CB	1:A:83:SER:H	1	18.84
(4,117)	1:A:56:PHE:CB	1:A:26:CYS:H	4	18.84
(4,28)	1:A:26:CYS:CB	1:A:72:SER:H	17	18.82
(4,216)	1:A:86:CYS:CB	1:A:44:MET:H	10	18.81
(4,77)	1:A:49:GLN:CB	1:A:83:SER:H	18	18.8
(4,116)	1:A:56:PHE:CB	1:A:25:ALA:H	13	18.79
(4,88)	1:A:49:GLN:CB	1:A:101:ASP:H	4	18.78
(4,29)	1:A:26:CYS:CB	1:A:73:VAL:H	19	18.78
(4,115)	1:A:56:PHE:CB	1:A:24:ALA:H	3	18.78
(1,323)	1:A:75:SER:CB	1:A:22:GLU:H	8	18.77
(4,147)	1:A:56:PHE:CB	1:A:90:TRP:H	20	18.76
(4,29)	1:A:26:CYS:CB	1:A:73:VAL:H	9	18.75
(4,156)	1:A:56:PHE:CB	1:A:101:ASP:H	10	18.75
(4,29)	1:A:26:CYS:CB	1:A:73:VAL:H	18	18.74
(4,220)	1:A:86:CYS:CB	1:A:49:GLN:H	4	18.73
(4,18)	1:A:26:CYS:CB	1:A:58:TYR:H	9	18.73
(4,115)	1:A:56:PHE:CB	1:A:24:ALA:H	18	18.73
(1,323)	1:A:75:SER:CB	1:A:22:GLU:H	16	18.73
(4,77)	1:A:49:GLN:CB	1:A:83:SER:H	8	18.72
(4,77)	1:A:49:GLN:CB	1:A:83:SER:H	11	18.72
(4,217)	1:A:86:CYS:CB	1:A:46:PHE:H	17	18.7
(1,325)	1:A:75:SER:CB	1:A:24:ALA:H	13	18.67
(4,158)	1:A:56:PHE:CB	1:A:103:SER:H	14	18.66

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,48)	1:A:49:GLN:CB	1:A:17:HIS:H	7	18.65
(4,27)	1:A:26:CYS:CB	1:A:71:GLY:H	9	18.65
(4,116)	1:A:56:PHE:CB	1:A:25:ALA:H	2	18.65
(4,216)	1:A:86:CYS:CB	1:A:44:MET:H	15	18.64
(4,117)	1:A:56:PHE:CB	1:A:26:CYS:H	11	18.64
(4,89)	1:A:49:GLN:CB	1:A:102:ARG:H	4	18.63
(4,49)	1:A:49:GLN:CB	1:A:19:GLY:H	10	18.63
(4,159)	1:A:56:PHE:CB	1:A:104:THR:H	6	18.63
(4,219)	1:A:86:CYS:CB	1:A:48:LEU:H	4	18.61
(4,26)	1:A:26:CYS:CB	1:A:70:ALA:H	10	18.59
(4,18)	1:A:26:CYS:CB	1:A:58:TYR:H	2	18.59
(4,18)	1:A:26:CYS:CB	1:A:58:TYR:H	3	18.59
(4,17)	1:A:26:CYS:CB	1:A:56:PHE:H	4	18.59
(4,29)	1:A:26:CYS:CB	1:A:73:VAL:H	13	18.57
(4,114)	1:A:56:PHE:CB	1:A:23:TYR:H	6	18.55
(1,322)	1:A:75:SER:CB	1:A:21:GLY:H	19	18.55
(4,26)	1:A:26:CYS:CB	1:A:70:ALA:H	6	18.54
(4,21)	1:A:26:CYS:CB	1:A:64:LEU:H	15	18.54
(4,217)	1:A:86:CYS:CB	1:A:46:PHE:H	5	18.53
(4,217)	1:A:86:CYS:CB	1:A:46:PHE:H	6	18.53
(4,18)	1:A:26:CYS:CB	1:A:58:TYR:H	11	18.53
(4,216)	1:A:86:CYS:CB	1:A:44:MET:H	5	18.51
(4,46)	1:A:49:GLN:CB	1:A:15:ALA:H	13	18.5
(4,28)	1:A:26:CYS:CB	1:A:72:SER:H	3	18.5
(4,216)	1:A:86:CYS:CB	1:A:44:MET:H	17	18.48
(1,335)	1:A:86:CYS:CB	1:A:70:ALA:H	17	18.48
(4,217)	1:A:86:CYS:CB	1:A:46:PHE:H	8	18.47
(4,216)	1:A:86:CYS:CB	1:A:44:MET:H	7	18.46
(4,116)	1:A:56:PHE:CB	1:A:25:ALA:H	15	18.46
(1,335)	1:A:86:CYS:CB	1:A:70:ALA:H	9	18.46
(4,216)	1:A:86:CYS:CB	1:A:44:MET:H	8	18.45
(1,325)	1:A:75:SER:CB	1:A:24:ALA:H	12	18.45
(4,75)	1:A:49:GLN:CB	1:A:81:VAL:H	17	18.44
(4,50)	1:A:49:GLN:CB	1:A:20:LEU:H	20	18.44
(4,217)	1:A:86:CYS:CB	1:A:46:PHE:H	15	18.44
(1,335)	1:A:86:CYS:CB	1:A:70:ALA:H	12	18.44
(4,50)	1:A:49:GLN:CB	1:A:20:LEU:H	8	18.43
(4,163)	1:A:56:PHE:CB	1:A:108:SER:H	6	18.43
(4,116)	1:A:56:PHE:CB	1:A:25:ALA:H	17	18.43
(1,335)	1:A:86:CYS:CB	1:A:70:ALA:H	18	18.43
(4,50)	1:A:49:GLN:CB	1:A:20:LEU:H	1	18.42
(1,335)	1:A:86:CYS:CB	1:A:70:ALA:H	4	18.41

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,160)	1:A:56:PHE:CB	1:A:105:ASP:H	6	18.4
(1,335)	1:A:86:CYS:CB	1:A:70:ALA:H	3	18.4
(1,335)	1:A:86:CYS:CB	1:A:70:ALA:H	5	18.4
(1,335)	1:A:86:CYS:CB	1:A:70:ALA:H	7	18.4
(1,335)	1:A:86:CYS:CB	1:A:70:ALA:H	19	18.4
(4,29)	1:A:26:CYS:CB	1:A:73:VAL:H	7	18.39
(4,216)	1:A:86:CYS:CB	1:A:44:MET:H	3	18.39
(1,335)	1:A:86:CYS:CB	1:A:70:ALA:H	1	18.39
(4,50)	1:A:49:GLN:CB	1:A:20:LEU:H	11	18.38
(4,147)	1:A:56:PHE:CB	1:A:90:TRP:H	10	18.38
(1,335)	1:A:86:CYS:CB	1:A:70:ALA:H	11	18.38
(4,147)	1:A:56:PHE:CB	1:A:90:TRP:H	18	18.37
(1,322)	1:A:75:SER:CB	1:A:21:GLY:H	16	18.37
(4,92)	1:A:49:GLN:CB	1:A:105:ASP:H	4	18.36
(4,159)	1:A:56:PHE:CB	1:A:104:THR:H	18	18.36
(4,147)	1:A:56:PHE:CB	1:A:90:TRP:H	9	18.36
(4,116)	1:A:56:PHE:CB	1:A:25:ALA:H	12	18.36
(1,335)	1:A:86:CYS:CB	1:A:70:ALA:H	10	18.36
(4,156)	1:A:56:PHE:CB	1:A:101:ASP:H	17	18.35
(1,335)	1:A:86:CYS:CB	1:A:70:ALA:H	2	18.34
(4,77)	1:A:49:GLN:CB	1:A:83:SER:H	10	18.33
(4,27)	1:A:26:CYS:CB	1:A:71:GLY:H	8	18.33
(1,335)	1:A:86:CYS:CB	1:A:70:ALA:H	14	18.32
(1,335)	1:A:86:CYS:CB	1:A:70:ALA:H	15	18.32
(4,28)	1:A:26:CYS:CB	1:A:72:SER:H	16	18.31
(1,335)	1:A:86:CYS:CB	1:A:70:ALA:H	13	18.31
(4,17)	1:A:26:CYS:CB	1:A:56:PHE:H	2	18.3
(4,160)	1:A:56:PHE:CB	1:A:105:ASP:H	15	18.3
(1,335)	1:A:86:CYS:CB	1:A:70:ALA:H	8	18.3
(4,49)	1:A:49:GLN:CB	1:A:19:GLY:H	6	18.28
(4,28)	1:A:26:CYS:CB	1:A:72:SER:H	2	18.28
(4,218)	1:A:86:CYS:CB	1:A:47:GLY:H	19	18.28
(4,161)	1:A:56:PHE:CB	1:A:106:GLN:H	15	18.28
(4,157)	1:A:56:PHE:CB	1:A:102:ARG:H	1	18.28
(1,322)	1:A:75:SER:CB	1:A:21:GLY:H	5	18.28
(4,49)	1:A:49:GLN:CB	1:A:19:GLY:H	18	18.27
(4,116)	1:A:56:PHE:CB	1:A:25:ALA:H	9	18.27
(1,335)	1:A:86:CYS:CB	1:A:70:ALA:H	16	18.25
(1,335)	1:A:86:CYS:CB	1:A:70:ALA:H	20	18.25
(4,217)	1:A:86:CYS:CB	1:A:46:PHE:H	3	18.24
(4,77)	1:A:49:GLN:CB	1:A:83:SER:H	7	18.23
(4,92)	1:A:49:GLN:CB	1:A:105:ASP:H	5	18.22

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,216)	1:A:86:CYS:CB	1:A:44:MET:H	12	18.22
(4,17)	1:A:26:CYS:CB	1:A:56:PHE:H	8	18.22
(1,325)	1:A:75:SER:CB	1:A:24:ALA:H	2	18.22
(1,324)	1:A:75:SER:CB	1:A:23:TYR:H	10	18.22
(4,218)	1:A:86:CYS:CB	1:A:47:GLY:H	16	18.21
(4,161)	1:A:56:PHE:CB	1:A:106:GLN:H	14	18.21
(4,27)	1:A:26:CYS:CB	1:A:71:GLY:H	18	18.2
(1,325)	1:A:75:SER:CB	1:A:24:ALA:H	8	18.2
(1,325)	1:A:75:SER:CB	1:A:24:ALA:H	11	18.2
(4,50)	1:A:49:GLN:CB	1:A:20:LEU:H	3	18.19
(1,335)	1:A:86:CYS:CB	1:A:70:ALA:H	6	18.19
(1,325)	1:A:75:SER:CB	1:A:24:ALA:H	7	18.19
(4,216)	1:A:86:CYS:CB	1:A:44:MET:H	13	18.18
(4,50)	1:A:49:GLN:CB	1:A:20:LEU:H	5	18.17
(4,77)	1:A:49:GLN:CB	1:A:83:SER:H	20	18.16
(4,147)	1:A:56:PHE:CB	1:A:90:TRP:H	3	18.16
(4,30)	1:A:26:CYS:CB	1:A:74:VAL:H	17	18.15
(4,17)	1:A:26:CYS:CB	1:A:56:PHE:H	17	18.15
(4,16)	1:A:26:CYS:CB	1:A:55:LYS:H	8	18.15
(4,157)	1:A:56:PHE:CB	1:A:102:ARG:H	2	18.15
(4,116)	1:A:56:PHE:CB	1:A:25:ALA:H	7	18.14
(4,50)	1:A:49:GLN:CB	1:A:20:LEU:H	2	18.12
(4,28)	1:A:26:CYS:CB	1:A:72:SER:H	19	18.12
(4,158)	1:A:56:PHE:CB	1:A:103:SER:H	18	18.12
(4,77)	1:A:49:GLN:CB	1:A:83:SER:H	13	18.11
(4,117)	1:A:56:PHE:CB	1:A:26:CYS:H	2	18.11
(4,115)	1:A:56:PHE:CB	1:A:24:ALA:H	19	18.11
(4,93)	1:A:49:GLN:CB	1:A:106:GLN:H	4	18.1
(4,159)	1:A:56:PHE:CB	1:A:104:THR:H	2	18.1
(4,117)	1:A:56:PHE:CB	1:A:26:CYS:H	17	18.1
(4,217)	1:A:86:CYS:CB	1:A:46:PHE:H	18	18.09
(1,320)	1:A:75:SER:CB	1:A:19:GLY:H	15	18.09
(4,50)	1:A:49:GLN:CB	1:A:20:LEU:H	15	18.08
(4,157)	1:A:56:PHE:CB	1:A:102:ARG:H	9	18.08
(4,50)	1:A:49:GLN:CB	1:A:20:LEU:H	13	18.07
(4,27)	1:A:26:CYS:CB	1:A:71:GLY:H	12	18.07
(4,46)	1:A:49:GLN:CB	1:A:15:ALA:H	16	18.06
(4,76)	1:A:49:GLN:CB	1:A:82:GLU:H	17	18.05
(4,28)	1:A:26:CYS:CB	1:A:72:SER:H	9	18.05
(4,23)	1:A:26:CYS:CB	1:A:66:VAL:H	15	18.05
(4,163)	1:A:56:PHE:CB	1:A:108:SER:H	2	18.05
(4,117)	1:A:56:PHE:CB	1:A:26:CYS:H	9	18.05

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,216)	1:A:86:CYS:CB	1:A:44:MET:H	18	18.04
(4,75)	1:A:49:GLN:CB	1:A:81:VAL:H	6	18.03
(4,147)	1:A:56:PHE:CB	1:A:90:TRP:H	1	18.01
(4,95)	1:A:49:GLN:CB	1:A:108:SER:H	20	18.0
(4,75)	1:A:49:GLN:CB	1:A:81:VAL:H	5	18.0
(4,49)	1:A:49:GLN:CB	1:A:19:GLY:H	3	18.0
(4,47)	1:A:49:GLN:CB	1:A:16:LYS:H	2	18.0
(4,27)	1:A:26:CYS:CB	1:A:71:GLY:H	1	18.0
(4,147)	1:A:56:PHE:CB	1:A:90:TRP:H	6	18.0
(1,324)	1:A:75:SER:CB	1:A:23:TYR:H	5	18.0
(4,17)	1:A:26:CYS:CB	1:A:56:PHE:H	13	17.99
(4,28)	1:A:26:CYS:CB	1:A:72:SER:H	13	17.98
(4,17)	1:A:26:CYS:CB	1:A:56:PHE:H	9	17.98
(4,17)	1:A:26:CYS:CB	1:A:56:PHE:H	11	17.98
(4,158)	1:A:56:PHE:CB	1:A:103:SER:H	9	17.98
(4,147)	1:A:56:PHE:CB	1:A:90:TRP:H	17	17.98
(1,325)	1:A:75:SER:CB	1:A:24:ALA:H	17	17.98
(4,51)	1:A:49:GLN:CB	1:A:21:GLY:H	9	17.97
(4,50)	1:A:49:GLN:CB	1:A:20:LEU:H	18	17.97
(4,28)	1:A:26:CYS:CB	1:A:72:SER:H	18	17.97
(4,48)	1:A:49:GLN:CB	1:A:17:HIS:H	11	17.96
(4,29)	1:A:26:CYS:CB	1:A:73:VAL:H	1	17.96
(1,325)	1:A:75:SER:CB	1:A:24:ALA:H	1	17.96
(4,76)	1:A:49:GLN:CB	1:A:82:GLU:H	6	17.95
(4,218)	1:A:86:CYS:CB	1:A:47:GLY:H	14	17.95
(4,158)	1:A:56:PHE:CB	1:A:103:SER:H	6	17.95
(4,117)	1:A:56:PHE:CB	1:A:26:CYS:H	13	17.95
(4,75)	1:A:49:GLN:CB	1:A:81:VAL:H	9	17.94
(4,51)	1:A:49:GLN:CB	1:A:21:GLY:H	17	17.94
(4,75)	1:A:49:GLN:CB	1:A:81:VAL:H	16	17.93
(4,160)	1:A:56:PHE:CB	1:A:105:ASP:H	20	17.93
(4,16)	1:A:26:CYS:CB	1:A:55:LYS:H	2	17.93
(4,147)	1:A:56:PHE:CB	1:A:90:TRP:H	13	17.93
(4,115)	1:A:56:PHE:CB	1:A:24:ALA:H	16	17.93
(4,48)	1:A:49:GLN:CB	1:A:17:HIS:H	12	17.92
(4,156)	1:A:56:PHE:CB	1:A:101:ASP:H	8	17.92
(4,16)	1:A:26:CYS:CB	1:A:55:LYS:H	4	17.91
(4,16)	1:A:26:CYS:CB	1:A:55:LYS:H	13	17.91
(4,147)	1:A:56:PHE:CB	1:A:90:TRP:H	7	17.91
(4,147)	1:A:56:PHE:CB	1:A:90:TRP:H	8	17.91
(4,29)	1:A:26:CYS:CB	1:A:73:VAL:H	12	17.9
(4,26)	1:A:26:CYS:CB	1:A:70:ALA:H	11	17.9

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,50)	1:A:49:GLN:CB	1:A:20:LEU:H	19	17.89
(4,217)	1:A:86:CYS:CB	1:A:46:PHE:H	12	17.89
(4,147)	1:A:56:PHE:CB	1:A:90:TRP:H	2	17.89
(4,117)	1:A:56:PHE:CB	1:A:26:CYS:H	8	17.89
(4,95)	1:A:49:GLN:CB	1:A:108:SER:H	18	17.88
(1,324)	1:A:75:SER:CB	1:A:23:TYR:H	20	17.87
(4,30)	1:A:26:CYS:CB	1:A:74:VAL:H	2	17.86
(4,30)	1:A:26:CYS:CB	1:A:74:VAL:H	3	17.85
(4,16)	1:A:26:CYS:CB	1:A:55:LYS:H	17	17.84
(1,323)	1:A:75:SER:CB	1:A:22:GLU:H	20	17.84
(4,75)	1:A:49:GLN:CB	1:A:81:VAL:H	8	17.83
(4,47)	1:A:49:GLN:CB	1:A:16:LYS:H	12	17.83
(4,216)	1:A:86:CYS:CB	1:A:44:MET:H	1	17.83
(4,147)	1:A:56:PHE:CB	1:A:90:TRP:H	12	17.83
(4,18)	1:A:26:CYS:CB	1:A:58:TYR:H	8	17.82
(4,18)	1:A:26:CYS:CB	1:A:58:TYR:H	13	17.82
(4,30)	1:A:26:CYS:CB	1:A:74:VAL:H	13	17.81
(4,74)	1:A:49:GLN:CB	1:A:80:ARG:H	17	17.78
(4,28)	1:A:26:CYS:CB	1:A:72:SER:H	7	17.77
(4,50)	1:A:49:GLN:CB	1:A:20:LEU:H	7	17.76
(4,160)	1:A:56:PHE:CB	1:A:105:ASP:H	2	17.76
(1,325)	1:A:75:SER:CB	1:A:24:ALA:H	20	17.76
(1,323)	1:A:75:SER:CB	1:A:22:GLU:H	10	17.76
(4,18)	1:A:26:CYS:CB	1:A:58:TYR:H	16	17.75
(4,76)	1:A:49:GLN:CB	1:A:82:GLU:H	9	17.73
(4,49)	1:A:49:GLN:CB	1:A:19:GLY:H	11	17.73
(1,325)	1:A:75:SER:CB	1:A:24:ALA:H	4	17.73
(4,75)	1:A:49:GLN:CB	1:A:81:VAL:H	19	17.72
(4,30)	1:A:26:CYS:CB	1:A:74:VAL:H	16	17.72
(4,215)	1:A:86:CYS:CB	1:A:43:GLY:H	8	17.68
(4,215)	1:A:86:CYS:CB	1:A:43:GLY:H	11	17.68
(4,147)	1:A:56:PHE:CB	1:A:90:TRP:H	5	17.68
(4,156)	1:A:56:PHE:CB	1:A:101:ASP:H	12	17.67
(4,116)	1:A:56:PHE:CB	1:A:25:ALA:H	1	17.67
(4,77)	1:A:49:GLN:CB	1:A:83:SER:H	15	17.66
(4,76)	1:A:49:GLN:CB	1:A:82:GLU:H	5	17.66
(4,216)	1:A:86:CYS:CB	1:A:44:MET:H	6	17.66
(4,18)	1:A:26:CYS:CB	1:A:58:TYR:H	7	17.65
(4,217)	1:A:86:CYS:CB	1:A:46:PHE:H	1	17.64
(4,18)	1:A:26:CYS:CB	1:A:58:TYR:H	14	17.64
(4,162)	1:A:56:PHE:CB	1:A:107:ARG:H	14	17.64
(4,77)	1:A:49:GLN:CB	1:A:83:SER:H	2	17.63

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,49)	1:A:49:GLN:CB	1:A:19:GLY:H	16	17.63
(4,30)	1:A:26:CYS:CB	1:A:74:VAL:H	19	17.63
(4,93)	1:A:49:GLN:CB	1:A:106:GLN:H	12	17.62
(4,16)	1:A:26:CYS:CB	1:A:55:LYS:H	9	17.62
(4,74)	1:A:49:GLN:CB	1:A:80:ARG:H	5	17.6
(4,30)	1:A:26:CYS:CB	1:A:74:VAL:H	7	17.58
(4,75)	1:A:49:GLN:CB	1:A:81:VAL:H	14	17.56
(4,91)	1:A:49:GLN:CB	1:A:104:THR:H	4	17.55
(4,158)	1:A:56:PHE:CB	1:A:103:SER:H	12	17.55
(4,74)	1:A:49:GLN:CB	1:A:80:ARG:H	16	17.54
(4,49)	1:A:49:GLN:CB	1:A:19:GLY:H	12	17.54
(4,116)	1:A:56:PHE:CB	1:A:25:ALA:H	10	17.54
(4,76)	1:A:49:GLN:CB	1:A:82:GLU:H	10	17.53
(4,217)	1:A:86:CYS:CB	1:A:46:PHE:H	7	17.53
(4,217)	1:A:86:CYS:CB	1:A:46:PHE:H	13	17.53
(1,325)	1:A:75:SER:CB	1:A:24:ALA:H	10	17.53
(4,76)	1:A:49:GLN:CB	1:A:82:GLU:H	16	17.52
(4,50)	1:A:49:GLN:CB	1:A:20:LEU:H	14	17.5
(4,147)	1:A:56:PHE:CB	1:A:90:TRP:H	14	17.49
(4,18)	1:A:26:CYS:CB	1:A:58:TYR:H	19	17.48
(4,27)	1:A:26:CYS:CB	1:A:71:GLY:H	14	17.47
(4,76)	1:A:49:GLN:CB	1:A:82:GLU:H	8	17.46
(4,46)	1:A:49:GLN:CB	1:A:15:ALA:H	1	17.46
(4,48)	1:A:49:GLN:CB	1:A:17:HIS:H	2	17.45
(4,47)	1:A:49:GLN:CB	1:A:16:LYS:H	7	17.45
(4,18)	1:A:26:CYS:CB	1:A:58:TYR:H	10	17.45
(4,117)	1:A:56:PHE:CB	1:A:26:CYS:H	7	17.45
(4,17)	1:A:26:CYS:CB	1:A:56:PHE:H	7	17.44
(4,117)	1:A:56:PHE:CB	1:A:26:CYS:H	3	17.44
(4,116)	1:A:56:PHE:CB	1:A:25:ALA:H	3	17.41
(4,49)	1:A:49:GLN:CB	1:A:19:GLY:H	4	17.39
(4,18)	1:A:26:CYS:CB	1:A:58:TYR:H	12	17.39
(4,17)	1:A:26:CYS:CB	1:A:56:PHE:H	3	17.39
(4,146)	1:A:56:PHE:CB	1:A:88:ASN:H	11	17.39
(4,76)	1:A:49:GLN:CB	1:A:82:GLU:H	19	17.37
(4,216)	1:A:86:CYS:CB	1:A:44:MET:H	2	17.36
(4,163)	1:A:56:PHE:CB	1:A:108:SER:H	15	17.34
(4,75)	1:A:49:GLN:CB	1:A:81:VAL:H	12	17.33
(4,49)	1:A:49:GLN:CB	1:A:19:GLY:H	1	17.33
(1,325)	1:A:75:SER:CB	1:A:24:ALA:H	9	17.33
(1,323)	1:A:75:SER:CB	1:A:22:GLU:H	5	17.33
(4,76)	1:A:49:GLN:CB	1:A:82:GLU:H	14	17.3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,74)	1:A:49:GLN:CB	1:A:80:ARG:H	9	17.3
(4,51)	1:A:49:GLN:CB	1:A:21:GLY:H	20	17.3
(4,90)	1:A:49:GLN:CB	1:A:103:SER:H	13	17.28
(4,160)	1:A:56:PHE:CB	1:A:105:ASP:H	3	17.28
(4,146)	1:A:56:PHE:CB	1:A:88:ASN:H	15	17.28
(1,319)	1:A:75:SER:CB	1:A:17:HIS:H	15	17.28
(4,74)	1:A:49:GLN:CB	1:A:80:ARG:H	6	17.27
(4,49)	1:A:49:GLN:CB	1:A:19:GLY:H	2	17.27
(4,117)	1:A:56:PHE:CB	1:A:26:CYS:H	12	17.27
(4,50)	1:A:49:GLN:CB	1:A:20:LEU:H	10	17.26
(4,217)	1:A:86:CYS:CB	1:A:46:PHE:H	16	17.26
(4,146)	1:A:56:PHE:CB	1:A:88:ASN:H	10	17.26
(4,28)	1:A:26:CYS:CB	1:A:72:SER:H	1	17.25
(4,115)	1:A:56:PHE:CB	1:A:24:ALA:H	14	17.25
(4,91)	1:A:49:GLN:CB	1:A:104:THR:H	8	17.24
(4,50)	1:A:49:GLN:CB	1:A:20:LEU:H	16	17.24
(4,49)	1:A:49:GLN:CB	1:A:19:GLY:H	13	17.24
(4,156)	1:A:56:PHE:CB	1:A:101:ASP:H	5	17.24
(4,156)	1:A:56:PHE:CB	1:A:101:ASP:H	11	17.24
(4,74)	1:A:49:GLN:CB	1:A:80:ARG:H	19	17.23
(4,30)	1:A:26:CYS:CB	1:A:74:VAL:H	9	17.23
(4,28)	1:A:26:CYS:CB	1:A:72:SER:H	12	17.23
(4,18)	1:A:26:CYS:CB	1:A:58:TYR:H	1	17.23
(4,90)	1:A:49:GLN:CB	1:A:103:SER:H	4	17.22
(4,217)	1:A:86:CYS:CB	1:A:46:PHE:H	19	17.17
(4,16)	1:A:26:CYS:CB	1:A:55:LYS:H	11	17.17
(4,146)	1:A:56:PHE:CB	1:A:88:ASN:H	9	17.16
(4,146)	1:A:56:PHE:CB	1:A:88:ASN:H	20	17.16
(4,117)	1:A:56:PHE:CB	1:A:26:CYS:H	10	17.16
(4,156)	1:A:56:PHE:CB	1:A:101:ASP:H	14	17.15
(4,52)	1:A:49:GLN:CB	1:A:22:GLU:H	9	17.14
(4,216)	1:A:86:CYS:CB	1:A:44:MET:H	16	17.14
(4,46)	1:A:49:GLN:CB	1:A:15:ALA:H	15	17.13
(4,16)	1:A:26:CYS:CB	1:A:55:LYS:H	7	17.13
(4,76)	1:A:49:GLN:CB	1:A:82:GLU:H	11	17.12
(4,75)	1:A:49:GLN:CB	1:A:81:VAL:H	3	17.12
(4,217)	1:A:86:CYS:CB	1:A:46:PHE:H	2	17.12
(1,324)	1:A:75:SER:CB	1:A:23:TYR:H	14	17.12
(4,95)	1:A:49:GLN:CB	1:A:108:SER:H	17	17.11
(4,50)	1:A:49:GLN:CB	1:A:20:LEU:H	6	17.11
(1,325)	1:A:75:SER:CB	1:A:24:ALA:H	3	17.11
(4,146)	1:A:56:PHE:CB	1:A:88:ASN:H	18	17.1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,25)	1:A:26:CYS:CB	1:A:69:VAL:H	20	17.09
(4,147)	1:A:56:PHE:CB	1:A:90:TRP:H	19	17.09
(4,75)	1:A:49:GLN:CB	1:A:81:VAL:H	13	17.07
(4,17)	1:A:26:CYS:CB	1:A:56:PHE:H	10	17.07
(4,147)	1:A:56:PHE:CB	1:A:90:TRP:H	16	17.07
(4,116)	1:A:56:PHE:CB	1:A:25:ALA:H	18	17.07
(4,232)	1:A:86:CYS:CB	1:A:66:VAL:H	8	17.05
(4,159)	1:A:56:PHE:CB	1:A:104:THR:H	12	17.05
(1,325)	1:A:75:SER:CB	1:A:24:ALA:H	15	17.05
(4,232)	1:A:86:CYS:CB	1:A:66:VAL:H	9	17.04
(4,27)	1:A:26:CYS:CB	1:A:71:GLY:H	10	17.03
(4,232)	1:A:86:CYS:CB	1:A:66:VAL:H	4	17.03
(4,232)	1:A:86:CYS:CB	1:A:66:VAL:H	12	17.03
(4,232)	1:A:86:CYS:CB	1:A:66:VAL:H	14	17.03
(4,232)	1:A:86:CYS:CB	1:A:66:VAL:H	16	17.03
(4,232)	1:A:86:CYS:CB	1:A:66:VAL:H	17	17.03
(4,76)	1:A:49:GLN:CB	1:A:82:GLU:H	3	17.02
(4,232)	1:A:86:CYS:CB	1:A:66:VAL:H	1	17.02
(4,232)	1:A:86:CYS:CB	1:A:66:VAL:H	3	17.02
(4,232)	1:A:86:CYS:CB	1:A:66:VAL:H	5	17.02
(4,232)	1:A:86:CYS:CB	1:A:66:VAL:H	6	17.02
(4,232)	1:A:86:CYS:CB	1:A:66:VAL:H	7	17.02
(4,232)	1:A:86:CYS:CB	1:A:66:VAL:H	10	17.02
(4,232)	1:A:86:CYS:CB	1:A:66:VAL:H	19	17.02
(4,232)	1:A:86:CYS:CB	1:A:66:VAL:H	20	17.02
(4,74)	1:A:49:GLN:CB	1:A:80:ARG:H	14	17.01
(4,52)	1:A:49:GLN:CB	1:A:22:GLU:H	17	17.01
(4,232)	1:A:86:CYS:CB	1:A:66:VAL:H	11	17.01
(4,232)	1:A:86:CYS:CB	1:A:66:VAL:H	13	17.01
(4,232)	1:A:86:CYS:CB	1:A:66:VAL:H	15	17.01
(4,232)	1:A:86:CYS:CB	1:A:66:VAL:H	18	17.01
(4,147)	1:A:56:PHE:CB	1:A:90:TRP:H	4	17.01
(4,146)	1:A:56:PHE:CB	1:A:88:ASN:H	12	17.01
(4,76)	1:A:49:GLN:CB	1:A:82:GLU:H	12	17.0
(4,51)	1:A:49:GLN:CB	1:A:21:GLY:H	12	17.0
(4,30)	1:A:26:CYS:CB	1:A:74:VAL:H	18	17.0
(4,232)	1:A:86:CYS:CB	1:A:66:VAL:H	2	17.0
(4,194)	1:A:75:SER:CB	1:A:103:SER:H	9	17.0
(4,192)	1:A:75:SER:CB	1:A:101:ASP:H	15	17.0
(4,49)	1:A:49:GLN:CB	1:A:19:GLY:H	14	16.99
(4,218)	1:A:86:CYS:CB	1:A:47:GLY:H	4	16.99
(4,194)	1:A:75:SER:CB	1:A:103:SER:H	12	16.99

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,162)	1:A:56:PHE:CB	1:A:107:ARG:H	6	16.99
(1,323)	1:A:75:SER:CB	1:A:22:GLU:H	15	16.99
(4,45)	1:A:26:CYS:CB	1:A:108:SER:H	11	16.98
(4,188)	1:A:75:SER:CB	1:A:55:LYS:H	8	16.98
(4,146)	1:A:56:PHE:CB	1:A:88:ASN:H	7	16.98
(4,117)	1:A:56:PHE:CB	1:A:26:CYS:H	20	16.98
(4,117)	1:A:56:PHE:CB	1:A:26:CYS:H	18	16.97
(4,216)	1:A:86:CYS:CB	1:A:44:MET:H	19	16.96
(4,146)	1:A:56:PHE:CB	1:A:88:ASN:H	6	16.96
(4,192)	1:A:75:SER:CB	1:A:101:ASP:H	6	16.95
(4,146)	1:A:56:PHE:CB	1:A:88:ASN:H	3	16.95
(4,44)	1:A:26:CYS:CB	1:A:107:ARG:H	12	16.92
(4,193)	1:A:75:SER:CB	1:A:102:ARG:H	14	16.92
(4,49)	1:A:49:GLN:CB	1:A:19:GLY:H	8	16.91
(4,29)	1:A:26:CYS:CB	1:A:73:VAL:H	5	16.91
(4,158)	1:A:56:PHE:CB	1:A:103:SER:H	2	16.91
(4,158)	1:A:56:PHE:CB	1:A:103:SER:H	3	16.91
(4,146)	1:A:56:PHE:CB	1:A:88:ASN:H	13	16.91
(4,146)	1:A:56:PHE:CB	1:A:88:ASN:H	17	16.91
(4,234)	1:A:86:CYS:CB	1:A:68:VAL:H	20	16.89
(4,160)	1:A:56:PHE:CB	1:A:105:ASP:H	14	16.89
(4,16)	1:A:26:CYS:CB	1:A:55:LYS:H	3	16.89
(4,139)	1:A:56:PHE:CB	1:A:77:GLY:H	7	16.88
(4,139)	1:A:56:PHE:CB	1:A:77:GLY:H	13	16.88
(4,116)	1:A:56:PHE:CB	1:A:25:ALA:H	14	16.88
(4,76)	1:A:49:GLN:CB	1:A:82:GLU:H	1	16.87
(4,75)	1:A:49:GLN:CB	1:A:81:VAL:H	7	16.86
(4,74)	1:A:49:GLN:CB	1:A:80:ARG:H	12	16.86
(4,51)	1:A:49:GLN:CB	1:A:21:GLY:H	15	16.86
(4,234)	1:A:86:CYS:CB	1:A:68:VAL:H	8	16.86
(4,146)	1:A:56:PHE:CB	1:A:88:ASN:H	8	16.86
(4,49)	1:A:49:GLN:CB	1:A:19:GLY:H	20	16.85
(1,325)	1:A:75:SER:CB	1:A:24:ALA:H	5	16.85
(4,75)	1:A:49:GLN:CB	1:A:81:VAL:H	1	16.84
(4,146)	1:A:56:PHE:CB	1:A:88:ASN:H	1	16.84
(4,139)	1:A:56:PHE:CB	1:A:77:GLY:H	6	16.84
(4,18)	1:A:26:CYS:CB	1:A:58:TYR:H	18	16.83
(4,146)	1:A:56:PHE:CB	1:A:88:ASN:H	2	16.83
(4,117)	1:A:56:PHE:CB	1:A:26:CYS:H	1	16.83
(4,234)	1:A:86:CYS:CB	1:A:68:VAL:H	14	16.82
(4,139)	1:A:56:PHE:CB	1:A:77:GLY:H	12	16.82
(1,324)	1:A:75:SER:CB	1:A:23:TYR:H	6	16.82

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,139)	1:A:56:PHE:CB	1:A:77:GLY:H	17	16.81
(4,75)	1:A:49:GLN:CB	1:A:81:VAL:H	18	16.8
(4,234)	1:A:86:CYS:CB	1:A:68:VAL:H	15	16.8
(4,234)	1:A:86:CYS:CB	1:A:68:VAL:H	16	16.8
(4,217)	1:A:86:CYS:CB	1:A:46:PHE:H	14	16.8
(4,192)	1:A:75:SER:CB	1:A:101:ASP:H	1	16.8
(4,156)	1:A:56:PHE:CB	1:A:101:ASP:H	7	16.8
(4,139)	1:A:56:PHE:CB	1:A:77:GLY:H	3	16.8
(4,139)	1:A:56:PHE:CB	1:A:77:GLY:H	9	16.8
(4,76)	1:A:49:GLN:CB	1:A:82:GLU:H	18	16.79
(4,30)	1:A:26:CYS:CB	1:A:74:VAL:H	1	16.79
(4,30)	1:A:26:CYS:CB	1:A:74:VAL:H	12	16.79
(4,29)	1:A:26:CYS:CB	1:A:73:VAL:H	8	16.79
(4,234)	1:A:86:CYS:CB	1:A:68:VAL:H	19	16.78
(4,18)	1:A:26:CYS:CB	1:A:58:TYR:H	6	16.78
(4,50)	1:A:49:GLN:CB	1:A:20:LEU:H	4	16.77
(4,27)	1:A:26:CYS:CB	1:A:71:GLY:H	5	16.77
(4,234)	1:A:86:CYS:CB	1:A:68:VAL:H	4	16.77
(4,139)	1:A:56:PHE:CB	1:A:77:GLY:H	8	16.77
(4,117)	1:A:56:PHE:CB	1:A:26:CYS:H	14	16.77
(4,234)	1:A:86:CYS:CB	1:A:68:VAL:H	1	16.76
(4,234)	1:A:86:CYS:CB	1:A:68:VAL:H	11	16.76
(4,234)	1:A:86:CYS:CB	1:A:68:VAL:H	12	16.76
(4,234)	1:A:86:CYS:CB	1:A:68:VAL:H	17	16.76
(4,161)	1:A:56:PHE:CB	1:A:106:GLN:H	6	16.76
(4,193)	1:A:75:SER:CB	1:A:102:ARG:H	6	16.75
(1,324)	1:A:75:SER:CB	1:A:23:TYR:H	15	16.75
(4,234)	1:A:86:CYS:CB	1:A:68:VAL:H	5	16.74
(4,234)	1:A:86:CYS:CB	1:A:68:VAL:H	7	16.74
(4,139)	1:A:56:PHE:CB	1:A:77:GLY:H	2	16.74
(4,234)	1:A:86:CYS:CB	1:A:68:VAL:H	10	16.73
(4,139)	1:A:56:PHE:CB	1:A:77:GLY:H	5	16.73
(4,51)	1:A:49:GLN:CB	1:A:21:GLY:H	1	16.72
(4,51)	1:A:49:GLN:CB	1:A:21:GLY:H	14	16.72
(4,234)	1:A:86:CYS:CB	1:A:68:VAL:H	2	16.72
(4,234)	1:A:86:CYS:CB	1:A:68:VAL:H	9	16.72
(4,214)	1:A:86:CYS:CB	1:A:42:THR:H	11	16.72
(4,139)	1:A:56:PHE:CB	1:A:77:GLY:H	1	16.72
(4,139)	1:A:56:PHE:CB	1:A:77:GLY:H	18	16.72
(4,94)	1:A:49:GLN:CB	1:A:107:ARG:H	17	16.71
(4,27)	1:A:26:CYS:CB	1:A:71:GLY:H	11	16.71
(4,234)	1:A:86:CYS:CB	1:A:68:VAL:H	3	16.71

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,146)	1:A:56:PHE:CB	1:A:88:ASN:H	5	16.71
(4,234)	1:A:86:CYS:CB	1:A:68:VAL:H	18	16.7
(4,139)	1:A:56:PHE:CB	1:A:77:GLY:H	16	16.7
(4,139)	1:A:56:PHE:CB	1:A:77:GLY:H	19	16.7
(4,235)	1:A:86:CYS:CB	1:A:69:VAL:H	17	16.67
(4,234)	1:A:86:CYS:CB	1:A:68:VAL:H	13	16.67
(4,17)	1:A:26:CYS:CB	1:A:56:PHE:H	12	16.67
(4,158)	1:A:56:PHE:CB	1:A:103:SER:H	7	16.67
(4,93)	1:A:49:GLN:CB	1:A:106:GLN:H	1	16.66
(4,235)	1:A:86:CYS:CB	1:A:69:VAL:H	19	16.66
(4,146)	1:A:56:PHE:CB	1:A:88:ASN:H	14	16.66
(4,188)	1:A:75:SER:CB	1:A:55:LYS:H	17	16.65
(4,235)	1:A:86:CYS:CB	1:A:69:VAL:H	11	16.64
(4,235)	1:A:86:CYS:CB	1:A:69:VAL:H	12	16.64
(4,235)	1:A:86:CYS:CB	1:A:69:VAL:H	14	16.64
(4,235)	1:A:86:CYS:CB	1:A:69:VAL:H	15	16.63
(4,235)	1:A:86:CYS:CB	1:A:69:VAL:H	16	16.63
(4,235)	1:A:86:CYS:CB	1:A:69:VAL:H	20	16.63
(4,235)	1:A:86:CYS:CB	1:A:69:VAL:H	1	16.62
(4,17)	1:A:26:CYS:CB	1:A:56:PHE:H	18	16.62
(4,139)	1:A:56:PHE:CB	1:A:77:GLY:H	14	16.62
(4,76)	1:A:49:GLN:CB	1:A:82:GLU:H	13	16.61
(4,235)	1:A:86:CYS:CB	1:A:69:VAL:H	4	16.61
(4,235)	1:A:86:CYS:CB	1:A:69:VAL:H	8	16.61
(4,235)	1:A:86:CYS:CB	1:A:69:VAL:H	9	16.61
(4,235)	1:A:86:CYS:CB	1:A:69:VAL:H	18	16.61
(4,215)	1:A:86:CYS:CB	1:A:43:GLY:H	20	16.61
(4,139)	1:A:56:PHE:CB	1:A:77:GLY:H	4	16.61
(4,235)	1:A:86:CYS:CB	1:A:69:VAL:H	5	16.6
(4,234)	1:A:86:CYS:CB	1:A:68:VAL:H	6	16.6
(4,235)	1:A:86:CYS:CB	1:A:69:VAL:H	7	16.59
(4,156)	1:A:56:PHE:CB	1:A:101:ASP:H	13	16.58
(4,76)	1:A:49:GLN:CB	1:A:82:GLU:H	7	16.57
(4,235)	1:A:86:CYS:CB	1:A:69:VAL:H	2	16.56
(4,215)	1:A:86:CYS:CB	1:A:43:GLY:H	10	16.56
(4,157)	1:A:56:PHE:CB	1:A:102:ARG:H	12	16.56
(4,24)	1:A:26:CYS:CB	1:A:67:ALA:H	20	16.55
(4,235)	1:A:86:CYS:CB	1:A:69:VAL:H	10	16.55
(1,318)	1:A:75:SER:CB	1:A:16:LYS:H	15	16.55
(4,191)	1:A:75:SER:CB	1:A:100:LYS:H	2	16.54
(4,51)	1:A:49:GLN:CB	1:A:21:GLY:H	3	16.53
(4,28)	1:A:26:CYS:CB	1:A:72:SER:H	8	16.53

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,235)	1:A:86:CYS:CB	1:A:69:VAL:H	3	16.53
(4,194)	1:A:75:SER:CB	1:A:103:SER:H	20	16.53
(4,189)	1:A:75:SER:CB	1:A:56:PHE:H	8	16.53
(4,139)	1:A:56:PHE:CB	1:A:77:GLY:H	10	16.51
(4,29)	1:A:26:CYS:CB	1:A:73:VAL:H	14	16.5
(4,235)	1:A:86:CYS:CB	1:A:69:VAL:H	13	16.5
(1,325)	1:A:75:SER:CB	1:A:24:ALA:H	16	16.5
(1,325)	1:A:75:SER:CB	1:A:24:ALA:H	19	16.5
(4,156)	1:A:56:PHE:CB	1:A:101:ASP:H	16	16.49
(1,325)	1:A:75:SER:CB	1:A:24:ALA:H	18	16.49
(4,157)	1:A:56:PHE:CB	1:A:102:ARG:H	18	16.48
(4,75)	1:A:49:GLN:CB	1:A:81:VAL:H	10	16.47
(4,31)	1:A:26:CYS:CB	1:A:75:SER:H	4	16.45
(4,188)	1:A:75:SER:CB	1:A:55:LYS:H	13	16.45
(4,16)	1:A:26:CYS:CB	1:A:55:LYS:H	10	16.44
(4,118)	1:A:56:PHE:CB	1:A:28:SER:H	20	16.44
(4,75)	1:A:49:GLN:CB	1:A:81:VAL:H	2	16.43
(4,51)	1:A:49:GLN:CB	1:A:21:GLY:H	8	16.43
(4,215)	1:A:86:CYS:CB	1:A:43:GLY:H	7	16.43
(4,162)	1:A:56:PHE:CB	1:A:107:ARG:H	16	16.43
(4,92)	1:A:49:GLN:CB	1:A:105:ASP:H	8	16.4
(4,47)	1:A:49:GLN:CB	1:A:16:LYS:H	16	16.4
(4,45)	1:A:26:CYS:CB	1:A:108:SER:H	8	16.4
(4,215)	1:A:86:CYS:CB	1:A:43:GLY:H	9	16.4
(4,188)	1:A:75:SER:CB	1:A:55:LYS:H	9	16.4
(4,162)	1:A:56:PHE:CB	1:A:107:ARG:H	2	16.4
(4,146)	1:A:56:PHE:CB	1:A:88:ASN:H	19	16.4
(4,117)	1:A:56:PHE:CB	1:A:26:CYS:H	15	16.4
(4,74)	1:A:49:GLN:CB	1:A:80:ARG:H	8	16.39
(4,116)	1:A:56:PHE:CB	1:A:25:ALA:H	6	16.39
(4,74)	1:A:49:GLN:CB	1:A:80:ARG:H	3	16.38
(4,17)	1:A:26:CYS:CB	1:A:56:PHE:H	1	16.38
(4,115)	1:A:56:PHE:CB	1:A:24:ALA:H	6	16.37
(1,336)	1:A:86:CYS:CB	1:A:71:GLY:H	17	16.36
(1,336)	1:A:86:CYS:CB	1:A:71:GLY:H	9	16.35
(4,76)	1:A:49:GLN:CB	1:A:82:GLU:H	20	16.34
(4,235)	1:A:86:CYS:CB	1:A:69:VAL:H	6	16.34
(4,188)	1:A:75:SER:CB	1:A:55:LYS:H	7	16.34
(1,336)	1:A:86:CYS:CB	1:A:71:GLY:H	8	16.33
(1,336)	1:A:86:CYS:CB	1:A:71:GLY:H	12	16.33
(4,118)	1:A:56:PHE:CB	1:A:28:SER:H	15	16.32
(1,336)	1:A:86:CYS:CB	1:A:71:GLY:H	14	16.32

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,336)	1:A:86:CYS:CB	1:A:71:GLY:H	18	16.32
(4,95)	1:A:49:GLN:CB	1:A:108:SER:H	1	16.3
(1,336)	1:A:86:CYS:CB	1:A:71:GLY:H	1	16.3
(1,336)	1:A:86:CYS:CB	1:A:71:GLY:H	7	16.3
(1,336)	1:A:86:CYS:CB	1:A:71:GLY:H	15	16.3
(1,336)	1:A:86:CYS:CB	1:A:71:GLY:H	20	16.3
(4,77)	1:A:49:GLN:CB	1:A:83:SER:H	4	16.29
(4,16)	1:A:26:CYS:CB	1:A:55:LYS:H	12	16.29
(4,157)	1:A:56:PHE:CB	1:A:102:ARG:H	5	16.29
(4,116)	1:A:56:PHE:CB	1:A:25:ALA:H	5	16.29
(1,336)	1:A:86:CYS:CB	1:A:71:GLY:H	19	16.29
(4,47)	1:A:49:GLN:CB	1:A:16:LYS:H	11	16.28
(1,336)	1:A:86:CYS:CB	1:A:71:GLY:H	3	16.28
(1,336)	1:A:86:CYS:CB	1:A:71:GLY:H	11	16.28
(4,51)	1:A:49:GLN:CB	1:A:21:GLY:H	6	16.27
(4,146)	1:A:56:PHE:CB	1:A:88:ASN:H	4	16.27
(1,336)	1:A:86:CYS:CB	1:A:71:GLY:H	5	16.27
(4,216)	1:A:86:CYS:CB	1:A:44:MET:H	14	16.26
(1,336)	1:A:86:CYS:CB	1:A:71:GLY:H	4	16.25
(4,74)	1:A:49:GLN:CB	1:A:80:ARG:H	18	16.23
(4,188)	1:A:75:SER:CB	1:A:55:LYS:H	2	16.23
(4,17)	1:A:26:CYS:CB	1:A:56:PHE:H	14	16.23
(4,117)	1:A:56:PHE:CB	1:A:26:CYS:H	6	16.23
(4,52)	1:A:49:GLN:CB	1:A:22:GLU:H	14	16.22
(1,336)	1:A:86:CYS:CB	1:A:71:GLY:H	2	16.22
(4,74)	1:A:49:GLN:CB	1:A:80:ARG:H	1	16.21
(4,146)	1:A:56:PHE:CB	1:A:88:ASN:H	16	16.21
(4,76)	1:A:49:GLN:CB	1:A:82:GLU:H	2	16.2
(4,25)	1:A:26:CYS:CB	1:A:69:VAL:H	15	16.2
(1,336)	1:A:86:CYS:CB	1:A:71:GLY:H	16	16.2
(4,215)	1:A:86:CYS:CB	1:A:43:GLY:H	13	16.19
(1,336)	1:A:86:CYS:CB	1:A:71:GLY:H	13	16.19
(4,51)	1:A:49:GLN:CB	1:A:21:GLY:H	13	16.18
(4,49)	1:A:49:GLN:CB	1:A:19:GLY:H	7	16.18
(4,33)	1:A:26:CYS:CB	1:A:77:GLY:H	17	16.18
(4,27)	1:A:26:CYS:CB	1:A:71:GLY:H	6	16.18
(4,192)	1:A:75:SER:CB	1:A:101:ASP:H	9	16.18
(4,139)	1:A:56:PHE:CB	1:A:77:GLY:H	11	16.18
(4,43)	1:A:26:CYS:CB	1:A:106:GLN:H	13	16.17
(4,28)	1:A:26:CYS:CB	1:A:72:SER:H	5	16.17
(4,28)	1:A:26:CYS:CB	1:A:72:SER:H	14	16.17
(4,215)	1:A:86:CYS:CB	1:A:43:GLY:H	15	16.16

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,116)	1:A:56:PHE:CB	1:A:25:ALA:H	19	16.16
(1,336)	1:A:86:CYS:CB	1:A:71:GLY:H	10	16.16
(4,188)	1:A:75:SER:CB	1:A:55:LYS:H	5	16.15
(4,162)	1:A:56:PHE:CB	1:A:107:ARG:H	15	16.15
(4,15)	1:A:26:CYS:CB	1:A:54:ARG:H	8	16.15
(4,51)	1:A:49:GLN:CB	1:A:21:GLY:H	18	16.12
(4,28)	1:A:26:CYS:CB	1:A:72:SER:H	11	16.12
(4,159)	1:A:56:PHE:CB	1:A:104:THR:H	15	16.12
(1,336)	1:A:86:CYS:CB	1:A:71:GLY:H	6	16.12
(4,194)	1:A:75:SER:CB	1:A:103:SER:H	18	16.11
(4,192)	1:A:75:SER:CB	1:A:101:ASP:H	2	16.1
(4,193)	1:A:75:SER:CB	1:A:102:ARG:H	20	16.09
(4,95)	1:A:49:GLN:CB	1:A:108:SER:H	4	16.08
(4,43)	1:A:26:CYS:CB	1:A:106:GLN:H	11	16.08
(4,51)	1:A:49:GLN:CB	1:A:21:GLY:H	11	16.06
(4,194)	1:A:75:SER:CB	1:A:103:SER:H	14	16.05
(4,94)	1:A:49:GLN:CB	1:A:107:ARG:H	12	16.04
(4,42)	1:A:26:CYS:CB	1:A:105:ASP:H	13	16.03
(4,30)	1:A:26:CYS:CB	1:A:74:VAL:H	8	16.03
(4,43)	1:A:26:CYS:CB	1:A:106:GLN:H	12	16.02
(4,188)	1:A:75:SER:CB	1:A:55:LYS:H	12	16.02
(4,51)	1:A:49:GLN:CB	1:A:21:GLY:H	5	16.01
(4,215)	1:A:86:CYS:CB	1:A:43:GLY:H	5	16.0
(4,189)	1:A:75:SER:CB	1:A:56:PHE:H	17	15.99
(4,189)	1:A:75:SER:CB	1:A:56:PHE:H	13	15.98
(4,118)	1:A:56:PHE:CB	1:A:28:SER:H	11	15.98
(4,74)	1:A:49:GLN:CB	1:A:80:ARG:H	13	15.97
(4,117)	1:A:56:PHE:CB	1:A:26:CYS:H	19	15.96
(4,116)	1:A:56:PHE:CB	1:A:25:ALA:H	16	15.96
(4,189)	1:A:75:SER:CB	1:A:56:PHE:H	2	15.95
(4,48)	1:A:49:GLN:CB	1:A:17:HIS:H	15	15.94
(4,18)	1:A:26:CYS:CB	1:A:58:TYR:H	5	15.94
(4,16)	1:A:26:CYS:CB	1:A:55:LYS:H	18	15.94
(4,76)	1:A:49:GLN:CB	1:A:82:GLU:H	15	15.92
(4,189)	1:A:75:SER:CB	1:A:56:PHE:H	9	15.92
(4,161)	1:A:56:PHE:CB	1:A:106:GLN:H	19	15.92
(4,189)	1:A:75:SER:CB	1:A:56:PHE:H	7	15.91
(4,16)	1:A:26:CYS:CB	1:A:55:LYS:H	1	15.91
(4,51)	1:A:49:GLN:CB	1:A:21:GLY:H	2	15.9
(4,215)	1:A:86:CYS:CB	1:A:43:GLY:H	17	15.9
(4,160)	1:A:56:PHE:CB	1:A:105:ASP:H	18	15.9
(4,31)	1:A:26:CYS:CB	1:A:75:SER:H	17	15.89

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,194)	1:A:75:SER:CB	1:A:103:SER:H	6	15.89
(4,188)	1:A:75:SER:CB	1:A:55:LYS:H	1	15.89
(4,188)	1:A:75:SER:CB	1:A:55:LYS:H	3	15.89
(4,52)	1:A:49:GLN:CB	1:A:22:GLU:H	3	15.88
(4,51)	1:A:49:GLN:CB	1:A:21:GLY:H	7	15.88
(4,44)	1:A:26:CYS:CB	1:A:107:ARG:H	8	15.86
(4,33)	1:A:26:CYS:CB	1:A:77:GLY:H	4	15.86
(4,214)	1:A:86:CYS:CB	1:A:42:THR:H	10	15.86
(4,117)	1:A:56:PHE:CB	1:A:26:CYS:H	16	15.84
(4,48)	1:A:49:GLN:CB	1:A:17:HIS:H	16	15.83
(4,17)	1:A:26:CYS:CB	1:A:56:PHE:H	19	15.82
(4,75)	1:A:49:GLN:CB	1:A:81:VAL:H	11	15.81
(4,139)	1:A:56:PHE:CB	1:A:77:GLY:H	15	15.81
(4,52)	1:A:49:GLN:CB	1:A:22:GLU:H	6	15.8
(4,51)	1:A:49:GLN:CB	1:A:21:GLY:H	4	15.8
(4,188)	1:A:75:SER:CB	1:A:55:LYS:H	6	15.8
(4,188)	1:A:75:SER:CB	1:A:55:LYS:H	18	15.8
(4,33)	1:A:26:CYS:CB	1:A:77:GLY:H	3	15.79
(4,32)	1:A:26:CYS:CB	1:A:76:TYR:H	17	15.79
(4,49)	1:A:49:GLN:CB	1:A:19:GLY:H	15	15.78
(4,215)	1:A:86:CYS:CB	1:A:43:GLY:H	3	15.78
(4,17)	1:A:26:CYS:CB	1:A:56:PHE:H	16	15.78
(4,188)	1:A:75:SER:CB	1:A:55:LYS:H	20	15.77
(4,74)	1:A:49:GLN:CB	1:A:80:ARG:H	7	15.76
(4,16)	1:A:26:CYS:CB	1:A:55:LYS:H	14	15.76
(4,29)	1:A:26:CYS:CB	1:A:73:VAL:H	6	15.75
(4,191)	1:A:75:SER:CB	1:A:100:LYS:H	1	15.75
(4,17)	1:A:26:CYS:CB	1:A:56:PHE:H	6	15.75
(4,215)	1:A:86:CYS:CB	1:A:43:GLY:H	12	15.74
(4,193)	1:A:75:SER:CB	1:A:102:ARG:H	19	15.74
(4,187)	1:A:75:SER:CB	1:A:54:ARG:H	8	15.73
(4,189)	1:A:75:SER:CB	1:A:56:PHE:H	5	15.71
(4,118)	1:A:56:PHE:CB	1:A:28:SER:H	8	15.71
(4,189)	1:A:75:SER:CB	1:A:56:PHE:H	1	15.69
(4,157)	1:A:56:PHE:CB	1:A:102:ARG:H	10	15.69
(4,51)	1:A:49:GLN:CB	1:A:21:GLY:H	19	15.68
(4,189)	1:A:75:SER:CB	1:A:56:PHE:H	12	15.68
(4,24)	1:A:26:CYS:CB	1:A:67:ALA:H	15	15.67
(4,192)	1:A:75:SER:CB	1:A:101:ASP:H	20	15.64
(4,215)	1:A:86:CYS:CB	1:A:43:GLY:H	18	15.61
(4,15)	1:A:26:CYS:CB	1:A:54:ARG:H	2	15.61
(4,189)	1:A:75:SER:CB	1:A:56:PHE:H	3	15.6

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,33)	1:A:26:CYS:CB	1:A:77:GLY:H	18	15.58
(4,53)	1:A:49:GLN:CB	1:A:23:TYR:H	17	15.57
(4,159)	1:A:56:PHE:CB	1:A:104:THR:H	9	15.57
(4,118)	1:A:56:PHE:CB	1:A:28:SER:H	13	15.57
(4,189)	1:A:75:SER:CB	1:A:56:PHE:H	18	15.56
(4,188)	1:A:75:SER:CB	1:A:55:LYS:H	19	15.56
(4,15)	1:A:26:CYS:CB	1:A:54:ARG:H	13	15.56
(4,190)	1:A:75:SER:CB	1:A:58:TYR:H	5	15.55
(4,189)	1:A:75:SER:CB	1:A:56:PHE:H	20	15.55
(4,190)	1:A:75:SER:CB	1:A:58:TYR:H	3	15.54
(4,33)	1:A:26:CYS:CB	1:A:77:GLY:H	2	15.53
(4,31)	1:A:26:CYS:CB	1:A:75:SER:H	3	15.53
(4,194)	1:A:75:SER:CB	1:A:103:SER:H	15	15.53
(4,190)	1:A:75:SER:CB	1:A:58:TYR:H	6	15.53
(4,33)	1:A:26:CYS:CB	1:A:77:GLY:H	16	15.52
(4,191)	1:A:75:SER:CB	1:A:100:LYS:H	6	15.51
(4,161)	1:A:56:PHE:CB	1:A:106:GLN:H	16	15.51
(1,326)	1:A:75:SER:CB	1:A:60:LEU:H	14	15.51
(1,309)	1:A:49:GLN:CB	1:A:39:VAL:H	15	15.51
(1,326)	1:A:75:SER:CB	1:A:60:LEU:H	3	15.5
(1,326)	1:A:75:SER:CB	1:A:60:LEU:H	5	15.5
(1,326)	1:A:75:SER:CB	1:A:60:LEU:H	8	15.5
(1,326)	1:A:75:SER:CB	1:A:60:LEU:H	10	15.5
(1,326)	1:A:75:SER:CB	1:A:60:LEU:H	15	15.5
(1,326)	1:A:75:SER:CB	1:A:60:LEU:H	17	15.5
(1,326)	1:A:75:SER:CB	1:A:60:LEU:H	20	15.5
(4,32)	1:A:26:CYS:CB	1:A:76:TYR:H	3	15.49
(4,157)	1:A:56:PHE:CB	1:A:102:ARG:H	7	15.49
(4,52)	1:A:49:GLN:CB	1:A:22:GLU:H	4	15.48
(4,188)	1:A:75:SER:CB	1:A:55:LYS:H	15	15.48
(4,139)	1:A:56:PHE:CB	1:A:77:GLY:H	20	15.48
(4,26)	1:A:26:CYS:CB	1:A:70:ALA:H	20	15.47
(4,118)	1:A:56:PHE:CB	1:A:28:SER:H	7	15.47
(4,53)	1:A:49:GLN:CB	1:A:23:TYR:H	9	15.46
(4,189)	1:A:75:SER:CB	1:A:56:PHE:H	6	15.46
(4,188)	1:A:75:SER:CB	1:A:55:LYS:H	16	15.46
(1,326)	1:A:75:SER:CB	1:A:60:LEU:H	6	15.46
(4,16)	1:A:26:CYS:CB	1:A:55:LYS:H	6	15.45
(4,15)	1:A:26:CYS:CB	1:A:54:ARG:H	4	15.45
(1,326)	1:A:75:SER:CB	1:A:60:LEU:H	1	15.45
(4,31)	1:A:26:CYS:CB	1:A:75:SER:H	2	15.44
(4,190)	1:A:75:SER:CB	1:A:58:TYR:H	17	15.44

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,118)	1:A:56:PHE:CB	1:A:28:SER:H	12	15.44
(4,47)	1:A:49:GLN:CB	1:A:16:LYS:H	15	15.43
(4,46)	1:A:49:GLN:CB	1:A:15:ALA:H	7	15.43
(4,33)	1:A:26:CYS:CB	1:A:77:GLY:H	19	15.43
(4,215)	1:A:86:CYS:CB	1:A:43:GLY:H	1	15.43
(1,326)	1:A:75:SER:CB	1:A:60:LEU:H	2	15.43
(1,326)	1:A:75:SER:CB	1:A:60:LEU:H	16	15.43
(4,190)	1:A:75:SER:CB	1:A:58:TYR:H	1	15.42
(1,326)	1:A:75:SER:CB	1:A:60:LEU:H	9	15.42
(1,326)	1:A:75:SER:CB	1:A:60:LEU:H	19	15.42
(4,93)	1:A:49:GLN:CB	1:A:106:GLN:H	17	15.41
(4,52)	1:A:49:GLN:CB	1:A:22:GLU:H	12	15.41
(4,75)	1:A:49:GLN:CB	1:A:81:VAL:H	4	15.4
(4,41)	1:A:26:CYS:CB	1:A:104:THR:H	13	15.4
(4,190)	1:A:75:SER:CB	1:A:58:TYR:H	14	15.4
(4,190)	1:A:75:SER:CB	1:A:58:TYR:H	9	15.39
(1,326)	1:A:75:SER:CB	1:A:60:LEU:H	4	15.39
(4,190)	1:A:75:SER:CB	1:A:58:TYR:H	8	15.38
(1,325)	1:A:75:SER:CB	1:A:24:ALA:H	6	15.38
(4,73)	1:A:49:GLN:CB	1:A:79:THR:H	17	15.37
(4,32)	1:A:26:CYS:CB	1:A:76:TYR:H	18	15.37
(4,158)	1:A:56:PHE:CB	1:A:103:SER:H	1	15.37
(4,157)	1:A:56:PHE:CB	1:A:102:ARG:H	19	15.36
(1,326)	1:A:75:SER:CB	1:A:60:LEU:H	12	15.36
(4,73)	1:A:49:GLN:CB	1:A:79:THR:H	5	15.35
(4,31)	1:A:26:CYS:CB	1:A:75:SER:H	16	15.35
(4,15)	1:A:26:CYS:CB	1:A:54:ARG:H	17	15.35
(4,51)	1:A:49:GLN:CB	1:A:21:GLY:H	16	15.34
(4,30)	1:A:26:CYS:CB	1:A:74:VAL:H	5	15.34
(4,28)	1:A:26:CYS:CB	1:A:72:SER:H	6	15.34
(4,16)	1:A:26:CYS:CB	1:A:55:LYS:H	19	15.34
(4,30)	1:A:26:CYS:CB	1:A:74:VAL:H	14	15.33
(4,193)	1:A:75:SER:CB	1:A:102:ARG:H	17	15.33
(4,136)	1:A:56:PHE:CB	1:A:74:VAL:H	10	15.32
(4,93)	1:A:49:GLN:CB	1:A:106:GLN:H	10	15.31
(4,32)	1:A:26:CYS:CB	1:A:76:TYR:H	4	15.31
(4,189)	1:A:75:SER:CB	1:A:56:PHE:H	15	15.31
(4,118)	1:A:56:PHE:CB	1:A:28:SER:H	2	15.31
(4,74)	1:A:49:GLN:CB	1:A:80:ARG:H	2	15.3
(4,33)	1:A:26:CYS:CB	1:A:77:GLY:H	9	15.3
(4,190)	1:A:75:SER:CB	1:A:58:TYR:H	12	15.3
(4,117)	1:A:56:PHE:CB	1:A:26:CYS:H	5	15.3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,325)	1:A:75:SER:CB	1:A:24:ALA:H	14	15.3
(1,326)	1:A:75:SER:CB	1:A:60:LEU:H	18	15.29
(4,188)	1:A:75:SER:CB	1:A:55:LYS:H	14	15.28
(4,185)	1:A:75:SER:CB	1:A:52:ILE:H	17	15.28
(1,326)	1:A:75:SER:CB	1:A:60:LEU:H	7	15.28
(4,33)	1:A:26:CYS:CB	1:A:77:GLY:H	13	15.26
(4,31)	1:A:26:CYS:CB	1:A:75:SER:H	13	15.26
(4,190)	1:A:75:SER:CB	1:A:58:TYR:H	2	15.26
(1,337)	1:A:86:CYS:CB	1:A:72:SER:H	12	15.26
(4,215)	1:A:86:CYS:CB	1:A:43:GLY:H	2	15.25
(4,190)	1:A:75:SER:CB	1:A:58:TYR:H	16	15.25
(4,185)	1:A:75:SER:CB	1:A:52:ILE:H	5	15.25
(1,337)	1:A:86:CYS:CB	1:A:72:SER:H	19	15.24
(4,31)	1:A:26:CYS:CB	1:A:75:SER:H	19	15.23
(1,337)	1:A:86:CYS:CB	1:A:72:SER:H	17	15.23
(4,41)	1:A:26:CYS:CB	1:A:104:THR:H	11	15.22
(1,326)	1:A:75:SER:CB	1:A:60:LEU:H	13	15.22
(4,73)	1:A:49:GLN:CB	1:A:79:THR:H	16	15.21
(4,15)	1:A:26:CYS:CB	1:A:54:ARG:H	9	15.21
(1,337)	1:A:86:CYS:CB	1:A:72:SER:H	4	15.2
(1,337)	1:A:86:CYS:CB	1:A:72:SER:H	5	15.2
(4,156)	1:A:56:PHE:CB	1:A:101:ASP:H	19	15.19
(4,136)	1:A:56:PHE:CB	1:A:74:VAL:H	13	15.19
(1,337)	1:A:86:CYS:CB	1:A:72:SER:H	11	15.19
(4,189)	1:A:75:SER:CB	1:A:56:PHE:H	11	15.18
(4,188)	1:A:75:SER:CB	1:A:55:LYS:H	11	15.18
(1,337)	1:A:86:CYS:CB	1:A:72:SER:H	1	15.18
(4,52)	1:A:49:GLN:CB	1:A:22:GLU:H	11	15.17
(4,191)	1:A:75:SER:CB	1:A:100:LYS:H	19	15.17
(4,185)	1:A:75:SER:CB	1:A:52:ILE:H	9	15.17
(1,326)	1:A:75:SER:CB	1:A:60:LEU:H	11	15.17
(4,190)	1:A:75:SER:CB	1:A:58:TYR:H	19	15.16
(4,138)	1:A:56:PHE:CB	1:A:76:TYR:H	5	15.16
(4,138)	1:A:56:PHE:CB	1:A:76:TYR:H	8	15.16
(4,136)	1:A:56:PHE:CB	1:A:74:VAL:H	7	15.16
(4,52)	1:A:49:GLN:CB	1:A:22:GLU:H	18	15.15
(4,214)	1:A:86:CYS:CB	1:A:42:THR:H	9	15.15
(4,138)	1:A:56:PHE:CB	1:A:76:TYR:H	18	15.15
(1,337)	1:A:86:CYS:CB	1:A:72:SER:H	18	15.15
(4,33)	1:A:26:CYS:CB	1:A:77:GLY:H	7	15.14
(4,215)	1:A:86:CYS:CB	1:A:43:GLY:H	6	15.14
(4,157)	1:A:56:PHE:CB	1:A:102:ARG:H	16	15.14

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,138)	1:A:56:PHE:CB	1:A:76:TYR:H	9	15.14
(1,337)	1:A:86:CYS:CB	1:A:72:SER:H	7	15.14
(1,337)	1:A:86:CYS:CB	1:A:72:SER:H	15	15.14
(4,16)	1:A:26:CYS:CB	1:A:55:LYS:H	16	15.13
(4,138)	1:A:56:PHE:CB	1:A:76:TYR:H	17	15.13
(4,136)	1:A:56:PHE:CB	1:A:74:VAL:H	6	15.13
(1,337)	1:A:86:CYS:CB	1:A:72:SER:H	2	15.13
(1,337)	1:A:86:CYS:CB	1:A:72:SER:H	9	15.13
(1,337)	1:A:86:CYS:CB	1:A:72:SER:H	16	15.13
(4,193)	1:A:75:SER:CB	1:A:102:ARG:H	1	15.12
(4,193)	1:A:75:SER:CB	1:A:102:ARG:H	2	15.12
(4,28)	1:A:26:CYS:CB	1:A:72:SER:H	10	15.11
(4,138)	1:A:56:PHE:CB	1:A:76:TYR:H	1	15.11
(4,138)	1:A:56:PHE:CB	1:A:76:TYR:H	12	15.11
(4,138)	1:A:56:PHE:CB	1:A:76:TYR:H	13	15.11
(1,337)	1:A:86:CYS:CB	1:A:72:SER:H	10	15.11
(1,337)	1:A:86:CYS:CB	1:A:72:SER:H	20	15.11
(4,95)	1:A:49:GLN:CB	1:A:108:SER:H	5	15.1
(4,213)	1:A:86:CYS:CB	1:A:41:GLY:H	11	15.1
(1,337)	1:A:86:CYS:CB	1:A:72:SER:H	3	15.1
(1,337)	1:A:86:CYS:CB	1:A:72:SER:H	14	15.1
(4,138)	1:A:56:PHE:CB	1:A:76:TYR:H	2	15.09
(4,138)	1:A:56:PHE:CB	1:A:76:TYR:H	3	15.09
(4,136)	1:A:56:PHE:CB	1:A:74:VAL:H	9	15.09
(4,136)	1:A:56:PHE:CB	1:A:74:VAL:H	12	15.09
(4,192)	1:A:75:SER:CB	1:A:101:ASP:H	18	15.08
(4,190)	1:A:75:SER:CB	1:A:58:TYR:H	13	15.08
(4,138)	1:A:56:PHE:CB	1:A:76:TYR:H	7	15.08
(4,136)	1:A:56:PHE:CB	1:A:74:VAL:H	17	15.08
(4,52)	1:A:49:GLN:CB	1:A:22:GLU:H	20	15.07
(4,32)	1:A:26:CYS:CB	1:A:76:TYR:H	16	15.07
(4,31)	1:A:26:CYS:CB	1:A:75:SER:H	9	15.06
(4,189)	1:A:75:SER:CB	1:A:56:PHE:H	16	15.06
(4,118)	1:A:56:PHE:CB	1:A:28:SER:H	4	15.06
(4,73)	1:A:49:GLN:CB	1:A:79:THR:H	6	15.05
(4,31)	1:A:26:CYS:CB	1:A:75:SER:H	7	15.05
(4,189)	1:A:75:SER:CB	1:A:56:PHE:H	14	15.04
(4,189)	1:A:75:SER:CB	1:A:56:PHE:H	19	15.04
(4,138)	1:A:56:PHE:CB	1:A:76:TYR:H	6	15.04
(4,118)	1:A:56:PHE:CB	1:A:28:SER:H	1	15.04
(4,52)	1:A:49:GLN:CB	1:A:22:GLU:H	19	15.03
(4,190)	1:A:75:SER:CB	1:A:58:TYR:H	4	15.03

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,136)	1:A:56:PHE:CB	1:A:74:VAL:H	4	15.03
(4,32)	1:A:26:CYS:CB	1:A:76:TYR:H	9	15.02
(4,190)	1:A:75:SER:CB	1:A:58:TYR:H	7	15.02
(4,136)	1:A:56:PHE:CB	1:A:74:VAL:H	2	15.02
(1,337)	1:A:86:CYS:CB	1:A:72:SER:H	8	15.02
(1,337)	1:A:86:CYS:CB	1:A:72:SER:H	13	15.02
(4,52)	1:A:49:GLN:CB	1:A:22:GLU:H	1	15.01
(4,31)	1:A:26:CYS:CB	1:A:75:SER:H	18	15.01
(4,159)	1:A:56:PHE:CB	1:A:104:THR:H	17	15.0
(4,136)	1:A:56:PHE:CB	1:A:74:VAL:H	3	15.0
(4,136)	1:A:56:PHE:CB	1:A:74:VAL:H	18	15.0
(4,75)	1:A:49:GLN:CB	1:A:81:VAL:H	20	14.99
(4,73)	1:A:49:GLN:CB	1:A:79:THR:H	9	14.99
(4,138)	1:A:56:PHE:CB	1:A:76:TYR:H	14	14.99
(4,136)	1:A:56:PHE:CB	1:A:74:VAL:H	8	14.99
(4,136)	1:A:56:PHE:CB	1:A:74:VAL:H	16	14.99
(4,51)	1:A:49:GLN:CB	1:A:21:GLY:H	10	14.98
(4,233)	1:A:86:CYS:CB	1:A:67:ALA:H	8	14.98
(4,233)	1:A:86:CYS:CB	1:A:67:ALA:H	6	14.97
(4,136)	1:A:56:PHE:CB	1:A:74:VAL:H	5	14.97
(4,136)	1:A:56:PHE:CB	1:A:74:VAL:H	19	14.97
(4,233)	1:A:86:CYS:CB	1:A:67:ALA:H	16	14.96
(4,233)	1:A:86:CYS:CB	1:A:67:ALA:H	14	14.95
(4,233)	1:A:86:CYS:CB	1:A:67:ALA:H	20	14.95
(4,138)	1:A:56:PHE:CB	1:A:76:TYR:H	19	14.95
(4,190)	1:A:75:SER:CB	1:A:58:TYR:H	18	14.94
(4,188)	1:A:75:SER:CB	1:A:55:LYS:H	4	14.93
(4,187)	1:A:75:SER:CB	1:A:54:ARG:H	13	14.92
(4,187)	1:A:75:SER:CB	1:A:54:ARG:H	17	14.92
(4,138)	1:A:56:PHE:CB	1:A:76:TYR:H	16	14.92
(4,136)	1:A:56:PHE:CB	1:A:74:VAL:H	14	14.92
(4,193)	1:A:75:SER:CB	1:A:102:ARG:H	9	14.91
(4,17)	1:A:26:CYS:CB	1:A:56:PHE:H	20	14.91
(4,136)	1:A:56:PHE:CB	1:A:74:VAL:H	1	14.91
(4,233)	1:A:86:CYS:CB	1:A:67:ALA:H	3	14.9
(4,233)	1:A:86:CYS:CB	1:A:67:ALA:H	4	14.9
(4,233)	1:A:86:CYS:CB	1:A:67:ALA:H	9	14.9
(4,233)	1:A:86:CYS:CB	1:A:67:ALA:H	13	14.9
(4,233)	1:A:86:CYS:CB	1:A:67:ALA:H	15	14.9
(4,194)	1:A:75:SER:CB	1:A:103:SER:H	7	14.9
(4,32)	1:A:26:CYS:CB	1:A:76:TYR:H	19	14.89
(4,233)	1:A:86:CYS:CB	1:A:67:ALA:H	7	14.89

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,160)	1:A:56:PHE:CB	1:A:105:ASP:H	7	14.89
(1,338)	1:A:86:CYS:CB	1:A:73:VAL:H	17	14.89
(4,233)	1:A:86:CYS:CB	1:A:67:ALA:H	1	14.88
(4,233)	1:A:86:CYS:CB	1:A:67:ALA:H	17	14.88
(4,233)	1:A:86:CYS:CB	1:A:67:ALA:H	2	14.87
(4,233)	1:A:86:CYS:CB	1:A:67:ALA:H	12	14.87
(4,233)	1:A:86:CYS:CB	1:A:67:ALA:H	19	14.87
(4,159)	1:A:56:PHE:CB	1:A:104:THR:H	19	14.87
(4,233)	1:A:86:CYS:CB	1:A:67:ALA:H	18	14.86
(4,189)	1:A:75:SER:CB	1:A:56:PHE:H	4	14.86
(4,233)	1:A:86:CYS:CB	1:A:67:ALA:H	5	14.85
(4,233)	1:A:86:CYS:CB	1:A:67:ALA:H	11	14.85
(1,338)	1:A:86:CYS:CB	1:A:73:VAL:H	12	14.85
(4,32)	1:A:26:CYS:CB	1:A:76:TYR:H	2	14.84
(4,233)	1:A:86:CYS:CB	1:A:67:ALA:H	10	14.84
(1,338)	1:A:86:CYS:CB	1:A:73:VAL:H	9	14.84
(1,338)	1:A:86:CYS:CB	1:A:73:VAL:H	19	14.84
(4,94)	1:A:49:GLN:CB	1:A:107:ARG:H	1	14.83
(1,338)	1:A:86:CYS:CB	1:A:73:VAL:H	18	14.83
(4,138)	1:A:56:PHE:CB	1:A:76:TYR:H	4	14.82
(4,136)	1:A:56:PHE:CB	1:A:74:VAL:H	11	14.82
(1,338)	1:A:86:CYS:CB	1:A:73:VAL:H	11	14.82
(1,337)	1:A:86:CYS:CB	1:A:72:SER:H	6	14.82
(4,76)	1:A:49:GLN:CB	1:A:82:GLU:H	4	14.79
(1,338)	1:A:86:CYS:CB	1:A:73:VAL:H	5	14.79
(4,73)	1:A:49:GLN:CB	1:A:79:THR:H	19	14.78
(4,52)	1:A:49:GLN:CB	1:A:22:GLU:H	13	14.78
(1,338)	1:A:86:CYS:CB	1:A:73:VAL:H	1	14.78
(4,42)	1:A:26:CYS:CB	1:A:105:ASP:H	8	14.77
(4,214)	1:A:86:CYS:CB	1:A:42:THR:H	20	14.77
(1,338)	1:A:86:CYS:CB	1:A:73:VAL:H	4	14.77
(4,46)	1:A:49:GLN:CB	1:A:15:ALA:H	11	14.76
(1,338)	1:A:86:CYS:CB	1:A:73:VAL:H	15	14.76
(1,338)	1:A:86:CYS:CB	1:A:73:VAL:H	7	14.75
(1,338)	1:A:86:CYS:CB	1:A:73:VAL:H	16	14.75
(4,215)	1:A:86:CYS:CB	1:A:43:GLY:H	16	14.74
(4,187)	1:A:75:SER:CB	1:A:54:ARG:H	2	14.74
(4,187)	1:A:75:SER:CB	1:A:54:ARG:H	7	14.74
(4,187)	1:A:75:SER:CB	1:A:54:ARG:H	9	14.74
(4,159)	1:A:56:PHE:CB	1:A:104:THR:H	5	14.74
(1,338)	1:A:86:CYS:CB	1:A:73:VAL:H	10	14.74
(4,213)	1:A:86:CYS:CB	1:A:41:GLY:H	10	14.73

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,118)	1:A:56:PHE:CB	1:A:28:SER:H	10	14.73
(1,338)	1:A:86:CYS:CB	1:A:73:VAL:H	2	14.73
(4,15)	1:A:26:CYS:CB	1:A:54:ARG:H	7	14.72
(4,138)	1:A:56:PHE:CB	1:A:76:TYR:H	10	14.71
(1,338)	1:A:86:CYS:CB	1:A:73:VAL:H	3	14.69
(1,338)	1:A:86:CYS:CB	1:A:73:VAL:H	13	14.68
(1,338)	1:A:86:CYS:CB	1:A:73:VAL:H	14	14.68
(4,53)	1:A:49:GLN:CB	1:A:23:TYR:H	3	14.67
(4,33)	1:A:26:CYS:CB	1:A:77:GLY:H	1	14.67
(4,26)	1:A:26:CYS:CB	1:A:70:ALA:H	15	14.67
(4,53)	1:A:49:GLN:CB	1:A:23:TYR:H	12	14.66
(4,32)	1:A:26:CYS:CB	1:A:76:TYR:H	13	14.66
(4,17)	1:A:26:CYS:CB	1:A:56:PHE:H	5	14.66
(4,53)	1:A:49:GLN:CB	1:A:23:TYR:H	11	14.65
(4,52)	1:A:49:GLN:CB	1:A:22:GLU:H	8	14.65
(4,29)	1:A:26:CYS:CB	1:A:73:VAL:H	11	14.64
(4,158)	1:A:56:PHE:CB	1:A:103:SER:H	17	14.64
(4,138)	1:A:56:PHE:CB	1:A:76:TYR:H	11	14.64
(4,52)	1:A:49:GLN:CB	1:A:22:GLU:H	16	14.63
(4,73)	1:A:49:GLN:CB	1:A:79:THR:H	14	14.62
(4,52)	1:A:49:GLN:CB	1:A:22:GLU:H	2	14.62
(4,190)	1:A:75:SER:CB	1:A:58:TYR:H	20	14.62
(4,44)	1:A:26:CYS:CB	1:A:107:ARG:H	11	14.61
(4,162)	1:A:56:PHE:CB	1:A:107:ARG:H	19	14.61
(4,91)	1:A:49:GLN:CB	1:A:104:THR:H	13	14.6
(4,15)	1:A:26:CYS:CB	1:A:54:ARG:H	11	14.6
(1,338)	1:A:86:CYS:CB	1:A:73:VAL:H	20	14.6
(4,216)	1:A:86:CYS:CB	1:A:44:MET:H	4	14.59
(4,75)	1:A:49:GLN:CB	1:A:81:VAL:H	15	14.58
(4,73)	1:A:49:GLN:CB	1:A:79:THR:H	12	14.57
(4,136)	1:A:56:PHE:CB	1:A:74:VAL:H	15	14.57
(4,13)	1:A:26:CYS:CB	1:A:52:ILE:H	9	14.57
(4,160)	1:A:56:PHE:CB	1:A:105:ASP:H	12	14.56
(1,338)	1:A:86:CYS:CB	1:A:73:VAL:H	8	14.56
(4,193)	1:A:75:SER:CB	1:A:102:ARG:H	5	14.55
(4,136)	1:A:56:PHE:CB	1:A:74:VAL:H	20	14.55
(4,74)	1:A:49:GLN:CB	1:A:80:ARG:H	11	14.54
(4,217)	1:A:86:CYS:CB	1:A:46:PHE:H	4	14.54
(4,215)	1:A:86:CYS:CB	1:A:43:GLY:H	19	14.53
(4,193)	1:A:75:SER:CB	1:A:102:ARG:H	12	14.53
(4,190)	1:A:75:SER:CB	1:A:58:TYR:H	15	14.53
(4,193)	1:A:75:SER:CB	1:A:102:ARG:H	3	14.52

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,16)	1:A:26:CYS:CB	1:A:55:LYS:H	20	14.52
(4,32)	1:A:26:CYS:CB	1:A:76:TYR:H	7	14.5
(4,14)	1:A:26:CYS:CB	1:A:53:GLN:H	17	14.5
(4,74)	1:A:49:GLN:CB	1:A:80:ARG:H	10	14.49
(4,33)	1:A:26:CYS:CB	1:A:77:GLY:H	12	14.49
(4,52)	1:A:49:GLN:CB	1:A:22:GLU:H	5	14.48
(1,338)	1:A:86:CYS:CB	1:A:73:VAL:H	6	14.47
(4,193)	1:A:75:SER:CB	1:A:102:ARG:H	15	14.46
(4,189)	1:A:75:SER:CB	1:A:56:PHE:H	10	14.45
(4,74)	1:A:49:GLN:CB	1:A:80:ARG:H	4	14.43
(4,190)	1:A:75:SER:CB	1:A:58:TYR:H	11	14.43
(4,72)	1:A:49:GLN:CB	1:A:77:GLY:H	17	14.42
(4,161)	1:A:56:PHE:CB	1:A:106:GLN:H	20	14.42
(4,74)	1:A:49:GLN:CB	1:A:80:ARG:H	20	14.41
(4,185)	1:A:75:SER:CB	1:A:52:ILE:H	1	14.41
(4,14)	1:A:26:CYS:CB	1:A:53:GLN:H	9	14.4
(4,138)	1:A:56:PHE:CB	1:A:76:TYR:H	15	14.4
(4,185)	1:A:75:SER:CB	1:A:52:ILE:H	3	14.39
(4,138)	1:A:56:PHE:CB	1:A:76:TYR:H	20	14.39
(4,52)	1:A:49:GLN:CB	1:A:22:GLU:H	15	14.38
(4,53)	1:A:49:GLN:CB	1:A:23:TYR:H	1	14.37
(4,15)	1:A:26:CYS:CB	1:A:54:ARG:H	3	14.37
(4,53)	1:A:49:GLN:CB	1:A:23:TYR:H	19	14.36
(4,191)	1:A:75:SER:CB	1:A:100:LYS:H	18	14.36
(4,31)	1:A:26:CYS:CB	1:A:75:SER:H	1	14.35
(4,31)	1:A:26:CYS:CB	1:A:75:SER:H	12	14.35
(4,185)	1:A:75:SER:CB	1:A:52:ILE:H	12	14.35
(4,13)	1:A:26:CYS:CB	1:A:52:ILE:H	17	14.35
(4,30)	1:A:26:CYS:CB	1:A:74:VAL:H	6	14.34
(4,214)	1:A:86:CYS:CB	1:A:42:THR:H	15	14.34
(4,191)	1:A:75:SER:CB	1:A:100:LYS:H	12	14.34
(4,13)	1:A:26:CYS:CB	1:A:52:ILE:H	2	14.34
(4,187)	1:A:75:SER:CB	1:A:54:ARG:H	5	14.33
(4,187)	1:A:75:SER:CB	1:A:54:ARG:H	12	14.33
(4,193)	1:A:75:SER:CB	1:A:102:ARG:H	16	14.31
(4,185)	1:A:75:SER:CB	1:A:52:ILE:H	16	14.29
(4,159)	1:A:56:PHE:CB	1:A:104:THR:H	1	14.29
(4,16)	1:A:26:CYS:CB	1:A:55:LYS:H	5	14.28
(4,14)	1:A:26:CYS:CB	1:A:53:GLN:H	4	14.27
(4,185)	1:A:75:SER:CB	1:A:52:ILE:H	6	14.26
(4,159)	1:A:56:PHE:CB	1:A:104:THR:H	16	14.26
(4,53)	1:A:49:GLN:CB	1:A:23:TYR:H	14	14.25

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,53)	1:A:49:GLN:CB	1:A:23:TYR:H	18	14.23
(4,52)	1:A:49:GLN:CB	1:A:22:GLU:H	7	14.23
(4,214)	1:A:86:CYS:CB	1:A:42:THR:H	3	14.23
(4,72)	1:A:49:GLN:CB	1:A:77:GLY:H	16	14.22
(4,119)	1:A:56:PHE:CB	1:A:30:ALA:H	11	14.22
(4,214)	1:A:86:CYS:CB	1:A:42:THR:H	5	14.21
(4,191)	1:A:75:SER:CB	1:A:100:LYS:H	3	14.19
(4,18)	1:A:26:CYS:CB	1:A:58:TYR:H	20	14.19
(4,13)	1:A:26:CYS:CB	1:A:52:ILE:H	13	14.19
(4,118)	1:A:56:PHE:CB	1:A:28:SER:H	17	14.19
(4,194)	1:A:75:SER:CB	1:A:103:SER:H	19	14.18
(4,32)	1:A:26:CYS:CB	1:A:76:TYR:H	1	14.17
(4,184)	1:A:75:SER:CB	1:A:51:PHE:H	8	14.17
(4,160)	1:A:56:PHE:CB	1:A:105:ASP:H	16	14.17
(4,14)	1:A:26:CYS:CB	1:A:53:GLN:H	2	14.17
(4,93)	1:A:49:GLN:CB	1:A:106:GLN:H	8	14.16
(4,53)	1:A:49:GLN:CB	1:A:23:TYR:H	13	14.16
(4,53)	1:A:49:GLN:CB	1:A:23:TYR:H	20	14.16
(4,214)	1:A:86:CYS:CB	1:A:42:THR:H	18	14.16
(4,187)	1:A:75:SER:CB	1:A:54:ARG:H	1	14.16
(4,64)	1:A:49:GLN:CB	1:A:37:THR:H	14	14.15
(4,190)	1:A:75:SER:CB	1:A:58:TYR:H	10	14.15
(4,159)	1:A:56:PHE:CB	1:A:104:THR:H	7	14.15
(4,73)	1:A:49:GLN:CB	1:A:79:THR:H	3	14.13
(4,64)	1:A:49:GLN:CB	1:A:37:THR:H	6	14.13
(4,17)	1:A:26:CYS:CB	1:A:56:PHE:H	15	14.13
(4,214)	1:A:86:CYS:CB	1:A:42:THR:H	17	14.12
(4,72)	1:A:49:GLN:CB	1:A:77:GLY:H	19	14.11
(4,45)	1:A:26:CYS:CB	1:A:108:SER:H	2	14.11
(4,157)	1:A:56:PHE:CB	1:A:102:ARG:H	8	14.11
(4,13)	1:A:26:CYS:CB	1:A:52:ILE:H	4	14.11
(4,62)	1:A:49:GLN:CB	1:A:35:VAL:H	15	14.1
(4,191)	1:A:75:SER:CB	1:A:100:LYS:H	5	14.1
(4,95)	1:A:49:GLN:CB	1:A:108:SER:H	12	14.09
(4,73)	1:A:49:GLN:CB	1:A:79:THR:H	18	14.09
(4,45)	1:A:26:CYS:CB	1:A:108:SER:H	14	14.09
(4,185)	1:A:75:SER:CB	1:A:52:ILE:H	18	14.08
(4,53)	1:A:49:GLN:CB	1:A:23:TYR:H	16	14.07
(4,194)	1:A:75:SER:CB	1:A:103:SER:H	5	14.07
(4,186)	1:A:75:SER:CB	1:A:53:GLN:H	17	14.07
(4,191)	1:A:75:SER:CB	1:A:100:LYS:H	15	14.06
(4,185)	1:A:75:SER:CB	1:A:52:ILE:H	20	14.06

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,73)	1:A:49:GLN:CB	1:A:79:THR:H	8	14.05
(4,188)	1:A:75:SER:CB	1:A:55:LYS:H	10	14.05
(4,73)	1:A:49:GLN:CB	1:A:79:THR:H	1	14.04
(4,194)	1:A:75:SER:CB	1:A:103:SER:H	2	14.04
(4,14)	1:A:26:CYS:CB	1:A:53:GLN:H	13	14.04
(4,72)	1:A:49:GLN:CB	1:A:77:GLY:H	5	14.03
(4,53)	1:A:49:GLN:CB	1:A:23:TYR:H	8	14.03
(4,118)	1:A:56:PHE:CB	1:A:28:SER:H	9	14.02
(4,53)	1:A:49:GLN:CB	1:A:23:TYR:H	2	14.01
(4,187)	1:A:75:SER:CB	1:A:54:ARG:H	3	14.01
(4,53)	1:A:49:GLN:CB	1:A:23:TYR:H	5	14.0
(4,185)	1:A:75:SER:CB	1:A:52:ILE:H	13	13.99
(1,309)	1:A:49:GLN:CB	1:A:39:VAL:H	20	13.99
(4,185)	1:A:75:SER:CB	1:A:52:ILE:H	7	13.97
(4,135)	1:A:56:PHE:CB	1:A:73:VAL:H	13	13.97
(4,118)	1:A:56:PHE:CB	1:A:28:SER:H	5	13.97
(4,135)	1:A:56:PHE:CB	1:A:73:VAL:H	4	13.96
(4,135)	1:A:56:PHE:CB	1:A:73:VAL:H	7	13.95
(4,135)	1:A:56:PHE:CB	1:A:73:VAL:H	16	13.95
(4,119)	1:A:56:PHE:CB	1:A:30:ALA:H	4	13.95
(4,32)	1:A:26:CYS:CB	1:A:76:TYR:H	12	13.94
(4,135)	1:A:56:PHE:CB	1:A:73:VAL:H	5	13.94
(4,135)	1:A:56:PHE:CB	1:A:73:VAL:H	19	13.94
(4,53)	1:A:49:GLN:CB	1:A:23:TYR:H	4	13.93
(4,135)	1:A:56:PHE:CB	1:A:73:VAL:H	6	13.93
(4,226)	1:A:86:CYS:CB	1:A:55:LYS:H	8	13.92
(4,16)	1:A:26:CYS:CB	1:A:55:LYS:H	15	13.92
(4,14)	1:A:26:CYS:CB	1:A:53:GLN:H	8	13.92
(4,15)	1:A:26:CYS:CB	1:A:54:ARG:H	10	13.91
(4,135)	1:A:56:PHE:CB	1:A:73:VAL:H	2	13.91
(4,135)	1:A:56:PHE:CB	1:A:73:VAL:H	17	13.91
(4,53)	1:A:49:GLN:CB	1:A:23:TYR:H	7	13.9
(4,135)	1:A:56:PHE:CB	1:A:73:VAL:H	3	13.9
(4,135)	1:A:56:PHE:CB	1:A:73:VAL:H	12	13.9
(4,194)	1:A:75:SER:CB	1:A:103:SER:H	1	13.89
(4,192)	1:A:75:SER:CB	1:A:101:ASP:H	3	13.89
(4,192)	1:A:75:SER:CB	1:A:101:ASP:H	16	13.89
(4,186)	1:A:75:SER:CB	1:A:53:GLN:H	5	13.89
(4,135)	1:A:56:PHE:CB	1:A:73:VAL:H	1	13.89
(4,160)	1:A:56:PHE:CB	1:A:105:ASP:H	1	13.88
(4,15)	1:A:26:CYS:CB	1:A:54:ARG:H	12	13.88
(4,135)	1:A:56:PHE:CB	1:A:73:VAL:H	8	13.88

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,214)	1:A:86:CYS:CB	1:A:42:THR:H	6	13.87
(4,214)	1:A:86:CYS:CB	1:A:42:THR:H	8	13.87
(4,185)	1:A:75:SER:CB	1:A:52:ILE:H	19	13.87
(4,135)	1:A:56:PHE:CB	1:A:73:VAL:H	14	13.87
(4,119)	1:A:56:PHE:CB	1:A:30:ALA:H	2	13.87
(4,226)	1:A:86:CYS:CB	1:A:55:LYS:H	17	13.86
(4,186)	1:A:75:SER:CB	1:A:53:GLN:H	9	13.86
(4,184)	1:A:75:SER:CB	1:A:51:PHE:H	13	13.86
(4,192)	1:A:75:SER:CB	1:A:101:ASP:H	12	13.85
(4,135)	1:A:56:PHE:CB	1:A:73:VAL:H	9	13.85
(4,53)	1:A:49:GLN:CB	1:A:23:TYR:H	6	13.83
(4,158)	1:A:56:PHE:CB	1:A:103:SER:H	5	13.83
(4,29)	1:A:26:CYS:CB	1:A:73:VAL:H	10	13.82
(4,226)	1:A:86:CYS:CB	1:A:55:LYS:H	9	13.82
(4,187)	1:A:75:SER:CB	1:A:54:ARG:H	18	13.82
(4,135)	1:A:56:PHE:CB	1:A:73:VAL:H	18	13.82
(4,192)	1:A:75:SER:CB	1:A:101:ASP:H	19	13.81
(4,14)	1:A:26:CYS:CB	1:A:53:GLN:H	3	13.81
(1,327)	1:A:75:SER:CB	1:A:61:GLN:H	10	13.8
(4,40)	1:A:26:CYS:CB	1:A:103:SER:H	10	13.79
(4,40)	1:A:26:CYS:CB	1:A:103:SER:H	11	13.79
(4,187)	1:A:75:SER:CB	1:A:54:ARG:H	6	13.78
(4,94)	1:A:49:GLN:CB	1:A:107:ARG:H	10	13.77
(4,215)	1:A:86:CYS:CB	1:A:43:GLY:H	14	13.76
(4,118)	1:A:56:PHE:CB	1:A:28:SER:H	18	13.76
(4,191)	1:A:75:SER:CB	1:A:100:LYS:H	8	13.75
(4,33)	1:A:26:CYS:CB	1:A:77:GLY:H	5	13.74
(4,187)	1:A:75:SER:CB	1:A:54:ARG:H	20	13.74
(4,14)	1:A:26:CYS:CB	1:A:53:GLN:H	11	13.73
(4,226)	1:A:86:CYS:CB	1:A:55:LYS:H	15	13.71
(4,226)	1:A:86:CYS:CB	1:A:55:LYS:H	20	13.71
(4,164)	1:A:75:SER:CB	1:A:26:CYS:H	17	13.71
(4,13)	1:A:26:CYS:CB	1:A:52:ILE:H	3	13.71
(4,72)	1:A:49:GLN:CB	1:A:77:GLY:H	9	13.7
(4,52)	1:A:49:GLN:CB	1:A:22:GLU:H	10	13.7
(4,196)	1:A:86:CYS:CB	1:A:16:LYS:H	18	13.7
(4,72)	1:A:49:GLN:CB	1:A:77:GLY:H	14	13.69
(4,62)	1:A:49:GLN:CB	1:A:35:VAL:H	20	13.69
(4,54)	1:A:49:GLN:CB	1:A:24:ALA:H	20	13.69
(4,29)	1:A:26:CYS:CB	1:A:73:VAL:H	20	13.69
(4,185)	1:A:75:SER:CB	1:A:52:ILE:H	2	13.69
(4,185)	1:A:75:SER:CB	1:A:52:ILE:H	14	13.69

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,327)	1:A:75:SER:CB	1:A:61:GLN:H	8	13.69
(4,64)	1:A:49:GLN:CB	1:A:37:THR:H	9	13.68
(4,160)	1:A:56:PHE:CB	1:A:105:ASP:H	19	13.68
(4,54)	1:A:49:GLN:CB	1:A:24:ALA:H	17	13.67
(4,227)	1:A:86:CYS:CB	1:A:58:TYR:H	17	13.67
(4,162)	1:A:56:PHE:CB	1:A:107:ARG:H	3	13.67
(4,64)	1:A:49:GLN:CB	1:A:37:THR:H	17	13.66
(4,184)	1:A:75:SER:CB	1:A:51:PHE:H	17	13.66
(4,13)	1:A:26:CYS:CB	1:A:52:ILE:H	7	13.66
(4,163)	1:A:56:PHE:CB	1:A:108:SER:H	16	13.65
(4,214)	1:A:86:CYS:CB	1:A:42:THR:H	12	13.62
(4,192)	1:A:75:SER:CB	1:A:101:ASP:H	5	13.62
(4,227)	1:A:86:CYS:CB	1:A:58:TYR:H	9	13.61
(4,119)	1:A:56:PHE:CB	1:A:30:ALA:H	13	13.61
(4,74)	1:A:49:GLN:CB	1:A:80:ARG:H	15	13.6
(4,184)	1:A:75:SER:CB	1:A:51:PHE:H	9	13.6
(4,164)	1:A:75:SER:CB	1:A:26:CYS:H	4	13.59
(4,214)	1:A:86:CYS:CB	1:A:42:THR:H	16	13.58
(4,161)	1:A:56:PHE:CB	1:A:106:GLN:H	3	13.58
(4,160)	1:A:56:PHE:CB	1:A:105:ASP:H	17	13.58
(4,119)	1:A:56:PHE:CB	1:A:30:ALA:H	8	13.58
(4,13)	1:A:26:CYS:CB	1:A:52:ILE:H	8	13.57
(4,54)	1:A:49:GLN:CB	1:A:24:ALA:H	9	13.56
(4,227)	1:A:86:CYS:CB	1:A:58:TYR:H	3	13.56
(4,196)	1:A:86:CYS:CB	1:A:16:LYS:H	10	13.56
(4,227)	1:A:86:CYS:CB	1:A:58:TYR:H	12	13.55
(4,185)	1:A:75:SER:CB	1:A:52:ILE:H	8	13.55
(4,162)	1:A:56:PHE:CB	1:A:107:ARG:H	20	13.55
(4,156)	1:A:56:PHE:CB	1:A:101:ASP:H	4	13.55
(4,73)	1:A:49:GLN:CB	1:A:79:THR:H	13	13.54
(4,187)	1:A:75:SER:CB	1:A:54:ARG:H	16	13.54
(1,309)	1:A:49:GLN:CB	1:A:39:VAL:H	1	13.53
(4,31)	1:A:26:CYS:CB	1:A:75:SER:H	8	13.52
(4,157)	1:A:56:PHE:CB	1:A:102:ARG:H	4	13.52
(4,118)	1:A:56:PHE:CB	1:A:28:SER:H	3	13.51
(4,226)	1:A:86:CYS:CB	1:A:55:LYS:H	7	13.5
(4,226)	1:A:86:CYS:CB	1:A:55:LYS:H	13	13.5
(4,13)	1:A:26:CYS:CB	1:A:52:ILE:H	11	13.5
(4,226)	1:A:86:CYS:CB	1:A:55:LYS:H	11	13.49
(4,184)	1:A:75:SER:CB	1:A:51:PHE:H	5	13.49
(4,53)	1:A:49:GLN:CB	1:A:23:TYR:H	10	13.48
(1,309)	1:A:49:GLN:CB	1:A:39:VAL:H	5	13.48

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,227)	1:A:86:CYS:CB	1:A:58:TYR:H	1	13.47
(4,15)	1:A:26:CYS:CB	1:A:54:ARG:H	1	13.47
(4,14)	1:A:26:CYS:CB	1:A:53:GLN:H	7	13.47
(4,72)	1:A:49:GLN:CB	1:A:77:GLY:H	6	13.46
(4,28)	1:A:26:CYS:CB	1:A:72:SER:H	20	13.45
(4,119)	1:A:56:PHE:CB	1:A:30:ALA:H	7	13.45
(1,309)	1:A:49:GLN:CB	1:A:39:VAL:H	7	13.45
(4,227)	1:A:86:CYS:CB	1:A:58:TYR:H	5	13.44
(4,181)	1:A:75:SER:CB	1:A:48:LEU:H	5	13.44
(4,161)	1:A:56:PHE:CB	1:A:106:GLN:H	9	13.44
(4,227)	1:A:86:CYS:CB	1:A:58:TYR:H	14	13.43
(4,226)	1:A:86:CYS:CB	1:A:55:LYS:H	2	13.43
(1,309)	1:A:49:GLN:CB	1:A:39:VAL:H	8	13.43
(4,227)	1:A:86:CYS:CB	1:A:58:TYR:H	2	13.42
(4,187)	1:A:75:SER:CB	1:A:54:ARG:H	19	13.42
(4,184)	1:A:75:SER:CB	1:A:51:PHE:H	7	13.42
(1,309)	1:A:49:GLN:CB	1:A:39:VAL:H	12	13.42
(4,27)	1:A:26:CYS:CB	1:A:71:GLY:H	20	13.41
(1,309)	1:A:49:GLN:CB	1:A:39:VAL:H	10	13.41
(4,53)	1:A:49:GLN:CB	1:A:23:TYR:H	15	13.39
(4,64)	1:A:49:GLN:CB	1:A:37:THR:H	4	13.38
(4,15)	1:A:26:CYS:CB	1:A:54:ARG:H	18	13.38
(4,135)	1:A:56:PHE:CB	1:A:73:VAL:H	10	13.38
(4,119)	1:A:56:PHE:CB	1:A:30:ALA:H	10	13.38
(4,73)	1:A:49:GLN:CB	1:A:79:THR:H	7	13.36
(4,214)	1:A:86:CYS:CB	1:A:42:THR:H	7	13.36
(4,64)	1:A:49:GLN:CB	1:A:37:THR:H	3	13.35
(4,72)	1:A:49:GLN:CB	1:A:77:GLY:H	12	13.34
(4,161)	1:A:56:PHE:CB	1:A:106:GLN:H	12	13.34
(4,64)	1:A:49:GLN:CB	1:A:37:THR:H	11	13.33
(4,54)	1:A:49:GLN:CB	1:A:24:ALA:H	12	13.33
(4,186)	1:A:75:SER:CB	1:A:53:GLN:H	6	13.32
(4,185)	1:A:75:SER:CB	1:A:52:ILE:H	11	13.32
(4,43)	1:A:26:CYS:CB	1:A:106:GLN:H	8	13.31
(4,33)	1:A:26:CYS:CB	1:A:77:GLY:H	8	13.31
(4,64)	1:A:49:GLN:CB	1:A:37:THR:H	10	13.3
(4,214)	1:A:86:CYS:CB	1:A:42:THR:H	1	13.3
(4,187)	1:A:75:SER:CB	1:A:54:ARG:H	15	13.3
(4,184)	1:A:75:SER:CB	1:A:51:PHE:H	2	13.3
(4,137)	1:A:56:PHE:CB	1:A:75:SER:H	10	13.3
(4,227)	1:A:86:CYS:CB	1:A:58:TYR:H	6	13.29
(4,214)	1:A:86:CYS:CB	1:A:42:THR:H	19	13.29

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,185)	1:A:75:SER:CB	1:A:52:ILE:H	15	13.29
(4,73)	1:A:49:GLN:CB	1:A:79:THR:H	11	13.28
(4,65)	1:A:49:GLN:CB	1:A:38:PHE:H	15	13.28
(1,327)	1:A:75:SER:CB	1:A:61:GLN:H	5	13.28
(4,137)	1:A:56:PHE:CB	1:A:75:SER:H	18	13.27
(4,137)	1:A:56:PHE:CB	1:A:75:SER:H	9	13.26
(1,309)	1:A:49:GLN:CB	1:A:39:VAL:H	17	13.26
(4,54)	1:A:49:GLN:CB	1:A:24:ALA:H	15	13.25
(1,327)	1:A:75:SER:CB	1:A:61:GLN:H	11	13.25
(1,327)	1:A:75:SER:CB	1:A:61:GLN:H	16	13.25
(4,30)	1:A:26:CYS:CB	1:A:74:VAL:H	10	13.24
(4,226)	1:A:86:CYS:CB	1:A:55:LYS:H	12	13.24
(4,15)	1:A:26:CYS:CB	1:A:54:ARG:H	14	13.24
(4,64)	1:A:49:GLN:CB	1:A:37:THR:H	16	13.23
(4,186)	1:A:75:SER:CB	1:A:53:GLN:H	3	13.23
(4,137)	1:A:56:PHE:CB	1:A:75:SER:H	11	13.23
(4,64)	1:A:49:GLN:CB	1:A:37:THR:H	18	13.22
(4,160)	1:A:56:PHE:CB	1:A:105:ASP:H	9	13.22
(1,309)	1:A:49:GLN:CB	1:A:39:VAL:H	13	13.22
(1,309)	1:A:49:GLN:CB	1:A:39:VAL:H	14	13.22
(4,227)	1:A:86:CYS:CB	1:A:58:TYR:H	8	13.21
(4,191)	1:A:75:SER:CB	1:A:100:LYS:H	7	13.21
(1,327)	1:A:75:SER:CB	1:A:61:GLN:H	2	13.21
(1,310)	1:A:49:GLN:CB	1:A:40:THR:H	14	13.21
(1,309)	1:A:49:GLN:CB	1:A:39:VAL:H	11	13.21
(4,64)	1:A:49:GLN:CB	1:A:37:THR:H	19	13.2
(4,186)	1:A:75:SER:CB	1:A:53:GLN:H	8	13.2
(4,137)	1:A:56:PHE:CB	1:A:75:SER:H	8	13.2
(4,119)	1:A:56:PHE:CB	1:A:30:ALA:H	9	13.2
(4,145)	1:A:56:PHE:CB	1:A:85:LYS:H	10	13.19
(4,64)	1:A:49:GLN:CB	1:A:37:THR:H	2	13.18
(4,32)	1:A:26:CYS:CB	1:A:76:TYR:H	5	13.18
(4,73)	1:A:49:GLN:CB	1:A:79:THR:H	10	13.17
(4,64)	1:A:49:GLN:CB	1:A:37:THR:H	13	13.17
(4,164)	1:A:75:SER:CB	1:A:26:CYS:H	9	13.17
(4,137)	1:A:56:PHE:CB	1:A:75:SER:H	13	13.17
(4,137)	1:A:56:PHE:CB	1:A:75:SER:H	17	13.17
(1,309)	1:A:49:GLN:CB	1:A:39:VAL:H	2	13.17
(4,226)	1:A:86:CYS:CB	1:A:55:LYS:H	18	13.16
(4,187)	1:A:75:SER:CB	1:A:54:ARG:H	4	13.16
(4,187)	1:A:75:SER:CB	1:A:54:ARG:H	14	13.16
(4,186)	1:A:75:SER:CB	1:A:53:GLN:H	12	13.16

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,137)	1:A:56:PHE:CB	1:A:75:SER:H	6	13.16
(4,119)	1:A:56:PHE:CB	1:A:30:ALA:H	17	13.16
(4,71)	1:A:49:GLN:CB	1:A:76:TYR:H	17	13.15
(4,213)	1:A:86:CYS:CB	1:A:41:GLY:H	8	13.15
(4,192)	1:A:75:SER:CB	1:A:101:ASP:H	14	13.15
(1,309)	1:A:49:GLN:CB	1:A:39:VAL:H	9	13.15
(4,71)	1:A:49:GLN:CB	1:A:76:TYR:H	5	13.14
(4,64)	1:A:49:GLN:CB	1:A:37:THR:H	7	13.14
(4,31)	1:A:26:CYS:CB	1:A:75:SER:H	5	13.14
(4,227)	1:A:86:CYS:CB	1:A:58:TYR:H	7	13.14
(4,137)	1:A:56:PHE:CB	1:A:75:SER:H	2	13.14
(4,137)	1:A:56:PHE:CB	1:A:75:SER:H	7	13.14
(4,72)	1:A:49:GLN:CB	1:A:77:GLY:H	3	13.13
(4,62)	1:A:49:GLN:CB	1:A:35:VAL:H	5	13.13
(4,54)	1:A:49:GLN:CB	1:A:24:ALA:H	1	13.13
(4,227)	1:A:86:CYS:CB	1:A:58:TYR:H	16	13.13
(4,227)	1:A:86:CYS:CB	1:A:58:TYR:H	19	13.13
(4,186)	1:A:75:SER:CB	1:A:53:GLN:H	1	13.13
(4,137)	1:A:56:PHE:CB	1:A:75:SER:H	3	13.13
(4,137)	1:A:56:PHE:CB	1:A:75:SER:H	5	13.13
(4,137)	1:A:56:PHE:CB	1:A:75:SER:H	20	13.13
(4,64)	1:A:49:GLN:CB	1:A:37:THR:H	8	13.12
(4,186)	1:A:75:SER:CB	1:A:53:GLN:H	16	13.12
(4,18)	1:A:26:CYS:CB	1:A:58:TYR:H	15	13.12
(4,3)	1:A:26:CYS:CB	1:A:40:THR:H	9	13.11
(4,213)	1:A:86:CYS:CB	1:A:41:GLY:H	15	13.11
(4,137)	1:A:56:PHE:CB	1:A:75:SER:H	12	13.11
(4,120)	1:A:56:PHE:CB	1:A:31:PHE:H	11	13.11
(1,309)	1:A:49:GLN:CB	1:A:39:VAL:H	6	13.11
(4,72)	1:A:49:GLN:CB	1:A:77:GLY:H	8	13.1
(4,226)	1:A:86:CYS:CB	1:A:55:LYS:H	3	13.1
(4,192)	1:A:75:SER:CB	1:A:101:ASP:H	17	13.1
(4,164)	1:A:75:SER:CB	1:A:26:CYS:H	3	13.1
(1,327)	1:A:75:SER:CB	1:A:61:GLN:H	3	13.1
(1,327)	1:A:75:SER:CB	1:A:61:GLN:H	13	13.1
(1,327)	1:A:75:SER:CB	1:A:61:GLN:H	17	13.1
(1,327)	1:A:75:SER:CB	1:A:61:GLN:H	20	13.1
(1,310)	1:A:49:GLN:CB	1:A:40:THR:H	6	13.1
(4,195)	1:A:86:CYS:CB	1:A:15:ALA:H	6	13.09
(4,184)	1:A:75:SER:CB	1:A:51:PHE:H	1	13.09
(1,327)	1:A:75:SER:CB	1:A:61:GLN:H	6	13.09
(1,327)	1:A:75:SER:CB	1:A:61:GLN:H	15	13.09

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,310)	1:A:49:GLN:CB	1:A:40:THR:H	15	13.09
(4,137)	1:A:56:PHE:CB	1:A:75:SER:H	15	13.08
(4,135)	1:A:56:PHE:CB	1:A:73:VAL:H	11	13.08
(4,73)	1:A:49:GLN:CB	1:A:79:THR:H	20	13.07
(4,191)	1:A:75:SER:CB	1:A:100:LYS:H	9	13.06
(4,186)	1:A:75:SER:CB	1:A:53:GLN:H	18	13.06
(4,186)	1:A:75:SER:CB	1:A:53:GLN:H	19	13.06
(4,181)	1:A:75:SER:CB	1:A:48:LEU:H	9	13.06
(4,181)	1:A:75:SER:CB	1:A:48:LEU:H	17	13.05
(4,119)	1:A:56:PHE:CB	1:A:30:ALA:H	3	13.05
(4,119)	1:A:56:PHE:CB	1:A:30:ALA:H	12	13.05
(4,227)	1:A:86:CYS:CB	1:A:58:TYR:H	20	13.04
(4,12)	1:A:26:CYS:CB	1:A:51:PHE:H	8	13.04
(4,64)	1:A:49:GLN:CB	1:A:37:THR:H	5	13.03
(4,227)	1:A:86:CYS:CB	1:A:58:TYR:H	4	13.03
(4,184)	1:A:75:SER:CB	1:A:51:PHE:H	12	13.03
(4,158)	1:A:56:PHE:CB	1:A:103:SER:H	16	13.03
(4,137)	1:A:56:PHE:CB	1:A:75:SER:H	1	13.03
(1,327)	1:A:75:SER:CB	1:A:61:GLN:H	1	13.03
(1,327)	1:A:75:SER:CB	1:A:61:GLN:H	18	13.03
(4,71)	1:A:49:GLN:CB	1:A:76:TYR:H	16	13.02
(4,64)	1:A:49:GLN:CB	1:A:37:THR:H	1	13.02
(4,29)	1:A:26:CYS:CB	1:A:73:VAL:H	15	13.02
(1,327)	1:A:75:SER:CB	1:A:61:GLN:H	19	13.02
(4,186)	1:A:75:SER:CB	1:A:53:GLN:H	20	13.01
(4,13)	1:A:26:CYS:CB	1:A:52:ILE:H	10	13.01
(4,13)	1:A:26:CYS:CB	1:A:52:ILE:H	12	13.01
(1,309)	1:A:49:GLN:CB	1:A:39:VAL:H	16	13.01
(4,62)	1:A:49:GLN:CB	1:A:35:VAL:H	8	13.0
(4,227)	1:A:86:CYS:CB	1:A:58:TYR:H	13	13.0
(4,194)	1:A:75:SER:CB	1:A:103:SER:H	3	13.0
(4,186)	1:A:75:SER:CB	1:A:53:GLN:H	7	13.0
(1,309)	1:A:49:GLN:CB	1:A:39:VAL:H	3	13.0
(4,64)	1:A:49:GLN:CB	1:A:37:THR:H	15	12.99
(4,62)	1:A:49:GLN:CB	1:A:35:VAL:H	1	12.99
(4,157)	1:A:56:PHE:CB	1:A:102:ARG:H	11	12.99
(4,15)	1:A:26:CYS:CB	1:A:54:ARG:H	6	12.99
(4,62)	1:A:49:GLN:CB	1:A:35:VAL:H	12	12.98
(4,191)	1:A:75:SER:CB	1:A:100:LYS:H	17	12.98
(4,14)	1:A:26:CYS:CB	1:A:53:GLN:H	10	12.98
(4,137)	1:A:56:PHE:CB	1:A:75:SER:H	14	12.98
(4,31)	1:A:26:CYS:CB	1:A:75:SER:H	14	12.97

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,158)	1:A:56:PHE:CB	1:A:103:SER:H	8	12.97
(4,227)	1:A:86:CYS:CB	1:A:58:TYR:H	15	12.96
(4,14)	1:A:26:CYS:CB	1:A:53:GLN:H	12	12.96
(4,73)	1:A:49:GLN:CB	1:A:79:THR:H	2	12.95
(4,71)	1:A:49:GLN:CB	1:A:76:TYR:H	19	12.95
(4,64)	1:A:49:GLN:CB	1:A:37:THR:H	12	12.95
(4,54)	1:A:49:GLN:CB	1:A:24:ALA:H	11	12.95
(4,227)	1:A:86:CYS:CB	1:A:58:TYR:H	18	12.95
(4,14)	1:A:26:CYS:CB	1:A:53:GLN:H	14	12.95
(4,62)	1:A:49:GLN:CB	1:A:35:VAL:H	17	12.94
(4,145)	1:A:56:PHE:CB	1:A:85:LYS:H	6	12.94
(4,226)	1:A:86:CYS:CB	1:A:55:LYS:H	1	12.93
(4,213)	1:A:86:CYS:CB	1:A:41:GLY:H	20	12.93
(4,119)	1:A:56:PHE:CB	1:A:30:ALA:H	18	12.93
(4,118)	1:A:56:PHE:CB	1:A:28:SER:H	19	12.93
(4,13)	1:A:26:CYS:CB	1:A:52:ILE:H	1	12.92
(4,120)	1:A:56:PHE:CB	1:A:31:PHE:H	2	12.92
(1,327)	1:A:75:SER:CB	1:A:61:GLN:H	14	12.92
(4,226)	1:A:86:CYS:CB	1:A:55:LYS:H	6	12.91
(4,62)	1:A:49:GLN:CB	1:A:35:VAL:H	7	12.9
(4,187)	1:A:75:SER:CB	1:A:54:ARG:H	11	12.9
(4,186)	1:A:75:SER:CB	1:A:53:GLN:H	13	12.9
(4,120)	1:A:56:PHE:CB	1:A:31:PHE:H	20	12.9
(4,119)	1:A:56:PHE:CB	1:A:30:ALA:H	1	12.9
(1,327)	1:A:75:SER:CB	1:A:61:GLN:H	9	12.9
(1,317)	1:A:56:PHE:CB	1:A:70:ALA:H	10	12.9
(4,214)	1:A:86:CYS:CB	1:A:42:THR:H	13	12.89
(4,213)	1:A:86:CYS:CB	1:A:41:GLY:H	5	12.89
(4,184)	1:A:75:SER:CB	1:A:51:PHE:H	3	12.89
(4,145)	1:A:56:PHE:CB	1:A:85:LYS:H	11	12.89
(4,14)	1:A:26:CYS:CB	1:A:53:GLN:H	18	12.88
(4,120)	1:A:56:PHE:CB	1:A:31:PHE:H	7	12.88
(4,64)	1:A:49:GLN:CB	1:A:37:THR:H	20	12.87
(4,54)	1:A:49:GLN:CB	1:A:24:ALA:H	8	12.87
(4,42)	1:A:26:CYS:CB	1:A:105:ASP:H	11	12.87
(4,226)	1:A:86:CYS:CB	1:A:55:LYS:H	5	12.87
(4,162)	1:A:56:PHE:CB	1:A:107:ARG:H	4	12.87
(1,327)	1:A:75:SER:CB	1:A:61:GLN:H	7	12.87
(4,137)	1:A:56:PHE:CB	1:A:75:SER:H	19	12.86
(4,62)	1:A:49:GLN:CB	1:A:35:VAL:H	10	12.85
(4,120)	1:A:56:PHE:CB	1:A:31:PHE:H	8	12.85
(1,309)	1:A:49:GLN:CB	1:A:39:VAL:H	19	12.85

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,62)	1:A:49:GLN:CB	1:A:35:VAL:H	2	12.84
(4,135)	1:A:56:PHE:CB	1:A:73:VAL:H	15	12.84
(4,54)	1:A:49:GLN:CB	1:A:24:ALA:H	13	12.83
(4,3)	1:A:26:CYS:CB	1:A:40:THR:H	6	12.83
(4,186)	1:A:75:SER:CB	1:A:53:GLN:H	14	12.83
(4,62)	1:A:49:GLN:CB	1:A:35:VAL:H	13	12.82
(4,54)	1:A:49:GLN:CB	1:A:24:ALA:H	5	12.82
(4,196)	1:A:86:CYS:CB	1:A:16:LYS:H	5	12.81
(4,157)	1:A:56:PHE:CB	1:A:102:ARG:H	13	12.81
(4,15)	1:A:26:CYS:CB	1:A:54:ARG:H	19	12.81
(4,145)	1:A:56:PHE:CB	1:A:85:LYS:H	9	12.81
(4,137)	1:A:56:PHE:CB	1:A:75:SER:H	16	12.81
(4,12)	1:A:26:CYS:CB	1:A:51:PHE:H	13	12.81
(4,145)	1:A:56:PHE:CB	1:A:85:LYS:H	13	12.8
(1,327)	1:A:75:SER:CB	1:A:61:GLN:H	4	12.8
(4,227)	1:A:86:CYS:CB	1:A:58:TYR:H	11	12.79
(4,191)	1:A:75:SER:CB	1:A:100:LYS:H	4	12.79
(4,145)	1:A:56:PHE:CB	1:A:85:LYS:H	7	12.79
(4,145)	1:A:56:PHE:CB	1:A:85:LYS:H	15	12.79
(4,137)	1:A:56:PHE:CB	1:A:75:SER:H	4	12.79
(4,195)	1:A:86:CYS:CB	1:A:15:ALA:H	2	12.78
(4,120)	1:A:56:PHE:CB	1:A:31:PHE:H	15	12.78
(4,182)	1:A:75:SER:CB	1:A:49:GLN:H	5	12.77
(4,161)	1:A:56:PHE:CB	1:A:106:GLN:H	7	12.77
(4,135)	1:A:56:PHE:CB	1:A:73:VAL:H	20	12.77
(4,119)	1:A:56:PHE:CB	1:A:30:ALA:H	20	12.77
(4,118)	1:A:56:PHE:CB	1:A:28:SER:H	16	12.77
(4,194)	1:A:75:SER:CB	1:A:103:SER:H	16	12.76
(4,72)	1:A:49:GLN:CB	1:A:77:GLY:H	1	12.75
(4,62)	1:A:49:GLN:CB	1:A:35:VAL:H	9	12.75
(4,35)	1:A:26:CYS:CB	1:A:80:ARG:H	17	12.75
(4,214)	1:A:86:CYS:CB	1:A:42:THR:H	14	12.75
(4,186)	1:A:75:SER:CB	1:A:53:GLN:H	2	12.75
(4,3)	1:A:26:CYS:CB	1:A:40:THR:H	4	12.74
(4,195)	1:A:86:CYS:CB	1:A:15:ALA:H	18	12.74
(4,145)	1:A:56:PHE:CB	1:A:85:LYS:H	3	12.74
(1,327)	1:A:75:SER:CB	1:A:61:GLN:H	12	12.74
(4,62)	1:A:49:GLN:CB	1:A:35:VAL:H	11	12.73
(4,40)	1:A:26:CYS:CB	1:A:103:SER:H	8	12.73
(1,309)	1:A:49:GLN:CB	1:A:39:VAL:H	18	12.73
(4,3)	1:A:26:CYS:CB	1:A:40:THR:H	18	12.72
(4,14)	1:A:26:CYS:CB	1:A:53:GLN:H	1	12.72

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,14)	1:A:26:CYS:CB	1:A:53:GLN:H	19	12.72
(4,195)	1:A:86:CYS:CB	1:A:15:ALA:H	8	12.71
(4,211)	1:A:86:CYS:CB	1:A:39:VAL:H	10	12.7
(4,145)	1:A:56:PHE:CB	1:A:85:LYS:H	18	12.7
(4,120)	1:A:56:PHE:CB	1:A:31:PHE:H	12	12.7
(4,195)	1:A:86:CYS:CB	1:A:15:ALA:H	10	12.69
(4,163)	1:A:56:PHE:CB	1:A:108:SER:H	7	12.69
(4,158)	1:A:56:PHE:CB	1:A:103:SER:H	19	12.69
(4,145)	1:A:56:PHE:CB	1:A:85:LYS:H	8	12.69
(4,14)	1:A:26:CYS:CB	1:A:53:GLN:H	6	12.69
(4,12)	1:A:26:CYS:CB	1:A:51:PHE:H	2	12.68
(4,72)	1:A:49:GLN:CB	1:A:77:GLY:H	13	12.67
(4,193)	1:A:75:SER:CB	1:A:102:ARG:H	18	12.67
(4,120)	1:A:56:PHE:CB	1:A:31:PHE:H	13	12.67
(4,33)	1:A:26:CYS:CB	1:A:77:GLY:H	14	12.66
(1,317)	1:A:56:PHE:CB	1:A:70:ALA:H	13	12.66
(1,317)	1:A:56:PHE:CB	1:A:70:ALA:H	16	12.66
(4,35)	1:A:26:CYS:CB	1:A:80:ARG:H	18	12.65
(4,3)	1:A:26:CYS:CB	1:A:40:THR:H	19	12.65
(4,214)	1:A:86:CYS:CB	1:A:42:THR:H	2	12.65
(1,315)	1:A:56:PHE:CB	1:A:46:PHE:H	3	12.65
(4,145)	1:A:56:PHE:CB	1:A:85:LYS:H	17	12.64
(4,13)	1:A:26:CYS:CB	1:A:52:ILE:H	14	12.64
(1,317)	1:A:56:PHE:CB	1:A:70:ALA:H	8	12.64
(1,315)	1:A:56:PHE:CB	1:A:46:PHE:H	14	12.64
(1,315)	1:A:56:PHE:CB	1:A:46:PHE:H	15	12.64
(1,309)	1:A:49:GLN:CB	1:A:39:VAL:H	4	12.64
(4,62)	1:A:49:GLN:CB	1:A:35:VAL:H	3	12.63
(4,62)	1:A:49:GLN:CB	1:A:35:VAL:H	16	12.63
(4,120)	1:A:56:PHE:CB	1:A:31:PHE:H	10	12.63
(4,118)	1:A:56:PHE:CB	1:A:28:SER:H	14	12.63
(1,317)	1:A:56:PHE:CB	1:A:70:ALA:H	7	12.63
(4,191)	1:A:75:SER:CB	1:A:100:LYS:H	10	12.62
(4,145)	1:A:56:PHE:CB	1:A:85:LYS:H	12	12.62
(1,317)	1:A:56:PHE:CB	1:A:70:ALA:H	6	12.62
(4,145)	1:A:56:PHE:CB	1:A:85:LYS:H	1	12.61
(4,32)	1:A:26:CYS:CB	1:A:76:TYR:H	8	12.6
(4,3)	1:A:26:CYS:CB	1:A:40:THR:H	14	12.6
(1,317)	1:A:56:PHE:CB	1:A:70:ALA:H	4	12.6
(4,3)	1:A:26:CYS:CB	1:A:40:THR:H	16	12.59
(4,28)	1:A:26:CYS:CB	1:A:72:SER:H	15	12.59
(4,213)	1:A:86:CYS:CB	1:A:41:GLY:H	9	12.59

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,13)	1:A:26:CYS:CB	1:A:52:ILE:H	6	12.59
(1,315)	1:A:56:PHE:CB	1:A:46:PHE:H	20	12.59
(4,71)	1:A:49:GLN:CB	1:A:76:TYR:H	9	12.58
(4,43)	1:A:26:CYS:CB	1:A:106:GLN:H	2	12.56
(4,160)	1:A:56:PHE:CB	1:A:105:ASP:H	4	12.56
(4,15)	1:A:26:CYS:CB	1:A:54:ARG:H	16	12.56
(4,145)	1:A:56:PHE:CB	1:A:85:LYS:H	20	12.56
(4,13)	1:A:26:CYS:CB	1:A:52:ILE:H	18	12.56
(4,120)	1:A:56:PHE:CB	1:A:31:PHE:H	1	12.56
(1,317)	1:A:56:PHE:CB	1:A:70:ALA:H	19	12.56
(4,62)	1:A:49:GLN:CB	1:A:35:VAL:H	18	12.55
(4,54)	1:A:49:GLN:CB	1:A:24:ALA:H	2	12.55
(1,315)	1:A:56:PHE:CB	1:A:46:PHE:H	19	12.55
(4,71)	1:A:49:GLN:CB	1:A:76:TYR:H	14	12.54
(4,30)	1:A:26:CYS:CB	1:A:74:VAL:H	11	12.54
(4,27)	1:A:26:CYS:CB	1:A:71:GLY:H	15	12.54
(4,65)	1:A:49:GLN:CB	1:A:38:PHE:H	20	12.53
(4,54)	1:A:49:GLN:CB	1:A:24:ALA:H	7	12.53
(4,54)	1:A:49:GLN:CB	1:A:24:ALA:H	3	12.52
(4,3)	1:A:26:CYS:CB	1:A:40:THR:H	11	12.52
(4,226)	1:A:86:CYS:CB	1:A:55:LYS:H	10	12.52
(4,65)	1:A:49:GLN:CB	1:A:38:PHE:H	8	12.51
(4,62)	1:A:49:GLN:CB	1:A:35:VAL:H	19	12.51
(4,212)	1:A:86:CYS:CB	1:A:40:THR:H	11	12.51
(1,317)	1:A:56:PHE:CB	1:A:70:ALA:H	17	12.51
(4,65)	1:A:49:GLN:CB	1:A:38:PHE:H	10	12.5
(1,317)	1:A:56:PHE:CB	1:A:70:ALA:H	14	12.5
(4,65)	1:A:49:GLN:CB	1:A:38:PHE:H	5	12.49
(4,3)	1:A:26:CYS:CB	1:A:40:THR:H	15	12.49
(4,186)	1:A:75:SER:CB	1:A:53:GLN:H	15	12.49
(4,145)	1:A:56:PHE:CB	1:A:85:LYS:H	2	12.49
(1,315)	1:A:56:PHE:CB	1:A:46:PHE:H	12	12.49
(4,72)	1:A:49:GLN:CB	1:A:77:GLY:H	7	12.48
(4,181)	1:A:75:SER:CB	1:A:48:LEU:H	3	12.48
(1,317)	1:A:56:PHE:CB	1:A:70:ALA:H	12	12.48
(4,158)	1:A:56:PHE:CB	1:A:103:SER:H	11	12.47
(4,65)	1:A:49:GLN:CB	1:A:38:PHE:H	7	12.46
(4,65)	1:A:49:GLN:CB	1:A:38:PHE:H	13	12.46
(4,62)	1:A:49:GLN:CB	1:A:35:VAL:H	6	12.46
(4,3)	1:A:26:CYS:CB	1:A:40:THR:H	17	12.45
(4,196)	1:A:86:CYS:CB	1:A:16:LYS:H	19	12.45
(4,191)	1:A:75:SER:CB	1:A:100:LYS:H	14	12.45

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,317)	1:A:56:PHE:CB	1:A:70:ALA:H	2	12.45
(1,317)	1:A:56:PHE:CB	1:A:70:ALA:H	9	12.45
(1,315)	1:A:56:PHE:CB	1:A:46:PHE:H	16	12.45
(4,54)	1:A:49:GLN:CB	1:A:24:ALA:H	19	12.44
(4,184)	1:A:75:SER:CB	1:A:51:PHE:H	18	12.43
(1,317)	1:A:56:PHE:CB	1:A:70:ALA:H	5	12.43
(1,317)	1:A:56:PHE:CB	1:A:70:ALA:H	11	12.43
(4,3)	1:A:26:CYS:CB	1:A:40:THR:H	2	12.42
(4,185)	1:A:75:SER:CB	1:A:52:ILE:H	4	12.42
(1,317)	1:A:56:PHE:CB	1:A:70:ALA:H	3	12.42
(4,3)	1:A:26:CYS:CB	1:A:40:THR:H	12	12.41
(4,192)	1:A:75:SER:CB	1:A:101:ASP:H	7	12.41
(4,182)	1:A:75:SER:CB	1:A:49:GLN:H	17	12.4
(4,145)	1:A:56:PHE:CB	1:A:85:LYS:H	5	12.4
(4,71)	1:A:49:GLN:CB	1:A:76:TYR:H	6	12.39
(4,35)	1:A:26:CYS:CB	1:A:80:ARG:H	3	12.39
(4,34)	1:A:26:CYS:CB	1:A:79:THR:H	17	12.39
(4,3)	1:A:26:CYS:CB	1:A:40:THR:H	3	12.39
(4,215)	1:A:86:CYS:CB	1:A:43:GLY:H	4	12.39
(4,193)	1:A:75:SER:CB	1:A:102:ARG:H	7	12.39
(4,186)	1:A:75:SER:CB	1:A:53:GLN:H	11	12.39
(4,65)	1:A:49:GLN:CB	1:A:38:PHE:H	2	12.38
(4,134)	1:A:56:PHE:CB	1:A:72:SER:H	18	12.38
(1,315)	1:A:56:PHE:CB	1:A:46:PHE:H	1	12.38
(4,62)	1:A:49:GLN:CB	1:A:35:VAL:H	14	12.37
(4,36)	1:A:26:CYS:CB	1:A:81:VAL:H	17	12.37
(4,3)	1:A:26:CYS:CB	1:A:40:THR:H	1	12.36
(4,197)	1:A:86:CYS:CB	1:A:17:HIS:H	18	12.36
(4,145)	1:A:56:PHE:CB	1:A:85:LYS:H	14	12.36
(1,317)	1:A:56:PHE:CB	1:A:70:ALA:H	1	12.36
(4,34)	1:A:26:CYS:CB	1:A:79:THR:H	4	12.35
(4,196)	1:A:86:CYS:CB	1:A:16:LYS:H	9	12.35
(4,184)	1:A:75:SER:CB	1:A:51:PHE:H	16	12.35
(1,315)	1:A:56:PHE:CB	1:A:46:PHE:H	18	12.35
(4,164)	1:A:75:SER:CB	1:A:26:CYS:H	18	12.34
(4,134)	1:A:56:PHE:CB	1:A:72:SER:H	9	12.34
(1,317)	1:A:56:PHE:CB	1:A:70:ALA:H	18	12.34
(4,65)	1:A:49:GLN:CB	1:A:38:PHE:H	11	12.32
(4,65)	1:A:49:GLN:CB	1:A:38:PHE:H	12	12.32
(4,181)	1:A:75:SER:CB	1:A:48:LEU:H	12	12.32
(4,163)	1:A:56:PHE:CB	1:A:108:SER:H	3	12.32
(4,119)	1:A:56:PHE:CB	1:A:30:ALA:H	15	12.32

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,62)	1:A:49:GLN:CB	1:A:35:VAL:H	4	12.31
(4,73)	1:A:49:GLN:CB	1:A:79:THR:H	15	12.3
(4,65)	1:A:49:GLN:CB	1:A:38:PHE:H	1	12.3
(4,54)	1:A:49:GLN:CB	1:A:24:ALA:H	14	12.3
(4,41)	1:A:26:CYS:CB	1:A:104:THR:H	12	12.3
(4,4)	1:A:26:CYS:CB	1:A:41:GLY:H	9	12.3
(4,181)	1:A:75:SER:CB	1:A:48:LEU:H	1	12.3
(4,36)	1:A:26:CYS:CB	1:A:81:VAL:H	4	12.29
(4,191)	1:A:75:SER:CB	1:A:100:LYS:H	20	12.29
(4,163)	1:A:56:PHE:CB	1:A:108:SER:H	19	12.29
(4,54)	1:A:49:GLN:CB	1:A:24:ALA:H	18	12.28
(4,32)	1:A:26:CYS:CB	1:A:76:TYR:H	14	12.28
(4,3)	1:A:26:CYS:CB	1:A:40:THR:H	7	12.28
(4,134)	1:A:56:PHE:CB	1:A:72:SER:H	6	12.28
(4,196)	1:A:86:CYS:CB	1:A:16:LYS:H	8	12.27
(4,184)	1:A:75:SER:CB	1:A:51:PHE:H	20	12.27
(4,118)	1:A:56:PHE:CB	1:A:28:SER:H	6	12.27
(4,72)	1:A:49:GLN:CB	1:A:77:GLY:H	18	12.26
(1,315)	1:A:56:PHE:CB	1:A:46:PHE:H	5	12.26
(1,315)	1:A:56:PHE:CB	1:A:46:PHE:H	11	12.26
(4,182)	1:A:75:SER:CB	1:A:49:GLN:H	9	12.25
(1,317)	1:A:56:PHE:CB	1:A:70:ALA:H	15	12.25
(1,315)	1:A:56:PHE:CB	1:A:46:PHE:H	6	12.25
(4,164)	1:A:75:SER:CB	1:A:26:CYS:H	13	12.24
(4,162)	1:A:56:PHE:CB	1:A:107:ARG:H	7	12.24
(4,134)	1:A:56:PHE:CB	1:A:72:SER:H	2	12.24
(4,134)	1:A:56:PHE:CB	1:A:72:SER:H	17	12.24
(4,36)	1:A:26:CYS:CB	1:A:81:VAL:H	2	12.23
(4,227)	1:A:86:CYS:CB	1:A:58:TYR:H	10	12.23
(4,212)	1:A:86:CYS:CB	1:A:40:THR:H	10	12.23
(4,134)	1:A:56:PHE:CB	1:A:72:SER:H	13	12.23
(4,134)	1:A:56:PHE:CB	1:A:72:SER:H	1	12.22
(4,134)	1:A:56:PHE:CB	1:A:72:SER:H	3	12.22
(4,192)	1:A:75:SER:CB	1:A:101:ASP:H	8	12.21
(4,164)	1:A:75:SER:CB	1:A:26:CYS:H	2	12.21
(4,119)	1:A:56:PHE:CB	1:A:30:ALA:H	14	12.21
(4,65)	1:A:49:GLN:CB	1:A:38:PHE:H	16	12.2
(4,159)	1:A:56:PHE:CB	1:A:104:THR:H	4	12.2
(4,65)	1:A:49:GLN:CB	1:A:38:PHE:H	19	12.19
(4,3)	1:A:26:CYS:CB	1:A:40:THR:H	20	12.19
(4,196)	1:A:86:CYS:CB	1:A:16:LYS:H	4	12.19
(4,134)	1:A:56:PHE:CB	1:A:72:SER:H	7	12.19

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,65)	1:A:49:GLN:CB	1:A:38:PHE:H	17	12.18
(4,226)	1:A:86:CYS:CB	1:A:55:LYS:H	19	12.18
(4,134)	1:A:56:PHE:CB	1:A:72:SER:H	12	12.18
(4,3)	1:A:26:CYS:CB	1:A:40:THR:H	13	12.17
(4,184)	1:A:75:SER:CB	1:A:51:PHE:H	6	12.17
(4,210)	1:A:86:CYS:CB	1:A:38:PHE:H	11	12.15
(4,134)	1:A:56:PHE:CB	1:A:72:SER:H	5	12.15
(4,226)	1:A:86:CYS:CB	1:A:55:LYS:H	14	12.14
(4,213)	1:A:86:CYS:CB	1:A:41:GLY:H	18	12.14
(4,196)	1:A:86:CYS:CB	1:A:16:LYS:H	3	12.14
(4,145)	1:A:56:PHE:CB	1:A:85:LYS:H	19	12.14
(4,14)	1:A:26:CYS:CB	1:A:53:GLN:H	16	12.14
(4,119)	1:A:56:PHE:CB	1:A:30:ALA:H	16	12.14
(4,42)	1:A:26:CYS:CB	1:A:105:ASP:H	12	12.13
(4,40)	1:A:26:CYS:CB	1:A:103:SER:H	13	12.13
(4,3)	1:A:26:CYS:CB	1:A:40:THR:H	8	12.13
(4,211)	1:A:86:CYS:CB	1:A:39:VAL:H	11	12.13
(4,12)	1:A:26:CYS:CB	1:A:51:PHE:H	9	12.13
(4,3)	1:A:26:CYS:CB	1:A:40:THR:H	5	12.12
(4,134)	1:A:56:PHE:CB	1:A:72:SER:H	11	12.12
(4,134)	1:A:56:PHE:CB	1:A:72:SER:H	14	12.12
(1,317)	1:A:56:PHE:CB	1:A:70:ALA:H	20	12.12
(4,43)	1:A:26:CYS:CB	1:A:106:GLN:H	10	12.11
(4,161)	1:A:56:PHE:CB	1:A:106:GLN:H	5	12.11
(4,134)	1:A:56:PHE:CB	1:A:72:SER:H	8	12.11
(4,12)	1:A:26:CYS:CB	1:A:51:PHE:H	4	12.11
(1,315)	1:A:56:PHE:CB	1:A:46:PHE:H	9	12.11
(4,71)	1:A:49:GLN:CB	1:A:76:TYR:H	12	12.1
(4,183)	1:A:75:SER:CB	1:A:50:MET:H	8	12.1
(4,134)	1:A:56:PHE:CB	1:A:72:SER:H	20	12.1
(4,35)	1:A:26:CYS:CB	1:A:80:ARG:H	16	12.08
(4,184)	1:A:75:SER:CB	1:A:51:PHE:H	19	12.08
(4,181)	1:A:75:SER:CB	1:A:48:LEU:H	20	12.08
(4,164)	1:A:75:SER:CB	1:A:26:CYS:H	16	12.08
(4,134)	1:A:56:PHE:CB	1:A:72:SER:H	15	12.08
(4,54)	1:A:49:GLN:CB	1:A:24:ALA:H	16	12.07
(4,63)	1:A:49:GLN:CB	1:A:36:PHE:H	15	12.06
(4,15)	1:A:26:CYS:CB	1:A:54:ARG:H	20	12.06
(4,145)	1:A:56:PHE:CB	1:A:85:LYS:H	4	12.06
(4,134)	1:A:56:PHE:CB	1:A:72:SER:H	10	12.06
(4,65)	1:A:49:GLN:CB	1:A:38:PHE:H	18	12.05
(4,145)	1:A:56:PHE:CB	1:A:85:LYS:H	16	12.05

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,134)	1:A:56:PHE:CB	1:A:72:SER:H	16	12.05
(4,72)	1:A:49:GLN:CB	1:A:77:GLY:H	2	12.04
(4,71)	1:A:49:GLN:CB	1:A:76:TYR:H	3	12.04
(4,65)	1:A:49:GLN:CB	1:A:38:PHE:H	3	12.04
(4,54)	1:A:49:GLN:CB	1:A:24:ALA:H	10	12.04
(4,35)	1:A:26:CYS:CB	1:A:80:ARG:H	2	12.04
(1,310)	1:A:49:GLN:CB	1:A:40:THR:H	17	12.03
(4,65)	1:A:49:GLN:CB	1:A:38:PHE:H	4	12.02
(4,34)	1:A:26:CYS:CB	1:A:79:THR:H	18	12.02
(4,210)	1:A:86:CYS:CB	1:A:38:PHE:H	10	12.02
(4,165)	1:A:75:SER:CB	1:A:27:GLN:H	13	12.02
(4,134)	1:A:56:PHE:CB	1:A:72:SER:H	19	12.02
(4,120)	1:A:56:PHE:CB	1:A:31:PHE:H	4	12.02
(1,310)	1:A:49:GLN:CB	1:A:40:THR:H	9	12.02
(4,3)	1:A:26:CYS:CB	1:A:40:THR:H	10	12.0
(4,119)	1:A:56:PHE:CB	1:A:30:ALA:H	19	12.0
(4,45)	1:A:26:CYS:CB	1:A:108:SER:H	15	11.99
(4,4)	1:A:26:CYS:CB	1:A:41:GLY:H	3	11.99
(4,31)	1:A:26:CYS:CB	1:A:75:SER:H	6	11.99
(1,315)	1:A:56:PHE:CB	1:A:46:PHE:H	4	11.99
(4,13)	1:A:26:CYS:CB	1:A:52:ILE:H	19	11.98
(4,213)	1:A:86:CYS:CB	1:A:41:GLY:H	13	11.97
(4,185)	1:A:75:SER:CB	1:A:52:ILE:H	10	11.97
(4,134)	1:A:56:PHE:CB	1:A:72:SER:H	4	11.97
(1,315)	1:A:56:PHE:CB	1:A:46:PHE:H	17	11.97
(4,42)	1:A:26:CYS:CB	1:A:105:ASP:H	2	11.96
(4,31)	1:A:26:CYS:CB	1:A:75:SER:H	11	11.96
(4,181)	1:A:75:SER:CB	1:A:48:LEU:H	16	11.96
(4,164)	1:A:75:SER:CB	1:A:26:CYS:H	19	11.96
(4,213)	1:A:86:CYS:CB	1:A:41:GLY:H	3	11.95
(4,36)	1:A:26:CYS:CB	1:A:81:VAL:H	18	11.94
(4,226)	1:A:86:CYS:CB	1:A:55:LYS:H	16	11.94
(4,12)	1:A:26:CYS:CB	1:A:51:PHE:H	17	11.94
(4,73)	1:A:49:GLN:CB	1:A:79:THR:H	4	11.93
(4,164)	1:A:75:SER:CB	1:A:26:CYS:H	7	11.93
(4,92)	1:A:49:GLN:CB	1:A:105:ASP:H	13	11.92
(1,310)	1:A:49:GLN:CB	1:A:40:THR:H	10	11.92
(4,63)	1:A:49:GLN:CB	1:A:36:PHE:H	6	11.91
(4,36)	1:A:26:CYS:CB	1:A:81:VAL:H	16	11.91
(4,197)	1:A:86:CYS:CB	1:A:17:HIS:H	10	11.91
(4,161)	1:A:56:PHE:CB	1:A:106:GLN:H	4	11.91
(4,35)	1:A:26:CYS:CB	1:A:80:ARG:H	4	11.9

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,35)	1:A:26:CYS:CB	1:A:80:ARG:H	19	11.9
(4,13)	1:A:26:CYS:CB	1:A:52:ILE:H	16	11.89
(4,12)	1:A:26:CYS:CB	1:A:51:PHE:H	7	11.89
(4,36)	1:A:26:CYS:CB	1:A:81:VAL:H	3	11.88
(4,35)	1:A:26:CYS:CB	1:A:80:ARG:H	9	11.88
(4,34)	1:A:26:CYS:CB	1:A:79:THR:H	3	11.88
(4,158)	1:A:56:PHE:CB	1:A:103:SER:H	4	11.88
(4,63)	1:A:49:GLN:CB	1:A:36:PHE:H	14	11.87
(4,119)	1:A:56:PHE:CB	1:A:30:ALA:H	6	11.87
(4,158)	1:A:56:PHE:CB	1:A:103:SER:H	10	11.86
(4,54)	1:A:49:GLN:CB	1:A:24:ALA:H	6	11.85
(4,44)	1:A:26:CYS:CB	1:A:107:ARG:H	6	11.85
(4,36)	1:A:26:CYS:CB	1:A:81:VAL:H	13	11.85
(4,181)	1:A:75:SER:CB	1:A:48:LEU:H	6	11.85
(1,310)	1:A:49:GLN:CB	1:A:40:THR:H	8	11.85
(4,65)	1:A:49:GLN:CB	1:A:38:PHE:H	6	11.83
(4,65)	1:A:49:GLN:CB	1:A:38:PHE:H	14	11.83
(4,34)	1:A:26:CYS:CB	1:A:79:THR:H	2	11.82
(1,310)	1:A:49:GLN:CB	1:A:40:THR:H	20	11.82
(4,65)	1:A:49:GLN:CB	1:A:38:PHE:H	9	11.81
(4,54)	1:A:49:GLN:CB	1:A:24:ALA:H	4	11.81
(4,4)	1:A:26:CYS:CB	1:A:41:GLY:H	17	11.81
(4,197)	1:A:86:CYS:CB	1:A:17:HIS:H	9	11.81
(4,15)	1:A:26:CYS:CB	1:A:54:ARG:H	5	11.81
(1,310)	1:A:49:GLN:CB	1:A:40:THR:H	13	11.81
(4,36)	1:A:26:CYS:CB	1:A:81:VAL:H	19	11.8
(4,197)	1:A:86:CYS:CB	1:A:17:HIS:H	5	11.8
(1,310)	1:A:49:GLN:CB	1:A:40:THR:H	3	11.8
(4,33)	1:A:26:CYS:CB	1:A:77:GLY:H	6	11.79
(4,194)	1:A:75:SER:CB	1:A:103:SER:H	17	11.79
(4,165)	1:A:75:SER:CB	1:A:27:GLN:H	7	11.79
(4,213)	1:A:86:CYS:CB	1:A:41:GLY:H	12	11.78
(1,310)	1:A:49:GLN:CB	1:A:40:THR:H	7	11.77
(4,32)	1:A:26:CYS:CB	1:A:76:TYR:H	6	11.76
(4,181)	1:A:75:SER:CB	1:A:48:LEU:H	13	11.76
(1,310)	1:A:49:GLN:CB	1:A:40:THR:H	2	11.76
(4,71)	1:A:49:GLN:CB	1:A:76:TYR:H	1	11.75
(4,193)	1:A:75:SER:CB	1:A:102:ARG:H	4	11.75
(4,181)	1:A:75:SER:CB	1:A:48:LEU:H	19	11.75
(4,13)	1:A:26:CYS:CB	1:A:52:ILE:H	5	11.75
(4,13)	1:A:26:CYS:CB	1:A:52:ILE:H	20	11.75
(4,36)	1:A:26:CYS:CB	1:A:81:VAL:H	7	11.73

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,182)	1:A:75:SER:CB	1:A:49:GLN:H	6	11.73
(4,121)	1:A:56:PHE:CB	1:A:32:MET:H	15	11.73
(4,119)	1:A:56:PHE:CB	1:A:30:ALA:H	5	11.73
(4,213)	1:A:86:CYS:CB	1:A:41:GLY:H	17	11.72
(4,213)	1:A:86:CYS:CB	1:A:41:GLY:H	7	11.71
(4,182)	1:A:75:SER:CB	1:A:49:GLN:H	16	11.7
(4,165)	1:A:75:SER:CB	1:A:27:GLN:H	11	11.7
(4,164)	1:A:75:SER:CB	1:A:26:CYS:H	12	11.7
(1,310)	1:A:49:GLN:CB	1:A:40:THR:H	11	11.7
(1,310)	1:A:49:GLN:CB	1:A:40:THR:H	4	11.69
(4,165)	1:A:75:SER:CB	1:A:27:GLN:H	2	11.68
(4,165)	1:A:75:SER:CB	1:A:27:GLN:H	12	11.68
(4,35)	1:A:26:CYS:CB	1:A:80:ARG:H	13	11.67
(4,182)	1:A:75:SER:CB	1:A:49:GLN:H	3	11.67
(4,178)	1:A:75:SER:CB	1:A:44:MET:H	5	11.67
(1,310)	1:A:49:GLN:CB	1:A:40:THR:H	12	11.67
(1,310)	1:A:49:GLN:CB	1:A:40:THR:H	19	11.67
(4,4)	1:A:26:CYS:CB	1:A:41:GLY:H	2	11.66
(4,34)	1:A:26:CYS:CB	1:A:79:THR:H	16	11.66
(1,310)	1:A:49:GLN:CB	1:A:40:THR:H	16	11.66
(4,4)	1:A:26:CYS:CB	1:A:41:GLY:H	14	11.65
(4,4)	1:A:26:CYS:CB	1:A:41:GLY:H	18	11.65
(4,4)	1:A:26:CYS:CB	1:A:41:GLY:H	19	11.65
(4,165)	1:A:75:SER:CB	1:A:27:GLN:H	4	11.65
(4,14)	1:A:26:CYS:CB	1:A:53:GLN:H	20	11.65
(4,120)	1:A:56:PHE:CB	1:A:31:PHE:H	5	11.65
(4,4)	1:A:26:CYS:CB	1:A:41:GLY:H	16	11.64
(4,31)	1:A:26:CYS:CB	1:A:75:SER:H	10	11.64
(4,196)	1:A:86:CYS:CB	1:A:16:LYS:H	17	11.64
(1,315)	1:A:56:PHE:CB	1:A:46:PHE:H	7	11.63
(4,34)	1:A:26:CYS:CB	1:A:79:THR:H	19	11.62
(4,2)	1:A:26:CYS:CB	1:A:39:VAL:H	18	11.62
(4,195)	1:A:86:CYS:CB	1:A:15:ALA:H	5	11.62
(4,186)	1:A:75:SER:CB	1:A:53:GLN:H	4	11.62
(4,164)	1:A:75:SER:CB	1:A:26:CYS:H	11	11.62
(1,310)	1:A:49:GLN:CB	1:A:40:THR:H	5	11.62
(4,4)	1:A:26:CYS:CB	1:A:41:GLY:H	6	11.6
(4,35)	1:A:26:CYS:CB	1:A:80:ARG:H	7	11.59
(4,34)	1:A:26:CYS:CB	1:A:79:THR:H	13	11.59
(4,226)	1:A:86:CYS:CB	1:A:55:LYS:H	4	11.59
(4,2)	1:A:26:CYS:CB	1:A:39:VAL:H	19	11.59
(1,310)	1:A:49:GLN:CB	1:A:40:THR:H	18	11.59

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,41)	1:A:26:CYS:CB	1:A:104:THR:H	10	11.58
(4,184)	1:A:75:SER:CB	1:A:51:PHE:H	14	11.58
(4,120)	1:A:56:PHE:CB	1:A:31:PHE:H	18	11.58
(4,162)	1:A:56:PHE:CB	1:A:107:ARG:H	18	11.57
(4,40)	1:A:26:CYS:CB	1:A:103:SER:H	12	11.56
(4,191)	1:A:75:SER:CB	1:A:100:LYS:H	16	11.56
(4,182)	1:A:75:SER:CB	1:A:49:GLN:H	19	11.56
(4,63)	1:A:49:GLN:CB	1:A:36:PHE:H	20	11.55
(4,4)	1:A:26:CYS:CB	1:A:41:GLY:H	12	11.55
(4,187)	1:A:75:SER:CB	1:A:54:ARG:H	10	11.55
(4,162)	1:A:56:PHE:CB	1:A:107:ARG:H	12	11.55
(4,161)	1:A:56:PHE:CB	1:A:106:GLN:H	18	11.55
(4,14)	1:A:26:CYS:CB	1:A:53:GLN:H	5	11.55
(1,316)	1:A:56:PHE:CB	1:A:47:GLY:H	20	11.55
(1,310)	1:A:49:GLN:CB	1:A:40:THR:H	1	11.55
(4,63)	1:A:49:GLN:CB	1:A:36:PHE:H	9	11.54
(4,45)	1:A:26:CYS:CB	1:A:108:SER:H	6	11.53
(4,4)	1:A:26:CYS:CB	1:A:41:GLY:H	7	11.53
(4,4)	1:A:26:CYS:CB	1:A:41:GLY:H	8	11.53
(4,34)	1:A:26:CYS:CB	1:A:79:THR:H	9	11.53
(4,182)	1:A:75:SER:CB	1:A:49:GLN:H	20	11.53
(4,55)	1:A:49:GLN:CB	1:A:26:CYS:H	9	11.52
(4,213)	1:A:86:CYS:CB	1:A:41:GLY:H	2	11.52
(4,2)	1:A:26:CYS:CB	1:A:39:VAL:H	16	11.52
(4,2)	1:A:26:CYS:CB	1:A:39:VAL:H	12	11.51
(1,316)	1:A:56:PHE:CB	1:A:47:GLY:H	3	11.51
(1,315)	1:A:56:PHE:CB	1:A:46:PHE:H	2	11.51
(4,182)	1:A:75:SER:CB	1:A:49:GLN:H	12	11.5
(1,316)	1:A:56:PHE:CB	1:A:47:GLY:H	12	11.5
(4,184)	1:A:75:SER:CB	1:A:51:PHE:H	15	11.49
(4,2)	1:A:26:CYS:CB	1:A:39:VAL:H	15	11.48
(4,184)	1:A:75:SER:CB	1:A:51:PHE:H	4	11.48
(4,4)	1:A:26:CYS:CB	1:A:41:GLY:H	11	11.47
(4,34)	1:A:26:CYS:CB	1:A:79:THR:H	7	11.47
(4,164)	1:A:75:SER:CB	1:A:26:CYS:H	1	11.47
(1,315)	1:A:56:PHE:CB	1:A:46:PHE:H	13	11.47
(4,15)	1:A:26:CYS:CB	1:A:54:ARG:H	15	11.46
(1,303)	1:A:26:CYS:CB	1:A:37:THR:H	19	11.46
(4,213)	1:A:86:CYS:CB	1:A:41:GLY:H	16	11.45
(1,316)	1:A:56:PHE:CB	1:A:47:GLY:H	15	11.45
(4,182)	1:A:75:SER:CB	1:A:49:GLN:H	1	11.44
(4,133)	1:A:56:PHE:CB	1:A:71:GLY:H	10	11.44

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,316)	1:A:56:PHE:CB	1:A:47:GLY:H	1	11.44
(4,2)	1:A:26:CYS:CB	1:A:39:VAL:H	8	11.43
(4,192)	1:A:75:SER:CB	1:A:101:ASP:H	13	11.43
(4,183)	1:A:75:SER:CB	1:A:50:MET:H	17	11.43
(4,72)	1:A:49:GLN:CB	1:A:77:GLY:H	4	11.42
(4,165)	1:A:75:SER:CB	1:A:27:GLN:H	1	11.42
(1,303)	1:A:26:CYS:CB	1:A:37:THR:H	9	11.42
(4,71)	1:A:49:GLN:CB	1:A:76:TYR:H	18	11.41
(4,63)	1:A:49:GLN:CB	1:A:36:PHE:H	17	11.41
(4,55)	1:A:49:GLN:CB	1:A:26:CYS:H	17	11.41
(4,4)	1:A:26:CYS:CB	1:A:41:GLY:H	13	11.41
(4,35)	1:A:26:CYS:CB	1:A:80:ARG:H	1	11.41
(4,2)	1:A:26:CYS:CB	1:A:39:VAL:H	1	11.41
(4,2)	1:A:26:CYS:CB	1:A:39:VAL:H	6	11.41
(4,165)	1:A:75:SER:CB	1:A:27:GLN:H	17	11.41
(4,192)	1:A:75:SER:CB	1:A:101:ASP:H	10	11.4
(4,2)	1:A:26:CYS:CB	1:A:39:VAL:H	9	11.39
(4,183)	1:A:75:SER:CB	1:A:50:MET:H	13	11.39
(4,164)	1:A:75:SER:CB	1:A:26:CYS:H	14	11.39
(4,41)	1:A:26:CYS:CB	1:A:104:THR:H	8	11.38
(4,2)	1:A:26:CYS:CB	1:A:39:VAL:H	5	11.38
(4,183)	1:A:75:SER:CB	1:A:50:MET:H	5	11.38
(4,181)	1:A:75:SER:CB	1:A:48:LEU:H	18	11.38
(4,195)	1:A:86:CYS:CB	1:A:15:ALA:H	16	11.37
(4,2)	1:A:26:CYS:CB	1:A:39:VAL:H	2	11.36
(4,2)	1:A:26:CYS:CB	1:A:39:VAL:H	14	11.36
(4,197)	1:A:86:CYS:CB	1:A:17:HIS:H	3	11.36
(4,131)	1:A:56:PHE:CB	1:A:43:GLY:H	16	11.36
(1,316)	1:A:56:PHE:CB	1:A:47:GLY:H	14	11.36
(4,4)	1:A:26:CYS:CB	1:A:41:GLY:H	15	11.35
(4,30)	1:A:26:CYS:CB	1:A:74:VAL:H	20	11.35
(4,197)	1:A:86:CYS:CB	1:A:17:HIS:H	19	11.35
(4,2)	1:A:26:CYS:CB	1:A:39:VAL:H	20	11.34
(1,315)	1:A:56:PHE:CB	1:A:46:PHE:H	10	11.34
(4,213)	1:A:86:CYS:CB	1:A:41:GLY:H	1	11.33
(4,2)	1:A:26:CYS:CB	1:A:39:VAL:H	11	11.33
(4,197)	1:A:86:CYS:CB	1:A:17:HIS:H	4	11.33
(4,165)	1:A:75:SER:CB	1:A:27:GLN:H	8	11.33
(4,12)	1:A:26:CYS:CB	1:A:51:PHE:H	3	11.33
(1,316)	1:A:56:PHE:CB	1:A:47:GLY:H	18	11.33
(1,303)	1:A:26:CYS:CB	1:A:37:THR:H	4	11.33
(4,36)	1:A:26:CYS:CB	1:A:81:VAL:H	9	11.32

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,2)	1:A:26:CYS:CB	1:A:39:VAL:H	7	11.32
(4,184)	1:A:75:SER:CB	1:A:51:PHE:H	11	11.32
(4,181)	1:A:75:SER:CB	1:A:48:LEU:H	7	11.32
(1,316)	1:A:56:PHE:CB	1:A:47:GLY:H	16	11.32
(1,303)	1:A:26:CYS:CB	1:A:37:THR:H	18	11.32
(4,158)	1:A:56:PHE:CB	1:A:103:SER:H	13	11.31
(4,121)	1:A:56:PHE:CB	1:A:32:MET:H	20	11.31
(4,94)	1:A:49:GLN:CB	1:A:107:ARG:H	8	11.3
(4,4)	1:A:26:CYS:CB	1:A:41:GLY:H	10	11.3
(4,183)	1:A:75:SER:CB	1:A:50:MET:H	9	11.3
(4,2)	1:A:26:CYS:CB	1:A:39:VAL:H	13	11.29
(4,197)	1:A:86:CYS:CB	1:A:17:HIS:H	8	11.29
(4,131)	1:A:56:PHE:CB	1:A:43:GLY:H	11	11.29
(1,316)	1:A:56:PHE:CB	1:A:47:GLY:H	6	11.29
(4,131)	1:A:56:PHE:CB	1:A:43:GLY:H	18	11.28
(4,213)	1:A:86:CYS:CB	1:A:41:GLY:H	6	11.27
(4,2)	1:A:26:CYS:CB	1:A:39:VAL:H	4	11.27
(1,316)	1:A:56:PHE:CB	1:A:47:GLY:H	5	11.27
(4,4)	1:A:26:CYS:CB	1:A:41:GLY:H	1	11.26
(4,131)	1:A:56:PHE:CB	1:A:43:GLY:H	19	11.26
(1,316)	1:A:56:PHE:CB	1:A:47:GLY:H	11	11.26
(1,316)	1:A:56:PHE:CB	1:A:47:GLY:H	19	11.26
(1,303)	1:A:26:CYS:CB	1:A:37:THR:H	6	11.26
(4,186)	1:A:75:SER:CB	1:A:53:GLN:H	10	11.25
(4,133)	1:A:56:PHE:CB	1:A:71:GLY:H	11	11.25
(4,2)	1:A:26:CYS:CB	1:A:39:VAL:H	10	11.24
(4,2)	1:A:26:CYS:CB	1:A:39:VAL:H	17	11.24
(4,196)	1:A:86:CYS:CB	1:A:16:LYS:H	6	11.24
(4,131)	1:A:56:PHE:CB	1:A:43:GLY:H	14	11.24
(4,120)	1:A:56:PHE:CB	1:A:31:PHE:H	16	11.24
(1,303)	1:A:26:CYS:CB	1:A:37:THR:H	16	11.24
(4,4)	1:A:26:CYS:CB	1:A:41:GLY:H	5	11.22
(4,213)	1:A:86:CYS:CB	1:A:41:GLY:H	19	11.22
(1,316)	1:A:56:PHE:CB	1:A:47:GLY:H	9	11.22
(4,41)	1:A:26:CYS:CB	1:A:104:THR:H	2	11.2
(4,131)	1:A:56:PHE:CB	1:A:43:GLY:H	15	11.2
(4,181)	1:A:75:SER:CB	1:A:48:LEU:H	8	11.19
(4,12)	1:A:26:CYS:CB	1:A:51:PHE:H	11	11.17
(4,36)	1:A:26:CYS:CB	1:A:81:VAL:H	1	11.16
(4,180)	1:A:75:SER:CB	1:A:47:GLY:H	5	11.16
(4,14)	1:A:26:CYS:CB	1:A:53:GLN:H	15	11.16
(4,131)	1:A:56:PHE:CB	1:A:43:GLY:H	12	11.16

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,131)	1:A:56:PHE:CB	1:A:43:GLY:H	20	11.16
(4,13)	1:A:26:CYS:CB	1:A:52:ILE:H	15	11.16
(1,303)	1:A:26:CYS:CB	1:A:37:THR:H	3	11.15
(4,133)	1:A:56:PHE:CB	1:A:71:GLY:H	15	11.14
(4,4)	1:A:26:CYS:CB	1:A:41:GLY:H	20	11.13
(4,160)	1:A:56:PHE:CB	1:A:105:ASP:H	5	11.13
(4,120)	1:A:56:PHE:CB	1:A:31:PHE:H	17	11.13
(4,4)	1:A:26:CYS:CB	1:A:41:GLY:H	4	11.12
(4,191)	1:A:75:SER:CB	1:A:100:LYS:H	13	11.12
(4,162)	1:A:56:PHE:CB	1:A:107:ARG:H	9	11.12
(4,131)	1:A:56:PHE:CB	1:A:43:GLY:H	1	11.12
(1,303)	1:A:26:CYS:CB	1:A:37:THR:H	2	11.12
(1,303)	1:A:26:CYS:CB	1:A:37:THR:H	14	11.12
(1,303)	1:A:26:CYS:CB	1:A:37:THR:H	12	11.11
(4,63)	1:A:49:GLN:CB	1:A:36:PHE:H	3	11.1
(4,36)	1:A:26:CYS:CB	1:A:81:VAL:H	12	11.1
(4,120)	1:A:56:PHE:CB	1:A:31:PHE:H	3	11.1
(4,63)	1:A:49:GLN:CB	1:A:36:PHE:H	5	11.09
(4,178)	1:A:75:SER:CB	1:A:44:MET:H	16	11.09
(1,303)	1:A:26:CYS:CB	1:A:37:THR:H	11	11.09
(4,195)	1:A:86:CYS:CB	1:A:15:ALA:H	19	11.06
(4,181)	1:A:75:SER:CB	1:A:48:LEU:H	2	11.06
(4,164)	1:A:75:SER:CB	1:A:26:CYS:H	6	11.06
(4,131)	1:A:56:PHE:CB	1:A:43:GLY:H	3	11.06
(4,35)	1:A:26:CYS:CB	1:A:80:ARG:H	12	11.05
(4,182)	1:A:75:SER:CB	1:A:49:GLN:H	14	11.05
(4,182)	1:A:75:SER:CB	1:A:49:GLN:H	18	11.05
(4,181)	1:A:75:SER:CB	1:A:48:LEU:H	14	11.05
(4,2)	1:A:26:CYS:CB	1:A:39:VAL:H	3	11.04
(4,197)	1:A:86:CYS:CB	1:A:17:HIS:H	17	11.04
(4,165)	1:A:75:SER:CB	1:A:27:GLN:H	16	11.04
(4,133)	1:A:56:PHE:CB	1:A:71:GLY:H	20	11.04
(1,316)	1:A:56:PHE:CB	1:A:47:GLY:H	4	11.04
(4,178)	1:A:75:SER:CB	1:A:44:MET:H	9	11.03
(4,71)	1:A:49:GLN:CB	1:A:76:TYR:H	8	11.02
(4,163)	1:A:56:PHE:CB	1:A:108:SER:H	9	11.02
(1,315)	1:A:56:PHE:CB	1:A:46:PHE:H	8	11.02
(4,164)	1:A:75:SER:CB	1:A:26:CYS:H	8	11.01
(1,316)	1:A:56:PHE:CB	1:A:47:GLY:H	17	11.01
(4,32)	1:A:26:CYS:CB	1:A:76:TYR:H	11	11.0
(4,195)	1:A:86:CYS:CB	1:A:15:ALA:H	9	11.0
(1,303)	1:A:26:CYS:CB	1:A:37:THR:H	1	10.99

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,303)	1:A:26:CYS:CB	1:A:37:THR:H	15	10.99
(1,303)	1:A:26:CYS:CB	1:A:37:THR:H	17	10.99
(4,12)	1:A:26:CYS:CB	1:A:51:PHE:H	10	10.95
(4,63)	1:A:49:GLN:CB	1:A:36:PHE:H	4	10.94
(4,63)	1:A:49:GLN:CB	1:A:36:PHE:H	12	10.94
(4,165)	1:A:75:SER:CB	1:A:27:GLN:H	18	10.94
(4,71)	1:A:49:GLN:CB	1:A:76:TYR:H	13	10.93
(4,11)	1:A:26:CYS:CB	1:A:50:MET:H	8	10.93
(4,63)	1:A:49:GLN:CB	1:A:36:PHE:H	10	10.92
(4,120)	1:A:56:PHE:CB	1:A:31:PHE:H	9	10.92
(4,63)	1:A:49:GLN:CB	1:A:36:PHE:H	1	10.91
(4,180)	1:A:75:SER:CB	1:A:47:GLY:H	8	10.91
(4,178)	1:A:75:SER:CB	1:A:44:MET:H	12	10.91
(4,63)	1:A:49:GLN:CB	1:A:36:PHE:H	11	10.9
(4,63)	1:A:49:GLN:CB	1:A:36:PHE:H	13	10.9
(4,212)	1:A:86:CYS:CB	1:A:40:THR:H	9	10.9
(4,131)	1:A:56:PHE:CB	1:A:43:GLY:H	4	10.9
(4,178)	1:A:75:SER:CB	1:A:44:MET:H	17	10.89
(4,63)	1:A:49:GLN:CB	1:A:36:PHE:H	2	10.88
(4,95)	1:A:49:GLN:CB	1:A:108:SER:H	10	10.87
(4,55)	1:A:49:GLN:CB	1:A:26:CYS:H	14	10.86
(4,165)	1:A:75:SER:CB	1:A:27:GLN:H	3	10.86
(4,165)	1:A:75:SER:CB	1:A:27:GLN:H	19	10.85
(4,159)	1:A:56:PHE:CB	1:A:104:THR:H	10	10.85
(1,303)	1:A:26:CYS:CB	1:A:37:THR:H	7	10.85
(4,181)	1:A:75:SER:CB	1:A:48:LEU:H	11	10.84
(4,34)	1:A:26:CYS:CB	1:A:79:THR:H	1	10.83
(4,30)	1:A:26:CYS:CB	1:A:74:VAL:H	15	10.83
(1,303)	1:A:26:CYS:CB	1:A:37:THR:H	13	10.83
(4,63)	1:A:49:GLN:CB	1:A:36:PHE:H	19	10.82
(4,63)	1:A:49:GLN:CB	1:A:36:PHE:H	18	10.81
(4,183)	1:A:75:SER:CB	1:A:50:MET:H	7	10.81
(4,131)	1:A:56:PHE:CB	1:A:43:GLY:H	5	10.81
(4,63)	1:A:49:GLN:CB	1:A:36:PHE:H	7	10.8
(4,63)	1:A:49:GLN:CB	1:A:36:PHE:H	8	10.8
(4,133)	1:A:56:PHE:CB	1:A:71:GLY:H	9	10.8
(4,133)	1:A:56:PHE:CB	1:A:71:GLY:H	18	10.79
(1,316)	1:A:56:PHE:CB	1:A:47:GLY:H	2	10.79
(4,133)	1:A:56:PHE:CB	1:A:71:GLY:H	13	10.78
(4,192)	1:A:75:SER:CB	1:A:101:ASP:H	4	10.77
(4,183)	1:A:75:SER:CB	1:A:50:MET:H	2	10.77
(4,133)	1:A:56:PHE:CB	1:A:71:GLY:H	6	10.77

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,120)	1:A:56:PHE:CB	1:A:31:PHE:H	19	10.77
(4,178)	1:A:75:SER:CB	1:A:44:MET:H	7	10.76
(4,165)	1:A:75:SER:CB	1:A:27:GLN:H	10	10.76
(1,316)	1:A:56:PHE:CB	1:A:47:GLY:H	13	10.76
(1,303)	1:A:26:CYS:CB	1:A:37:THR:H	5	10.76
(1,303)	1:A:26:CYS:CB	1:A:37:THR:H	10	10.76
(4,196)	1:A:86:CYS:CB	1:A:16:LYS:H	2	10.75
(1,303)	1:A:26:CYS:CB	1:A:37:THR:H	8	10.75
(4,95)	1:A:49:GLN:CB	1:A:108:SER:H	13	10.74
(4,183)	1:A:75:SER:CB	1:A:50:MET:H	1	10.74
(4,133)	1:A:56:PHE:CB	1:A:71:GLY:H	17	10.74
(4,131)	1:A:56:PHE:CB	1:A:43:GLY:H	6	10.74
(4,63)	1:A:49:GLN:CB	1:A:36:PHE:H	16	10.73
(4,32)	1:A:26:CYS:CB	1:A:76:TYR:H	20	10.73
(4,133)	1:A:56:PHE:CB	1:A:71:GLY:H	7	10.73
(4,165)	1:A:75:SER:CB	1:A:27:GLN:H	9	10.72
(4,121)	1:A:56:PHE:CB	1:A:32:MET:H	11	10.72
(4,10)	1:A:26:CYS:CB	1:A:49:GLN:H	9	10.72
(4,71)	1:A:49:GLN:CB	1:A:76:TYR:H	7	10.71
(4,241)	1:A:86:CYS:CB	1:A:103:SER:H	9	10.71
(4,44)	1:A:26:CYS:CB	1:A:107:ARG:H	10	10.7
(4,182)	1:A:75:SER:CB	1:A:49:GLN:H	11	10.7
(4,133)	1:A:56:PHE:CB	1:A:71:GLY:H	2	10.7
(4,133)	1:A:56:PHE:CB	1:A:71:GLY:H	12	10.7
(4,131)	1:A:56:PHE:CB	1:A:43:GLY:H	9	10.7
(4,12)	1:A:26:CYS:CB	1:A:51:PHE:H	12	10.7
(4,133)	1:A:56:PHE:CB	1:A:71:GLY:H	3	10.69
(1,316)	1:A:56:PHE:CB	1:A:47:GLY:H	7	10.69
(4,195)	1:A:86:CYS:CB	1:A:15:ALA:H	3	10.68
(4,178)	1:A:75:SER:CB	1:A:44:MET:H	19	10.68
(4,131)	1:A:56:PHE:CB	1:A:43:GLY:H	7	10.68
(4,178)	1:A:75:SER:CB	1:A:44:MET:H	3	10.66
(1,303)	1:A:26:CYS:CB	1:A:37:THR:H	20	10.66
(4,212)	1:A:86:CYS:CB	1:A:40:THR:H	18	10.65
(4,178)	1:A:75:SER:CB	1:A:44:MET:H	1	10.64
(4,162)	1:A:56:PHE:CB	1:A:107:ARG:H	5	10.64
(4,35)	1:A:26:CYS:CB	1:A:80:ARG:H	5	10.63
(4,195)	1:A:86:CYS:CB	1:A:15:ALA:H	4	10.63
(4,165)	1:A:75:SER:CB	1:A:27:GLN:H	5	10.63
(4,181)	1:A:75:SER:CB	1:A:48:LEU:H	15	10.62
(4,131)	1:A:56:PHE:CB	1:A:43:GLY:H	2	10.62
(4,183)	1:A:75:SER:CB	1:A:50:MET:H	3	10.61

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,180)	1:A:75:SER:CB	1:A:47:GLY:H	9	10.61
(1,316)	1:A:56:PHE:CB	1:A:47:GLY:H	10	10.61
(4,183)	1:A:75:SER:CB	1:A:50:MET:H	12	10.6
(4,178)	1:A:75:SER:CB	1:A:44:MET:H	13	10.6
(4,133)	1:A:56:PHE:CB	1:A:71:GLY:H	5	10.6
(4,34)	1:A:26:CYS:CB	1:A:79:THR:H	12	10.59
(4,133)	1:A:56:PHE:CB	1:A:71:GLY:H	1	10.59
(4,133)	1:A:56:PHE:CB	1:A:71:GLY:H	8	10.59
(4,55)	1:A:49:GLN:CB	1:A:26:CYS:H	6	10.58
(4,165)	1:A:75:SER:CB	1:A:27:GLN:H	20	10.58
(4,45)	1:A:26:CYS:CB	1:A:108:SER:H	16	10.57
(4,12)	1:A:26:CYS:CB	1:A:51:PHE:H	1	10.56
(4,212)	1:A:86:CYS:CB	1:A:40:THR:H	6	10.55
(4,183)	1:A:75:SER:CB	1:A:50:MET:H	16	10.55
(4,161)	1:A:56:PHE:CB	1:A:106:GLN:H	1	10.55
(4,55)	1:A:49:GLN:CB	1:A:26:CYS:H	3	10.54
(4,194)	1:A:75:SER:CB	1:A:103:SER:H	8	10.53
(4,131)	1:A:56:PHE:CB	1:A:43:GLY:H	13	10.53
(4,180)	1:A:75:SER:CB	1:A:47:GLY:H	17	10.49
(4,121)	1:A:56:PHE:CB	1:A:32:MET:H	2	10.49
(4,11)	1:A:26:CYS:CB	1:A:50:MET:H	13	10.49
(4,133)	1:A:56:PHE:CB	1:A:71:GLY:H	16	10.48
(4,133)	1:A:56:PHE:CB	1:A:71:GLY:H	19	10.48
(4,33)	1:A:26:CYS:CB	1:A:77:GLY:H	20	10.47
(4,241)	1:A:86:CYS:CB	1:A:103:SER:H	12	10.47
(4,163)	1:A:56:PHE:CB	1:A:108:SER:H	17	10.47
(4,131)	1:A:56:PHE:CB	1:A:43:GLY:H	10	10.47
(4,36)	1:A:26:CYS:CB	1:A:81:VAL:H	5	10.46
(4,159)	1:A:56:PHE:CB	1:A:104:THR:H	11	10.46
(4,133)	1:A:56:PHE:CB	1:A:71:GLY:H	14	10.46
(4,191)	1:A:75:SER:CB	1:A:100:LYS:H	11	10.45
(4,180)	1:A:75:SER:CB	1:A:47:GLY:H	13	10.45
(4,133)	1:A:56:PHE:CB	1:A:71:GLY:H	4	10.45
(4,212)	1:A:86:CYS:CB	1:A:40:THR:H	15	10.44
(4,55)	1:A:49:GLN:CB	1:A:26:CYS:H	4	10.43
(4,131)	1:A:56:PHE:CB	1:A:43:GLY:H	17	10.43
(1,316)	1:A:56:PHE:CB	1:A:47:GLY:H	8	10.42
(4,72)	1:A:49:GLN:CB	1:A:77:GLY:H	10	10.41
(1,332)	1:A:86:CYS:CB	1:A:19:GLY:H	4	10.41
(1,332)	1:A:86:CYS:CB	1:A:19:GLY:H	8	10.41
(1,332)	1:A:86:CYS:CB	1:A:19:GLY:H	17	10.41
(1,332)	1:A:86:CYS:CB	1:A:19:GLY:H	19	10.41

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,212)	1:A:86:CYS:CB	1:A:40:THR:H	8	10.4
(1,334)	1:A:86:CYS:CB	1:A:21:GLY:H	14	10.4
(1,333)	1:A:86:CYS:CB	1:A:20:LEU:H	11	10.4
(1,333)	1:A:86:CYS:CB	1:A:20:LEU:H	13	10.4
(1,333)	1:A:86:CYS:CB	1:A:20:LEU:H	20	10.4
(1,332)	1:A:86:CYS:CB	1:A:19:GLY:H	3	10.4
(1,332)	1:A:86:CYS:CB	1:A:19:GLY:H	7	10.4
(1,332)	1:A:86:CYS:CB	1:A:19:GLY:H	9	10.4
(1,332)	1:A:86:CYS:CB	1:A:19:GLY:H	10	10.4
(1,332)	1:A:86:CYS:CB	1:A:19:GLY:H	16	10.4
(1,332)	1:A:86:CYS:CB	1:A:19:GLY:H	18	10.4
(1,333)	1:A:86:CYS:CB	1:A:20:LEU:H	12	10.39
(4,10)	1:A:26:CYS:CB	1:A:49:GLN:H	17	10.38
(1,333)	1:A:86:CYS:CB	1:A:20:LEU:H	1	10.38
(4,71)	1:A:49:GLN:CB	1:A:76:TYR:H	2	10.37
(4,212)	1:A:86:CYS:CB	1:A:40:THR:H	5	10.37
(4,183)	1:A:75:SER:CB	1:A:50:MET:H	6	10.37
(4,11)	1:A:26:CYS:CB	1:A:50:MET:H	2	10.37
(4,11)	1:A:26:CYS:CB	1:A:50:MET:H	9	10.37
(4,212)	1:A:86:CYS:CB	1:A:40:THR:H	20	10.36
(1,332)	1:A:86:CYS:CB	1:A:19:GLY:H	5	10.36
(4,162)	1:A:56:PHE:CB	1:A:107:ARG:H	17	10.35
(1,333)	1:A:86:CYS:CB	1:A:20:LEU:H	17	10.35
(4,164)	1:A:75:SER:CB	1:A:26:CYS:H	5	10.34
(4,121)	1:A:56:PHE:CB	1:A:32:MET:H	8	10.33
(4,131)	1:A:56:PHE:CB	1:A:43:GLY:H	8	10.32
(4,121)	1:A:56:PHE:CB	1:A:32:MET:H	7	10.32
(1,333)	1:A:86:CYS:CB	1:A:20:LEU:H	2	10.32
(1,332)	1:A:86:CYS:CB	1:A:19:GLY:H	13	10.32
(4,44)	1:A:26:CYS:CB	1:A:107:ARG:H	19	10.31
(4,183)	1:A:75:SER:CB	1:A:50:MET:H	18	10.31
(4,183)	1:A:75:SER:CB	1:A:50:MET:H	19	10.31
(1,308)	1:A:26:CYS:CB	1:A:95:THR:H	15	10.31
(1,308)	1:A:26:CYS:CB	1:A:95:THR:H	20	10.3
(1,307)	1:A:26:CYS:CB	1:A:94:GLU:H	11	10.3
(4,55)	1:A:49:GLN:CB	1:A:26:CYS:H	11	10.29
(4,44)	1:A:26:CYS:CB	1:A:107:ARG:H	2	10.29
(4,164)	1:A:75:SER:CB	1:A:26:CYS:H	10	10.29
(1,333)	1:A:86:CYS:CB	1:A:20:LEU:H	7	10.29
(1,308)	1:A:26:CYS:CB	1:A:95:THR:H	10	10.29
(1,332)	1:A:86:CYS:CB	1:A:19:GLY:H	1	10.28
(1,308)	1:A:26:CYS:CB	1:A:95:THR:H	11	10.28

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,308)	1:A:26:CYS:CB	1:A:95:THR:H	18	10.28
(4,11)	1:A:26:CYS:CB	1:A:50:MET:H	17	10.27
(4,182)	1:A:75:SER:CB	1:A:49:GLN:H	13	10.26
(4,180)	1:A:75:SER:CB	1:A:47:GLY:H	7	10.26
(1,334)	1:A:86:CYS:CB	1:A:21:GLY:H	17	10.25
(1,332)	1:A:86:CYS:CB	1:A:19:GLY:H	2	10.24
(4,182)	1:A:75:SER:CB	1:A:49:GLN:H	15	10.22
(4,121)	1:A:56:PHE:CB	1:A:32:MET:H	12	10.22
(1,332)	1:A:86:CYS:CB	1:A:19:GLY:H	12	10.22
(4,55)	1:A:49:GLN:CB	1:A:26:CYS:H	18	10.21
(1,333)	1:A:86:CYS:CB	1:A:20:LEU:H	8	10.21
(1,305)	1:A:26:CYS:CB	1:A:91:LEU:H	18	10.2
(4,121)	1:A:56:PHE:CB	1:A:32:MET:H	13	10.19
(4,214)	1:A:86:CYS:CB	1:A:42:THR:H	4	10.18
(4,167)	1:A:75:SER:CB	1:A:30:ALA:H	4	10.16
(1,308)	1:A:26:CYS:CB	1:A:95:THR:H	2	10.15
(4,180)	1:A:75:SER:CB	1:A:47:GLY:H	1	10.14
(4,178)	1:A:75:SER:CB	1:A:44:MET:H	8	10.14
(4,11)	1:A:26:CYS:CB	1:A:50:MET:H	4	10.14
(4,195)	1:A:86:CYS:CB	1:A:15:ALA:H	17	10.13
(4,183)	1:A:75:SER:CB	1:A:50:MET:H	20	10.13
(1,333)	1:A:86:CYS:CB	1:A:20:LEU:H	3	10.13
(1,333)	1:A:86:CYS:CB	1:A:20:LEU:H	10	10.13
(4,45)	1:A:26:CYS:CB	1:A:108:SER:H	1	10.12
(4,36)	1:A:26:CYS:CB	1:A:81:VAL:H	8	10.12
(4,121)	1:A:56:PHE:CB	1:A:32:MET:H	1	10.12
(4,213)	1:A:86:CYS:CB	1:A:41:GLY:H	14	10.11
(4,194)	1:A:75:SER:CB	1:A:103:SER:H	4	10.11
(4,55)	1:A:49:GLN:CB	1:A:26:CYS:H	19	10.1
(4,132)	1:A:56:PHE:CB	1:A:44:MET:H	20	10.1
(4,12)	1:A:26:CYS:CB	1:A:51:PHE:H	18	10.1
(4,12)	1:A:26:CYS:CB	1:A:51:PHE:H	14	10.08
(4,55)	1:A:49:GLN:CB	1:A:26:CYS:H	12	10.07
(4,192)	1:A:75:SER:CB	1:A:101:ASP:H	11	10.07
(4,93)	1:A:49:GLN:CB	1:A:106:GLN:H	13	10.06
(4,34)	1:A:26:CYS:CB	1:A:79:THR:H	5	10.06
(4,132)	1:A:56:PHE:CB	1:A:44:MET:H	3	10.06
(4,132)	1:A:56:PHE:CB	1:A:44:MET:H	12	10.06
(4,55)	1:A:49:GLN:CB	1:A:26:CYS:H	20	10.05
(4,180)	1:A:75:SER:CB	1:A:47:GLY:H	12	10.05
(4,132)	1:A:56:PHE:CB	1:A:44:MET:H	15	10.05
(4,42)	1:A:26:CYS:CB	1:A:105:ASP:H	10	10.04

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,167)	1:A:75:SER:CB	1:A:30:ALA:H	16	10.04
(4,180)	1:A:75:SER:CB	1:A:47:GLY:H	3	10.03
(4,121)	1:A:56:PHE:CB	1:A:32:MET:H	10	10.03
(4,132)	1:A:56:PHE:CB	1:A:44:MET:H	1	10.02
(4,121)	1:A:56:PHE:CB	1:A:32:MET:H	4	10.02
(4,209)	1:A:86:CYS:CB	1:A:37:THR:H	11	10.01
(4,31)	1:A:26:CYS:CB	1:A:75:SER:H	20	10.0
(4,182)	1:A:75:SER:CB	1:A:49:GLN:H	8	10.0
(4,164)	1:A:75:SER:CB	1:A:26:CYS:H	20	10.0
(4,132)	1:A:56:PHE:CB	1:A:44:MET:H	14	10.0
(4,1)	1:A:26:CYS:CB	1:A:38:PHE:H	19	10.0
(4,163)	1:A:56:PHE:CB	1:A:108:SER:H	20	9.98
(4,132)	1:A:56:PHE:CB	1:A:44:MET:H	16	9.98
(4,241)	1:A:86:CYS:CB	1:A:103:SER:H	15	9.97
(4,197)	1:A:86:CYS:CB	1:A:17:HIS:H	6	9.97
(4,182)	1:A:75:SER:CB	1:A:49:GLN:H	7	9.97
(4,1)	1:A:26:CYS:CB	1:A:38:PHE:H	16	9.97
(4,44)	1:A:26:CYS:CB	1:A:107:ARG:H	14	9.96
(4,132)	1:A:56:PHE:CB	1:A:44:MET:H	18	9.95
(4,1)	1:A:26:CYS:CB	1:A:38:PHE:H	18	9.95
(4,45)	1:A:26:CYS:CB	1:A:108:SER:H	9	9.94
(4,1)	1:A:26:CYS:CB	1:A:38:PHE:H	9	9.94
(1,332)	1:A:86:CYS:CB	1:A:19:GLY:H	6	9.94
(4,178)	1:A:75:SER:CB	1:A:44:MET:H	18	9.93
(4,166)	1:A:75:SER:CB	1:A:28:SER:H	20	9.93
(4,72)	1:A:49:GLN:CB	1:A:77:GLY:H	11	9.92
(4,12)	1:A:26:CYS:CB	1:A:51:PHE:H	6	9.92
(1,334)	1:A:86:CYS:CB	1:A:21:GLY:H	3	9.92
(4,178)	1:A:75:SER:CB	1:A:44:MET:H	20	9.91
(4,132)	1:A:56:PHE:CB	1:A:44:MET:H	19	9.9
(1,313)	1:A:49:GLN:CB	1:A:70:ALA:H	16	9.9
(4,165)	1:A:75:SER:CB	1:A:27:GLN:H	15	9.89
(4,10)	1:A:26:CYS:CB	1:A:49:GLN:H	3	9.89
(4,1)	1:A:26:CYS:CB	1:A:38:PHE:H	11	9.89
(1,333)	1:A:86:CYS:CB	1:A:20:LEU:H	6	9.89
(4,32)	1:A:26:CYS:CB	1:A:76:TYR:H	15	9.88
(4,184)	1:A:75:SER:CB	1:A:51:PHE:H	10	9.88
(1,333)	1:A:86:CYS:CB	1:A:20:LEU:H	15	9.88
(4,55)	1:A:49:GLN:CB	1:A:26:CYS:H	1	9.87
(4,211)	1:A:86:CYS:CB	1:A:39:VAL:H	15	9.87
(4,193)	1:A:75:SER:CB	1:A:102:ARG:H	8	9.86
(4,177)	1:A:75:SER:CB	1:A:43:GLY:H	8	9.86

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,1)	1:A:26:CYS:CB	1:A:38:PHE:H	2	9.86
(4,1)	1:A:26:CYS:CB	1:A:38:PHE:H	12	9.86
(1,314)	1:A:49:GLN:CB	1:A:71:GLY:H	16	9.86
(4,43)	1:A:26:CYS:CB	1:A:106:GLN:H	14	9.85
(4,132)	1:A:56:PHE:CB	1:A:44:MET:H	11	9.85
(4,166)	1:A:75:SER:CB	1:A:28:SER:H	11	9.84
(4,71)	1:A:49:GLN:CB	1:A:76:TYR:H	20	9.83
(4,1)	1:A:26:CYS:CB	1:A:38:PHE:H	1	9.83
(1,334)	1:A:86:CYS:CB	1:A:21:GLY:H	9	9.83
(4,166)	1:A:75:SER:CB	1:A:28:SER:H	13	9.82
(4,183)	1:A:75:SER:CB	1:A:50:MET:H	14	9.81
(4,132)	1:A:56:PHE:CB	1:A:44:MET:H	5	9.81
(1,334)	1:A:86:CYS:CB	1:A:21:GLY:H	6	9.81
(4,94)	1:A:49:GLN:CB	1:A:107:ARG:H	13	9.8
(4,132)	1:A:56:PHE:CB	1:A:44:MET:H	6	9.8
(4,1)	1:A:26:CYS:CB	1:A:38:PHE:H	7	9.8
(1,313)	1:A:49:GLN:CB	1:A:70:ALA:H	19	9.8
(4,9)	1:A:26:CYS:CB	1:A:48:LEU:H	9	9.78
(4,163)	1:A:56:PHE:CB	1:A:108:SER:H	12	9.78
(4,34)	1:A:26:CYS:CB	1:A:79:THR:H	8	9.77
(1,314)	1:A:49:GLN:CB	1:A:71:GLY:H	19	9.77
(4,72)	1:A:49:GLN:CB	1:A:77:GLY:H	20	9.76
(4,70)	1:A:49:GLN:CB	1:A:74:VAL:H	17	9.76
(4,179)	1:A:75:SER:CB	1:A:46:PHE:H	5	9.76
(4,132)	1:A:56:PHE:CB	1:A:44:MET:H	9	9.76
(4,55)	1:A:49:GLN:CB	1:A:26:CYS:H	16	9.75
(4,180)	1:A:75:SER:CB	1:A:47:GLY:H	2	9.75
(4,167)	1:A:75:SER:CB	1:A:30:ALA:H	2	9.75
(4,1)	1:A:26:CYS:CB	1:A:38:PHE:H	10	9.75
(4,211)	1:A:86:CYS:CB	1:A:39:VAL:H	20	9.74
(4,207)	1:A:86:CYS:CB	1:A:35:VAL:H	10	9.74
(1,314)	1:A:49:GLN:CB	1:A:71:GLY:H	17	9.74
(4,70)	1:A:49:GLN:CB	1:A:74:VAL:H	16	9.72
(4,55)	1:A:49:GLN:CB	1:A:26:CYS:H	13	9.72
(4,166)	1:A:75:SER:CB	1:A:28:SER:H	8	9.72
(4,166)	1:A:75:SER:CB	1:A:28:SER:H	12	9.72
(4,182)	1:A:75:SER:CB	1:A:49:GLN:H	2	9.71
(4,180)	1:A:75:SER:CB	1:A:47:GLY:H	16	9.71
(4,1)	1:A:26:CYS:CB	1:A:38:PHE:H	5	9.71
(1,333)	1:A:86:CYS:CB	1:A:20:LEU:H	14	9.71
(4,212)	1:A:86:CYS:CB	1:A:40:THR:H	16	9.7
(4,177)	1:A:75:SER:CB	1:A:43:GLY:H	5	9.7

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,10)	1:A:26:CYS:CB	1:A:49:GLN:H	4	9.7
(4,1)	1:A:26:CYS:CB	1:A:38:PHE:H	8	9.7
(1,314)	1:A:49:GLN:CB	1:A:71:GLY:H	5	9.68
(4,71)	1:A:49:GLN:CB	1:A:76:TYR:H	4	9.67
(4,35)	1:A:26:CYS:CB	1:A:80:ARG:H	8	9.66
(4,166)	1:A:75:SER:CB	1:A:28:SER:H	7	9.66
(4,144)	1:A:56:PHE:CB	1:A:83:SER:H	10	9.66
(4,144)	1:A:56:PHE:CB	1:A:83:SER:H	11	9.66
(4,132)	1:A:56:PHE:CB	1:A:44:MET:H	4	9.66
(4,55)	1:A:49:GLN:CB	1:A:26:CYS:H	2	9.65
(4,211)	1:A:86:CYS:CB	1:A:39:VAL:H	8	9.65
(4,1)	1:A:26:CYS:CB	1:A:38:PHE:H	14	9.65
(1,308)	1:A:26:CYS:CB	1:A:95:THR:H	5	9.65
(4,167)	1:A:75:SER:CB	1:A:30:ALA:H	13	9.64
(4,1)	1:A:26:CYS:CB	1:A:38:PHE:H	15	9.64
(4,70)	1:A:49:GLN:CB	1:A:74:VAL:H	19	9.62
(4,1)	1:A:26:CYS:CB	1:A:38:PHE:H	17	9.62
(1,333)	1:A:86:CYS:CB	1:A:20:LEU:H	9	9.62
(4,167)	1:A:75:SER:CB	1:A:30:ALA:H	3	9.61
(4,167)	1:A:75:SER:CB	1:A:30:ALA:H	17	9.61
(4,166)	1:A:75:SER:CB	1:A:28:SER:H	4	9.61
(4,120)	1:A:56:PHE:CB	1:A:31:PHE:H	14	9.61
(4,10)	1:A:26:CYS:CB	1:A:49:GLN:H	2	9.61
(4,1)	1:A:26:CYS:CB	1:A:38:PHE:H	3	9.61
(4,44)	1:A:26:CYS:CB	1:A:107:ARG:H	15	9.6
(4,166)	1:A:75:SER:CB	1:A:28:SER:H	15	9.59
(4,11)	1:A:26:CYS:CB	1:A:50:MET:H	3	9.58
(4,11)	1:A:26:CYS:CB	1:A:50:MET:H	7	9.58
(4,1)	1:A:26:CYS:CB	1:A:38:PHE:H	6	9.58
(4,212)	1:A:86:CYS:CB	1:A:40:THR:H	19	9.57
(4,33)	1:A:26:CYS:CB	1:A:77:GLY:H	15	9.56
(4,193)	1:A:75:SER:CB	1:A:102:ARG:H	10	9.56
(4,144)	1:A:56:PHE:CB	1:A:83:SER:H	12	9.56
(4,10)	1:A:26:CYS:CB	1:A:49:GLN:H	13	9.56
(4,1)	1:A:26:CYS:CB	1:A:38:PHE:H	13	9.56
(4,132)	1:A:56:PHE:CB	1:A:44:MET:H	17	9.55
(4,180)	1:A:75:SER:CB	1:A:47:GLY:H	19	9.54
(4,178)	1:A:75:SER:CB	1:A:44:MET:H	2	9.54
(4,144)	1:A:56:PHE:CB	1:A:83:SER:H	7	9.54
(4,122)	1:A:56:PHE:CB	1:A:33:LYS:H	11	9.54
(4,10)	1:A:26:CYS:CB	1:A:49:GLN:H	11	9.54
(4,1)	1:A:26:CYS:CB	1:A:38:PHE:H	20	9.54

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,308)	1:A:26:CYS:CB	1:A:95:THR:H	1	9.54
(4,180)	1:A:75:SER:CB	1:A:47:GLY:H	20	9.53
(4,177)	1:A:75:SER:CB	1:A:43:GLY:H	16	9.53
(4,1)	1:A:26:CYS:CB	1:A:38:PHE:H	4	9.53
(1,308)	1:A:26:CYS:CB	1:A:95:THR:H	8	9.53
(4,144)	1:A:56:PHE:CB	1:A:83:SER:H	6	9.52
(4,144)	1:A:56:PHE:CB	1:A:83:SER:H	15	9.52
(1,313)	1:A:49:GLN:CB	1:A:70:ALA:H	17	9.52
(4,194)	1:A:75:SER:CB	1:A:103:SER:H	13	9.51
(4,167)	1:A:75:SER:CB	1:A:30:ALA:H	7	9.51
(4,210)	1:A:86:CYS:CB	1:A:38:PHE:H	8	9.5
(4,167)	1:A:75:SER:CB	1:A:30:ALA:H	18	9.5
(1,333)	1:A:86:CYS:CB	1:A:20:LEU:H	4	9.5
(4,144)	1:A:56:PHE:CB	1:A:83:SER:H	1	9.49
(4,12)	1:A:26:CYS:CB	1:A:51:PHE:H	19	9.49
(4,166)	1:A:75:SER:CB	1:A:28:SER:H	17	9.48
(4,161)	1:A:56:PHE:CB	1:A:106:GLN:H	17	9.48
(4,55)	1:A:49:GLN:CB	1:A:26:CYS:H	15	9.47
(4,212)	1:A:86:CYS:CB	1:A:40:THR:H	7	9.47
(4,209)	1:A:86:CYS:CB	1:A:37:THR:H	10	9.47
(4,167)	1:A:75:SER:CB	1:A:30:ALA:H	19	9.47
(4,166)	1:A:75:SER:CB	1:A:28:SER:H	10	9.47
(4,123)	1:A:56:PHE:CB	1:A:34:GLY:H	11	9.47
(4,122)	1:A:56:PHE:CB	1:A:33:LYS:H	2	9.47
(4,55)	1:A:49:GLN:CB	1:A:26:CYS:H	8	9.46
(4,177)	1:A:75:SER:CB	1:A:43:GLY:H	7	9.46
(4,212)	1:A:86:CYS:CB	1:A:40:THR:H	13	9.45
(4,144)	1:A:56:PHE:CB	1:A:83:SER:H	18	9.45
(4,10)	1:A:26:CYS:CB	1:A:49:GLN:H	6	9.45
(4,11)	1:A:26:CYS:CB	1:A:50:MET:H	11	9.44
(4,196)	1:A:86:CYS:CB	1:A:16:LYS:H	16	9.43
(4,178)	1:A:75:SER:CB	1:A:44:MET:H	14	9.43
(4,144)	1:A:56:PHE:CB	1:A:83:SER:H	8	9.43
(4,144)	1:A:56:PHE:CB	1:A:83:SER:H	9	9.43
(1,307)	1:A:26:CYS:CB	1:A:94:GLU:H	15	9.43
(4,70)	1:A:49:GLN:CB	1:A:74:VAL:H	5	9.41
(4,55)	1:A:49:GLN:CB	1:A:26:CYS:H	5	9.41
(4,212)	1:A:86:CYS:CB	1:A:40:THR:H	12	9.41
(4,210)	1:A:86:CYS:CB	1:A:38:PHE:H	20	9.4
(4,123)	1:A:56:PHE:CB	1:A:34:GLY:H	2	9.4
(4,144)	1:A:56:PHE:CB	1:A:83:SER:H	3	9.39
(4,183)	1:A:75:SER:CB	1:A:50:MET:H	11	9.38

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,55)	1:A:49:GLN:CB	1:A:26:CYS:H	7	9.37
(4,178)	1:A:75:SER:CB	1:A:44:MET:H	11	9.37
(4,144)	1:A:56:PHE:CB	1:A:83:SER:H	13	9.37
(4,132)	1:A:56:PHE:CB	1:A:44:MET:H	13	9.37
(4,10)	1:A:26:CYS:CB	1:A:49:GLN:H	14	9.37
(1,334)	1:A:86:CYS:CB	1:A:21:GLY:H	4	9.37
(4,122)	1:A:56:PHE:CB	1:A:33:LYS:H	6	9.36
(1,313)	1:A:49:GLN:CB	1:A:70:ALA:H	14	9.36
(4,212)	1:A:86:CYS:CB	1:A:40:THR:H	2	9.35
(4,166)	1:A:75:SER:CB	1:A:28:SER:H	1	9.34
(4,144)	1:A:56:PHE:CB	1:A:83:SER:H	20	9.34
(4,122)	1:A:56:PHE:CB	1:A:33:LYS:H	4	9.34
(4,9)	1:A:26:CYS:CB	1:A:48:LEU:H	13	9.32
(4,71)	1:A:49:GLN:CB	1:A:76:TYR:H	11	9.32
(4,210)	1:A:86:CYS:CB	1:A:38:PHE:H	15	9.32
(4,132)	1:A:56:PHE:CB	1:A:44:MET:H	2	9.32
(1,314)	1:A:49:GLN:CB	1:A:71:GLY:H	14	9.32
(4,181)	1:A:75:SER:CB	1:A:48:LEU:H	4	9.31
(4,144)	1:A:56:PHE:CB	1:A:83:SER:H	17	9.31
(4,123)	1:A:56:PHE:CB	1:A:34:GLY:H	8	9.31
(1,308)	1:A:26:CYS:CB	1:A:95:THR:H	4	9.31
(4,144)	1:A:56:PHE:CB	1:A:83:SER:H	2	9.3
(4,144)	1:A:56:PHE:CB	1:A:83:SER:H	14	9.3
(4,122)	1:A:56:PHE:CB	1:A:33:LYS:H	8	9.3
(4,164)	1:A:75:SER:CB	1:A:26:CYS:H	15	9.29
(4,132)	1:A:56:PHE:CB	1:A:44:MET:H	7	9.29
(1,340)	1:A:86:CYS:CB	1:A:95:THR:H	6	9.29
(4,43)	1:A:26:CYS:CB	1:A:106:GLN:H	19	9.28
(4,32)	1:A:26:CYS:CB	1:A:76:TYR:H	10	9.28
(4,211)	1:A:86:CYS:CB	1:A:39:VAL:H	5	9.28
(4,167)	1:A:75:SER:CB	1:A:30:ALA:H	9	9.28
(4,10)	1:A:26:CYS:CB	1:A:49:GLN:H	12	9.28
(4,31)	1:A:26:CYS:CB	1:A:75:SER:H	15	9.27
(4,166)	1:A:75:SER:CB	1:A:28:SER:H	2	9.27
(4,121)	1:A:56:PHE:CB	1:A:32:MET:H	17	9.27
(4,10)	1:A:26:CYS:CB	1:A:49:GLN:H	1	9.27
(4,241)	1:A:86:CYS:CB	1:A:103:SER:H	6	9.26
(4,166)	1:A:75:SER:CB	1:A:28:SER:H	9	9.26
(4,123)	1:A:56:PHE:CB	1:A:34:GLY:H	13	9.26
(4,122)	1:A:56:PHE:CB	1:A:33:LYS:H	13	9.26
(1,313)	1:A:49:GLN:CB	1:A:70:ALA:H	5	9.26
(4,183)	1:A:75:SER:CB	1:A:50:MET:H	15	9.25

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,180)	1:A:75:SER:CB	1:A:47:GLY:H	6	9.25
(4,12)	1:A:26:CYS:CB	1:A:51:PHE:H	16	9.25
(1,306)	1:A:26:CYS:CB	1:A:93:LEU:H	10	9.25
(4,210)	1:A:86:CYS:CB	1:A:38:PHE:H	5	9.24
(4,178)	1:A:75:SER:CB	1:A:44:MET:H	6	9.24
(4,121)	1:A:56:PHE:CB	1:A:32:MET:H	5	9.24
(4,120)	1:A:56:PHE:CB	1:A:31:PHE:H	6	9.24
(1,340)	1:A:86:CYS:CB	1:A:95:THR:H	8	9.24
(4,212)	1:A:86:CYS:CB	1:A:40:THR:H	3	9.23
(4,180)	1:A:75:SER:CB	1:A:47:GLY:H	18	9.23
(4,123)	1:A:56:PHE:CB	1:A:34:GLY:H	10	9.23
(4,121)	1:A:56:PHE:CB	1:A:32:MET:H	18	9.23
(4,9)	1:A:26:CYS:CB	1:A:48:LEU:H	2	9.22
(4,9)	1:A:26:CYS:CB	1:A:48:LEU:H	17	9.22
(4,179)	1:A:75:SER:CB	1:A:46:PHE:H	17	9.22
(4,167)	1:A:75:SER:CB	1:A:30:ALA:H	1	9.22
(4,144)	1:A:56:PHE:CB	1:A:83:SER:H	5	9.22
(4,12)	1:A:26:CYS:CB	1:A:51:PHE:H	20	9.22
(4,122)	1:A:56:PHE:CB	1:A:33:LYS:H	14	9.21
(4,121)	1:A:56:PHE:CB	1:A:32:MET:H	9	9.21
(4,240)	1:A:86:CYS:CB	1:A:102:ARG:H	6	9.2
(4,212)	1:A:86:CYS:CB	1:A:40:THR:H	17	9.2
(4,122)	1:A:56:PHE:CB	1:A:33:LYS:H	9	9.2
(4,10)	1:A:26:CYS:CB	1:A:49:GLN:H	18	9.2
(4,182)	1:A:75:SER:CB	1:A:49:GLN:H	10	9.19
(4,122)	1:A:56:PHE:CB	1:A:33:LYS:H	10	9.19
(4,177)	1:A:75:SER:CB	1:A:43:GLY:H	13	9.18
(4,176)	1:A:75:SER:CB	1:A:42:THR:H	16	9.18
(4,12)	1:A:26:CYS:CB	1:A:51:PHE:H	5	9.15
(4,122)	1:A:56:PHE:CB	1:A:33:LYS:H	15	9.14
(4,167)	1:A:75:SER:CB	1:A:30:ALA:H	12	9.13
(4,123)	1:A:56:PHE:CB	1:A:34:GLY:H	7	9.12
(4,122)	1:A:56:PHE:CB	1:A:33:LYS:H	7	9.12
(1,308)	1:A:26:CYS:CB	1:A:95:THR:H	13	9.12
(4,45)	1:A:26:CYS:CB	1:A:108:SER:H	10	9.11
(4,197)	1:A:86:CYS:CB	1:A:17:HIS:H	2	9.11
(4,179)	1:A:75:SER:CB	1:A:46:PHE:H	16	9.11
(1,314)	1:A:49:GLN:CB	1:A:71:GLY:H	6	9.11
(4,70)	1:A:49:GLN:CB	1:A:74:VAL:H	14	9.1
(4,241)	1:A:86:CYS:CB	1:A:103:SER:H	18	9.09
(4,211)	1:A:86:CYS:CB	1:A:39:VAL:H	6	9.09
(1,333)	1:A:86:CYS:CB	1:A:20:LEU:H	18	9.09

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,181)	1:A:75:SER:CB	1:A:48:LEU:H	10	9.08
(4,132)	1:A:56:PHE:CB	1:A:44:MET:H	10	9.08
(4,95)	1:A:49:GLN:CB	1:A:108:SER:H	8	9.07
(4,55)	1:A:49:GLN:CB	1:A:26:CYS:H	10	9.07
(4,179)	1:A:75:SER:CB	1:A:46:PHE:H	9	9.07
(1,308)	1:A:26:CYS:CB	1:A:95:THR:H	7	9.07
(4,212)	1:A:86:CYS:CB	1:A:40:THR:H	1	9.06
(4,212)	1:A:86:CYS:CB	1:A:40:THR:H	14	9.06
(4,175)	1:A:75:SER:CB	1:A:41:GLY:H	5	9.06
(4,121)	1:A:56:PHE:CB	1:A:32:MET:H	3	9.06
(1,314)	1:A:49:GLN:CB	1:A:71:GLY:H	9	9.06
(1,307)	1:A:26:CYS:CB	1:A:94:GLU:H	20	9.06
(1,305)	1:A:26:CYS:CB	1:A:91:LEU:H	3	9.06
(4,177)	1:A:75:SER:CB	1:A:43:GLY:H	19	9.05
(4,123)	1:A:56:PHE:CB	1:A:34:GLY:H	4	9.05
(1,332)	1:A:86:CYS:CB	1:A:19:GLY:H	20	9.05
(4,177)	1:A:75:SER:CB	1:A:43:GLY:H	12	9.04
(4,144)	1:A:56:PHE:CB	1:A:83:SER:H	16	9.04
(1,305)	1:A:26:CYS:CB	1:A:91:LEU:H	15	9.04
(4,10)	1:A:26:CYS:CB	1:A:49:GLN:H	7	9.03
(1,340)	1:A:86:CYS:CB	1:A:95:THR:H	13	9.03
(4,144)	1:A:56:PHE:CB	1:A:83:SER:H	19	9.02
(1,333)	1:A:86:CYS:CB	1:A:20:LEU:H	19	9.02
(4,166)	1:A:75:SER:CB	1:A:28:SER:H	3	9.01
(1,305)	1:A:26:CYS:CB	1:A:91:LEU:H	1	9.01
(1,305)	1:A:26:CYS:CB	1:A:91:LEU:H	2	9.0
(1,305)	1:A:26:CYS:CB	1:A:91:LEU:H	20	9.0
(4,37)	1:A:26:CYS:CB	1:A:83:SER:H	17	8.99
(4,238)	1:A:86:CYS:CB	1:A:98:LEU:H	18	8.99
(4,167)	1:A:75:SER:CB	1:A:30:ALA:H	11	8.99
(1,340)	1:A:86:CYS:CB	1:A:95:THR:H	11	8.99
(1,308)	1:A:26:CYS:CB	1:A:95:THR:H	3	8.99
(4,72)	1:A:49:GLN:CB	1:A:77:GLY:H	15	8.97
(4,10)	1:A:26:CYS:CB	1:A:49:GLN:H	8	8.97
(4,10)	1:A:26:CYS:CB	1:A:49:GLN:H	19	8.97
(1,340)	1:A:86:CYS:CB	1:A:95:THR:H	3	8.97
(1,340)	1:A:86:CYS:CB	1:A:95:THR:H	5	8.96
(4,37)	1:A:26:CYS:CB	1:A:83:SER:H	18	8.95
(4,122)	1:A:56:PHE:CB	1:A:33:LYS:H	3	8.95
(1,307)	1:A:26:CYS:CB	1:A:94:GLU:H	18	8.95
(1,340)	1:A:86:CYS:CB	1:A:95:THR:H	7	8.93
(1,340)	1:A:86:CYS:CB	1:A:95:THR:H	20	8.93

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,70)	1:A:49:GLN:CB	1:A:74:VAL:H	9	8.91
(4,34)	1:A:26:CYS:CB	1:A:79:THR:H	14	8.91
(4,176)	1:A:75:SER:CB	1:A:42:THR:H	5	8.91
(4,159)	1:A:56:PHE:CB	1:A:104:THR:H	8	8.91
(4,122)	1:A:56:PHE:CB	1:A:33:LYS:H	20	8.91
(4,38)	1:A:26:CYS:CB	1:A:85:LYS:H	2	8.9
(4,123)	1:A:56:PHE:CB	1:A:34:GLY:H	12	8.9
(4,11)	1:A:26:CYS:CB	1:A:50:MET:H	12	8.9
(1,340)	1:A:86:CYS:CB	1:A:95:THR:H	15	8.9
(1,308)	1:A:26:CYS:CB	1:A:95:THR:H	12	8.9
(4,121)	1:A:56:PHE:CB	1:A:32:MET:H	6	8.89
(1,313)	1:A:49:GLN:CB	1:A:70:ALA:H	8	8.89
(4,11)	1:A:26:CYS:CB	1:A:50:MET:H	10	8.88
(4,9)	1:A:26:CYS:CB	1:A:48:LEU:H	3	8.87
(4,43)	1:A:26:CYS:CB	1:A:106:GLN:H	4	8.87
(4,183)	1:A:75:SER:CB	1:A:50:MET:H	4	8.87
(4,176)	1:A:75:SER:CB	1:A:42:THR:H	9	8.87
(4,124)	1:A:56:PHE:CB	1:A:35:VAL:H	15	8.87
(4,121)	1:A:56:PHE:CB	1:A:32:MET:H	14	8.87
(1,340)	1:A:86:CYS:CB	1:A:95:THR:H	19	8.87
(4,179)	1:A:75:SER:CB	1:A:46:PHE:H	19	8.86
(4,10)	1:A:26:CYS:CB	1:A:49:GLN:H	10	8.86
(1,340)	1:A:86:CYS:CB	1:A:95:THR:H	9	8.86
(4,177)	1:A:75:SER:CB	1:A:43:GLY:H	1	8.85
(4,9)	1:A:26:CYS:CB	1:A:48:LEU:H	8	8.84
(4,35)	1:A:26:CYS:CB	1:A:80:ARG:H	14	8.84
(4,122)	1:A:56:PHE:CB	1:A:33:LYS:H	17	8.84
(4,11)	1:A:26:CYS:CB	1:A:50:MET:H	1	8.84
(4,11)	1:A:26:CYS:CB	1:A:50:MET:H	14	8.84
(4,11)	1:A:26:CYS:CB	1:A:50:MET:H	18	8.83
(1,340)	1:A:86:CYS:CB	1:A:95:THR:H	4	8.83
(1,306)	1:A:26:CYS:CB	1:A:93:LEU:H	11	8.83
(4,38)	1:A:26:CYS:CB	1:A:85:LYS:H	4	8.82
(1,314)	1:A:49:GLN:CB	1:A:71:GLY:H	10	8.82
(4,36)	1:A:26:CYS:CB	1:A:81:VAL:H	14	8.81
(4,207)	1:A:86:CYS:CB	1:A:35:VAL:H	11	8.81
(4,165)	1:A:75:SER:CB	1:A:27:GLN:H	14	8.81
(4,163)	1:A:56:PHE:CB	1:A:108:SER:H	4	8.81
(4,166)	1:A:75:SER:CB	1:A:28:SER:H	5	8.8
(4,70)	1:A:49:GLN:CB	1:A:74:VAL:H	6	8.79
(4,177)	1:A:75:SER:CB	1:A:43:GLY:H	9	8.78
(4,167)	1:A:75:SER:CB	1:A:30:ALA:H	5	8.78

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,132)	1:A:56:PHE:CB	1:A:44:MET:H	8	8.78
(1,340)	1:A:86:CYS:CB	1:A:95:THR:H	10	8.78
(4,9)	1:A:26:CYS:CB	1:A:48:LEU:H	4	8.77
(4,238)	1:A:86:CYS:CB	1:A:98:LEU:H	14	8.77
(4,163)	1:A:56:PHE:CB	1:A:108:SER:H	1	8.77
(1,340)	1:A:86:CYS:CB	1:A:95:THR:H	14	8.77
(1,340)	1:A:86:CYS:CB	1:A:95:THR:H	17	8.77
(4,241)	1:A:86:CYS:CB	1:A:103:SER:H	19	8.76
(1,340)	1:A:86:CYS:CB	1:A:95:THR:H	18	8.76
(1,314)	1:A:49:GLN:CB	1:A:71:GLY:H	3	8.76
(4,177)	1:A:75:SER:CB	1:A:43:GLY:H	17	8.75
(4,123)	1:A:56:PHE:CB	1:A:34:GLY:H	1	8.75
(1,307)	1:A:26:CYS:CB	1:A:94:GLU:H	10	8.75
(4,122)	1:A:56:PHE:CB	1:A:33:LYS:H	1	8.74
(1,340)	1:A:86:CYS:CB	1:A:95:THR:H	12	8.74
(4,10)	1:A:26:CYS:CB	1:A:49:GLN:H	16	8.73
(4,37)	1:A:26:CYS:CB	1:A:83:SER:H	3	8.72
(4,11)	1:A:26:CYS:CB	1:A:50:MET:H	6	8.72
(4,70)	1:A:49:GLN:CB	1:A:74:VAL:H	12	8.71
(4,33)	1:A:26:CYS:CB	1:A:77:GLY:H	11	8.71
(4,144)	1:A:56:PHE:CB	1:A:83:SER:H	4	8.71
(1,305)	1:A:26:CYS:CB	1:A:91:LEU:H	17	8.71
(4,71)	1:A:49:GLN:CB	1:A:76:TYR:H	10	8.7
(4,122)	1:A:56:PHE:CB	1:A:33:LYS:H	12	8.7
(4,70)	1:A:49:GLN:CB	1:A:74:VAL:H	8	8.69
(4,180)	1:A:75:SER:CB	1:A:47:GLY:H	14	8.69
(4,176)	1:A:75:SER:CB	1:A:42:THR:H	19	8.69
(4,12)	1:A:26:CYS:CB	1:A:51:PHE:H	15	8.69
(4,123)	1:A:56:PHE:CB	1:A:34:GLY:H	3	8.68
(4,179)	1:A:75:SER:CB	1:A:46:PHE:H	3	8.67
(4,160)	1:A:56:PHE:CB	1:A:105:ASP:H	11	8.67
(1,340)	1:A:86:CYS:CB	1:A:95:THR:H	1	8.67
(4,123)	1:A:56:PHE:CB	1:A:34:GLY:H	20	8.66
(1,305)	1:A:26:CYS:CB	1:A:91:LEU:H	5	8.66
(4,71)	1:A:49:GLN:CB	1:A:76:TYR:H	15	8.65
(4,238)	1:A:86:CYS:CB	1:A:98:LEU:H	15	8.65
(4,179)	1:A:75:SER:CB	1:A:46:PHE:H	12	8.65
(4,178)	1:A:75:SER:CB	1:A:44:MET:H	15	8.65
(4,123)	1:A:56:PHE:CB	1:A:34:GLY:H	15	8.65
(4,208)	1:A:86:CYS:CB	1:A:36:PHE:H	10	8.64
(4,168)	1:A:75:SER:CB	1:A:34:GLY:H	16	8.64
(1,314)	1:A:49:GLN:CB	1:A:71:GLY:H	12	8.64

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,165)	1:A:75:SER:CB	1:A:27:GLN:H	6	8.63
(4,195)	1:A:86:CYS:CB	1:A:15:ALA:H	12	8.62
(4,167)	1:A:75:SER:CB	1:A:30:ALA:H	8	8.62
(1,340)	1:A:86:CYS:CB	1:A:95:THR:H	2	8.62
(1,308)	1:A:26:CYS:CB	1:A:95:THR:H	16	8.62
(4,9)	1:A:26:CYS:CB	1:A:48:LEU:H	7	8.61
(4,238)	1:A:86:CYS:CB	1:A:98:LEU:H	17	8.61
(4,177)	1:A:75:SER:CB	1:A:43:GLY:H	3	8.6
(4,193)	1:A:75:SER:CB	1:A:102:ARG:H	13	8.59
(4,240)	1:A:86:CYS:CB	1:A:102:ARG:H	19	8.58
(4,172)	1:A:75:SER:CB	1:A:38:PHE:H	5	8.57
(4,121)	1:A:56:PHE:CB	1:A:32:MET:H	16	8.57
(1,340)	1:A:86:CYS:CB	1:A:95:THR:H	16	8.57
(4,37)	1:A:26:CYS:CB	1:A:83:SER:H	16	8.56
(1,306)	1:A:26:CYS:CB	1:A:93:LEU:H	2	8.55
(4,175)	1:A:75:SER:CB	1:A:41:GLY:H	16	8.54
(4,143)	1:A:56:PHE:CB	1:A:82:GLU:H	10	8.54
(4,10)	1:A:26:CYS:CB	1:A:49:GLN:H	20	8.54
(1,313)	1:A:49:GLN:CB	1:A:70:ALA:H	12	8.54
(4,37)	1:A:26:CYS:CB	1:A:83:SER:H	4	8.53
(4,10)	1:A:26:CYS:CB	1:A:49:GLN:H	5	8.53
(4,33)	1:A:26:CYS:CB	1:A:77:GLY:H	10	8.52
(4,238)	1:A:86:CYS:CB	1:A:98:LEU:H	20	8.52
(1,313)	1:A:49:GLN:CB	1:A:70:ALA:H	9	8.51
(4,38)	1:A:26:CYS:CB	1:A:85:LYS:H	7	8.5
(4,122)	1:A:56:PHE:CB	1:A:33:LYS:H	18	8.5
(4,43)	1:A:26:CYS:CB	1:A:106:GLN:H	6	8.49
(1,333)	1:A:86:CYS:CB	1:A:20:LEU:H	5	8.49
(1,314)	1:A:49:GLN:CB	1:A:71:GLY:H	11	8.49
(4,70)	1:A:49:GLN:CB	1:A:74:VAL:H	3	8.48
(4,56)	1:A:49:GLN:CB	1:A:28:SER:H	20	8.48
(4,238)	1:A:86:CYS:CB	1:A:98:LEU:H	1	8.48
(4,176)	1:A:75:SER:CB	1:A:42:THR:H	3	8.48
(4,176)	1:A:75:SER:CB	1:A:42:THR:H	17	8.48
(4,38)	1:A:26:CYS:CB	1:A:85:LYS:H	19	8.47
(4,241)	1:A:86:CYS:CB	1:A:103:SER:H	5	8.47
(4,180)	1:A:75:SER:CB	1:A:47:GLY:H	11	8.47
(4,238)	1:A:86:CYS:CB	1:A:98:LEU:H	2	8.46
(4,124)	1:A:56:PHE:CB	1:A:35:VAL:H	20	8.46
(4,123)	1:A:56:PHE:CB	1:A:34:GLY:H	18	8.46
(1,314)	1:A:49:GLN:CB	1:A:71:GLY:H	1	8.46
(4,37)	1:A:26:CYS:CB	1:A:83:SER:H	2	8.45

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,11)	1:A:26:CYS:CB	1:A:50:MET:H	19	8.45
(1,313)	1:A:49:GLN:CB	1:A:70:ALA:H	6	8.45
(4,38)	1:A:26:CYS:CB	1:A:85:LYS:H	13	8.44
(4,159)	1:A:56:PHE:CB	1:A:104:THR:H	13	8.44
(1,334)	1:A:86:CYS:CB	1:A:21:GLY:H	10	8.44
(4,9)	1:A:26:CYS:CB	1:A:48:LEU:H	11	8.43
(1,305)	1:A:26:CYS:CB	1:A:91:LEU:H	7	8.43
(4,38)	1:A:26:CYS:CB	1:A:85:LYS:H	16	8.42
(4,213)	1:A:86:CYS:CB	1:A:41:GLY:H	4	8.42
(4,179)	1:A:75:SER:CB	1:A:46:PHE:H	1	8.42
(1,334)	1:A:86:CYS:CB	1:A:21:GLY:H	2	8.42
(1,305)	1:A:26:CYS:CB	1:A:91:LEU:H	16	8.42
(4,241)	1:A:86:CYS:CB	1:A:103:SER:H	20	8.4
(4,197)	1:A:86:CYS:CB	1:A:17:HIS:H	1	8.4
(1,313)	1:A:49:GLN:CB	1:A:70:ALA:H	3	8.4
(4,182)	1:A:75:SER:CB	1:A:49:GLN:H	4	8.39
(4,168)	1:A:75:SER:CB	1:A:34:GLY:H	5	8.39
(4,166)	1:A:75:SER:CB	1:A:28:SER:H	16	8.39
(1,314)	1:A:49:GLN:CB	1:A:71:GLY:H	8	8.39
(4,238)	1:A:86:CYS:CB	1:A:98:LEU:H	13	8.38
(4,176)	1:A:75:SER:CB	1:A:42:THR:H	14	8.38
(4,9)	1:A:26:CYS:CB	1:A:48:LEU:H	1	8.37
(4,56)	1:A:49:GLN:CB	1:A:28:SER:H	15	8.37
(4,9)	1:A:26:CYS:CB	1:A:48:LEU:H	12	8.36
(4,238)	1:A:86:CYS:CB	1:A:98:LEU:H	6	8.34
(4,166)	1:A:75:SER:CB	1:A:28:SER:H	6	8.34
(4,37)	1:A:26:CYS:CB	1:A:83:SER:H	19	8.33
(4,43)	1:A:26:CYS:CB	1:A:106:GLN:H	16	8.32
(4,211)	1:A:86:CYS:CB	1:A:39:VAL:H	9	8.32
(4,211)	1:A:86:CYS:CB	1:A:39:VAL:H	18	8.32
(4,179)	1:A:75:SER:CB	1:A:46:PHE:H	20	8.32
(1,334)	1:A:86:CYS:CB	1:A:21:GLY:H	18	8.32
(1,314)	1:A:49:GLN:CB	1:A:71:GLY:H	20	8.32
(4,38)	1:A:26:CYS:CB	1:A:85:LYS:H	17	8.31
(4,121)	1:A:56:PHE:CB	1:A:32:MET:H	19	8.31
(4,166)	1:A:75:SER:CB	1:A:28:SER:H	18	8.3
(4,143)	1:A:56:PHE:CB	1:A:82:GLU:H	11	8.3
(4,210)	1:A:86:CYS:CB	1:A:38:PHE:H	13	8.29
(4,168)	1:A:75:SER:CB	1:A:34:GLY:H	13	8.29
(1,334)	1:A:86:CYS:CB	1:A:21:GLY:H	20	8.29
(1,305)	1:A:26:CYS:CB	1:A:91:LEU:H	12	8.29
(4,35)	1:A:26:CYS:CB	1:A:80:ARG:H	6	8.28

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,238)	1:A:86:CYS:CB	1:A:98:LEU:H	11	8.28
(4,197)	1:A:86:CYS:CB	1:A:17:HIS:H	7	8.28
(1,308)	1:A:26:CYS:CB	1:A:95:THR:H	17	8.27
(1,305)	1:A:26:CYS:CB	1:A:91:LEU:H	19	8.27
(1,304)	1:A:26:CYS:CB	1:A:90:TRP:H	18	8.27
(4,238)	1:A:86:CYS:CB	1:A:98:LEU:H	3	8.26
(4,70)	1:A:49:GLN:CB	1:A:74:VAL:H	13	8.24
(4,179)	1:A:75:SER:CB	1:A:46:PHE:H	6	8.23
(4,11)	1:A:26:CYS:CB	1:A:50:MET:H	16	8.23
(4,210)	1:A:86:CYS:CB	1:A:38:PHE:H	7	8.22
(4,209)	1:A:86:CYS:CB	1:A:37:THR:H	18	8.22
(4,206)	1:A:86:CYS:CB	1:A:34:GLY:H	10	8.22
(4,69)	1:A:49:GLN:CB	1:A:72:SER:H	16	8.21
(4,45)	1:A:26:CYS:CB	1:A:108:SER:H	4	8.21
(4,208)	1:A:86:CYS:CB	1:A:36:PHE:H	11	8.21
(4,179)	1:A:75:SER:CB	1:A:46:PHE:H	8	8.2
(4,166)	1:A:75:SER:CB	1:A:28:SER:H	19	8.2
(4,163)	1:A:56:PHE:CB	1:A:108:SER:H	18	8.2
(4,123)	1:A:56:PHE:CB	1:A:34:GLY:H	16	8.2
(4,123)	1:A:56:PHE:CB	1:A:34:GLY:H	17	8.19
(1,306)	1:A:26:CYS:CB	1:A:93:LEU:H	4	8.19
(4,38)	1:A:26:CYS:CB	1:A:85:LYS:H	3	8.18
(4,211)	1:A:86:CYS:CB	1:A:39:VAL:H	13	8.18
(4,180)	1:A:75:SER:CB	1:A:47:GLY:H	15	8.18
(4,9)	1:A:26:CYS:CB	1:A:48:LEU:H	6	8.17
(4,210)	1:A:86:CYS:CB	1:A:38:PHE:H	12	8.16
(4,210)	1:A:86:CYS:CB	1:A:38:PHE:H	18	8.16
(4,70)	1:A:49:GLN:CB	1:A:74:VAL:H	1	8.15
(4,177)	1:A:75:SER:CB	1:A:43:GLY:H	18	8.15
(4,143)	1:A:56:PHE:CB	1:A:82:GLU:H	15	8.15
(4,123)	1:A:56:PHE:CB	1:A:34:GLY:H	5	8.15
(4,196)	1:A:86:CYS:CB	1:A:16:LYS:H	14	8.14
(4,143)	1:A:56:PHE:CB	1:A:82:GLU:H	6	8.14
(1,334)	1:A:86:CYS:CB	1:A:21:GLY:H	1	8.14
(4,69)	1:A:49:GLN:CB	1:A:72:SER:H	19	8.13
(4,35)	1:A:26:CYS:CB	1:A:80:ARG:H	20	8.13
(1,308)	1:A:26:CYS:CB	1:A:95:THR:H	19	8.13
(4,69)	1:A:49:GLN:CB	1:A:72:SER:H	5	8.12
(4,37)	1:A:26:CYS:CB	1:A:83:SER:H	13	8.11
(4,238)	1:A:86:CYS:CB	1:A:98:LEU:H	16	8.11
(1,334)	1:A:86:CYS:CB	1:A:21:GLY:H	7	8.11
(1,313)	1:A:49:GLN:CB	1:A:70:ALA:H	1	8.11

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,166)	1:A:75:SER:CB	1:A:28:SER:H	14	8.09
(4,123)	1:A:56:PHE:CB	1:A:34:GLY:H	9	8.09
(4,9)	1:A:26:CYS:CB	1:A:48:LEU:H	10	8.08
(4,178)	1:A:75:SER:CB	1:A:44:MET:H	4	8.08
(4,160)	1:A:56:PHE:CB	1:A:105:ASP:H	10	8.08
(4,69)	1:A:49:GLN:CB	1:A:72:SER:H	17	8.07
(4,168)	1:A:75:SER:CB	1:A:34:GLY:H	19	8.07
(1,334)	1:A:86:CYS:CB	1:A:21:GLY:H	11	8.07
(1,332)	1:A:86:CYS:CB	1:A:19:GLY:H	11	8.07
(4,38)	1:A:26:CYS:CB	1:A:85:LYS:H	18	8.06
(4,37)	1:A:26:CYS:CB	1:A:83:SER:H	7	8.06
(4,143)	1:A:56:PHE:CB	1:A:82:GLU:H	9	8.06
(1,305)	1:A:26:CYS:CB	1:A:91:LEU:H	13	8.05
(4,34)	1:A:26:CYS:CB	1:A:79:THR:H	6	8.04
(4,175)	1:A:75:SER:CB	1:A:41:GLY:H	19	8.04
(1,334)	1:A:86:CYS:CB	1:A:21:GLY:H	13	8.04
(1,333)	1:A:86:CYS:CB	1:A:20:LEU:H	16	8.04
(4,171)	1:A:75:SER:CB	1:A:37:THR:H	16	8.03
(1,314)	1:A:49:GLN:CB	1:A:71:GLY:H	18	8.03
(4,211)	1:A:86:CYS:CB	1:A:39:VAL:H	12	8.02
(4,179)	1:A:75:SER:CB	1:A:46:PHE:H	14	8.02
(4,37)	1:A:26:CYS:CB	1:A:83:SER:H	9	8.01
(4,168)	1:A:75:SER:CB	1:A:34:GLY:H	7	8.01
(4,143)	1:A:56:PHE:CB	1:A:82:GLU:H	7	8.01
(1,334)	1:A:86:CYS:CB	1:A:21:GLY:H	12	8.01
(4,44)	1:A:26:CYS:CB	1:A:107:ARG:H	9	7.99
(4,179)	1:A:75:SER:CB	1:A:46:PHE:H	18	7.99
(4,177)	1:A:75:SER:CB	1:A:43:GLY:H	2	7.99
(4,168)	1:A:75:SER:CB	1:A:34:GLY:H	2	7.99
(4,143)	1:A:56:PHE:CB	1:A:82:GLU:H	18	7.99
(4,210)	1:A:86:CYS:CB	1:A:38:PHE:H	2	7.98
(4,206)	1:A:86:CYS:CB	1:A:34:GLY:H	11	7.98
(4,183)	1:A:75:SER:CB	1:A:50:MET:H	10	7.98
(4,167)	1:A:75:SER:CB	1:A:30:ALA:H	10	7.98
(4,162)	1:A:56:PHE:CB	1:A:107:ARG:H	1	7.98
(4,143)	1:A:56:PHE:CB	1:A:82:GLU:H	3	7.98
(4,143)	1:A:56:PHE:CB	1:A:82:GLU:H	13	7.98
(1,313)	1:A:49:GLN:CB	1:A:70:ALA:H	13	7.98
(4,160)	1:A:56:PHE:CB	1:A:105:ASP:H	8	7.97
(4,143)	1:A:56:PHE:CB	1:A:82:GLU:H	1	7.96
(4,143)	1:A:56:PHE:CB	1:A:82:GLU:H	20	7.96
(4,228)	1:A:86:CYS:CB	1:A:62:TRP:H	10	7.95

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,197)	1:A:86:CYS:CB	1:A:17:HIS:H	13	7.95
(4,123)	1:A:56:PHE:CB	1:A:34:GLY:H	19	7.95
(4,70)	1:A:49:GLN:CB	1:A:74:VAL:H	7	7.94
(4,228)	1:A:86:CYS:CB	1:A:62:TRP:H	8	7.94
(4,9)	1:A:26:CYS:CB	1:A:48:LEU:H	14	7.93
(4,37)	1:A:26:CYS:CB	1:A:83:SER:H	1	7.93
(4,210)	1:A:86:CYS:CB	1:A:38:PHE:H	1	7.93
(4,143)	1:A:56:PHE:CB	1:A:82:GLU:H	2	7.93
(4,228)	1:A:86:CYS:CB	1:A:62:TRP:H	13	7.92
(4,143)	1:A:56:PHE:CB	1:A:82:GLU:H	17	7.92
(4,56)	1:A:49:GLN:CB	1:A:28:SER:H	17	7.91
(4,238)	1:A:86:CYS:CB	1:A:98:LEU:H	5	7.91
(4,180)	1:A:75:SER:CB	1:A:47:GLY:H	4	7.91
(4,122)	1:A:56:PHE:CB	1:A:33:LYS:H	16	7.91
(1,305)	1:A:26:CYS:CB	1:A:91:LEU:H	9	7.91
(1,334)	1:A:86:CYS:CB	1:A:21:GLY:H	15	7.9
(4,177)	1:A:75:SER:CB	1:A:43:GLY:H	20	7.89
(4,168)	1:A:75:SER:CB	1:A:34:GLY:H	12	7.89
(4,143)	1:A:56:PHE:CB	1:A:82:GLU:H	8	7.89
(4,238)	1:A:86:CYS:CB	1:A:98:LEU:H	4	7.88
(4,228)	1:A:86:CYS:CB	1:A:62:TRP:H	19	7.88
(4,211)	1:A:86:CYS:CB	1:A:39:VAL:H	7	7.88
(4,168)	1:A:75:SER:CB	1:A:34:GLY:H	1	7.88
(4,142)	1:A:56:PHE:CB	1:A:81:VAL:H	10	7.88
(4,228)	1:A:86:CYS:CB	1:A:62:TRP:H	16	7.87
(4,196)	1:A:86:CYS:CB	1:A:16:LYS:H	1	7.87
(4,179)	1:A:75:SER:CB	1:A:46:PHE:H	13	7.87
(4,143)	1:A:56:PHE:CB	1:A:82:GLU:H	12	7.87
(4,38)	1:A:26:CYS:CB	1:A:85:LYS:H	1	7.86
(4,179)	1:A:75:SER:CB	1:A:46:PHE:H	7	7.86
(4,142)	1:A:56:PHE:CB	1:A:81:VAL:H	6	7.86
(4,38)	1:A:26:CYS:CB	1:A:85:LYS:H	12	7.84
(4,122)	1:A:56:PHE:CB	1:A:33:LYS:H	5	7.84
(4,56)	1:A:49:GLN:CB	1:A:28:SER:H	9	7.83
(4,176)	1:A:75:SER:CB	1:A:42:THR:H	12	7.83
(1,332)	1:A:86:CYS:CB	1:A:19:GLY:H	15	7.83
(4,239)	1:A:86:CYS:CB	1:A:101:ASP:H	15	7.82
(4,172)	1:A:75:SER:CB	1:A:38:PHE:H	16	7.82
(1,307)	1:A:26:CYS:CB	1:A:94:GLU:H	2	7.82
(4,45)	1:A:26:CYS:CB	1:A:108:SER:H	5	7.81
(4,10)	1:A:26:CYS:CB	1:A:49:GLN:H	15	7.81
(4,124)	1:A:56:PHE:CB	1:A:35:VAL:H	2	7.8

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,124)	1:A:56:PHE:CB	1:A:35:VAL:H	11	7.8
(4,44)	1:A:26:CYS:CB	1:A:107:ARG:H	16	7.79
(4,42)	1:A:26:CYS:CB	1:A:105:ASP:H	6	7.79
(4,228)	1:A:86:CYS:CB	1:A:62:TRP:H	6	7.79
(4,228)	1:A:86:CYS:CB	1:A:62:TRP:H	11	7.79
(4,179)	1:A:75:SER:CB	1:A:46:PHE:H	11	7.79
(4,194)	1:A:75:SER:CB	1:A:103:SER:H	11	7.78
(4,142)	1:A:56:PHE:CB	1:A:81:VAL:H	13	7.78
(4,228)	1:A:86:CYS:CB	1:A:62:TRP:H	3	7.77
(1,314)	1:A:49:GLN:CB	1:A:71:GLY:H	13	7.77
(1,304)	1:A:26:CYS:CB	1:A:90:TRP:H	2	7.77
(4,68)	1:A:49:GLN:CB	1:A:69:VAL:H	16	7.76
(4,240)	1:A:86:CYS:CB	1:A:102:ARG:H	20	7.76
(1,305)	1:A:26:CYS:CB	1:A:91:LEU:H	4	7.76
(4,228)	1:A:86:CYS:CB	1:A:62:TRP:H	17	7.75
(4,68)	1:A:49:GLN:CB	1:A:69:VAL:H	19	7.74
(4,209)	1:A:86:CYS:CB	1:A:37:THR:H	5	7.74
(4,142)	1:A:56:PHE:CB	1:A:81:VAL:H	9	7.74
(4,124)	1:A:56:PHE:CB	1:A:35:VAL:H	8	7.74
(4,69)	1:A:49:GLN:CB	1:A:72:SER:H	14	7.73
(4,45)	1:A:26:CYS:CB	1:A:108:SER:H	19	7.73
(4,41)	1:A:26:CYS:CB	1:A:104:THR:H	4	7.73
(4,238)	1:A:86:CYS:CB	1:A:98:LEU:H	12	7.73
(4,209)	1:A:86:CYS:CB	1:A:37:THR:H	8	7.73
(4,142)	1:A:56:PHE:CB	1:A:81:VAL:H	7	7.73
(4,197)	1:A:86:CYS:CB	1:A:17:HIS:H	14	7.72
(4,167)	1:A:75:SER:CB	1:A:30:ALA:H	14	7.72
(1,307)	1:A:26:CYS:CB	1:A:94:GLU:H	5	7.72
(4,9)	1:A:26:CYS:CB	1:A:48:LEU:H	18	7.71
(4,211)	1:A:86:CYS:CB	1:A:39:VAL:H	1	7.71
(4,168)	1:A:75:SER:CB	1:A:34:GLY:H	8	7.7
(4,238)	1:A:86:CYS:CB	1:A:98:LEU:H	9	7.69
(4,228)	1:A:86:CYS:CB	1:A:62:TRP:H	2	7.69
(4,228)	1:A:86:CYS:CB	1:A:62:TRP:H	4	7.69
(4,212)	1:A:86:CYS:CB	1:A:40:THR:H	4	7.69
(4,171)	1:A:75:SER:CB	1:A:37:THR:H	19	7.69
(4,142)	1:A:56:PHE:CB	1:A:81:VAL:H	18	7.69
(4,124)	1:A:56:PHE:CB	1:A:35:VAL:H	12	7.69
(4,124)	1:A:56:PHE:CB	1:A:35:VAL:H	13	7.69
(4,11)	1:A:26:CYS:CB	1:A:50:MET:H	5	7.69
(4,11)	1:A:26:CYS:CB	1:A:50:MET:H	20	7.69
(4,211)	1:A:86:CYS:CB	1:A:39:VAL:H	2	7.68

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,211)	1:A:86:CYS:CB	1:A:39:VAL:H	14	7.68
(4,176)	1:A:75:SER:CB	1:A:42:THR:H	1	7.68
(4,169)	1:A:75:SER:CB	1:A:35:VAL:H	5	7.68
(4,143)	1:A:56:PHE:CB	1:A:82:GLU:H	14	7.68
(4,241)	1:A:86:CYS:CB	1:A:103:SER:H	7	7.67
(4,197)	1:A:86:CYS:CB	1:A:17:HIS:H	12	7.67
(4,196)	1:A:86:CYS:CB	1:A:16:LYS:H	7	7.67
(4,175)	1:A:75:SER:CB	1:A:41:GLY:H	12	7.67
(4,142)	1:A:56:PHE:CB	1:A:81:VAL:H	8	7.67
(4,37)	1:A:26:CYS:CB	1:A:83:SER:H	12	7.66
(4,122)	1:A:56:PHE:CB	1:A:33:LYS:H	19	7.66
(4,9)	1:A:26:CYS:CB	1:A:48:LEU:H	20	7.65
(4,228)	1:A:86:CYS:CB	1:A:62:TRP:H	1	7.65
(4,228)	1:A:86:CYS:CB	1:A:62:TRP:H	7	7.65
(4,177)	1:A:75:SER:CB	1:A:43:GLY:H	11	7.65
(4,143)	1:A:56:PHE:CB	1:A:82:GLU:H	5	7.64
(4,142)	1:A:56:PHE:CB	1:A:81:VAL:H	17	7.64
(1,307)	1:A:26:CYS:CB	1:A:94:GLU:H	1	7.64
(4,228)	1:A:86:CYS:CB	1:A:62:TRP:H	5	7.63
(4,123)	1:A:56:PHE:CB	1:A:34:GLY:H	14	7.63
(4,197)	1:A:86:CYS:CB	1:A:17:HIS:H	16	7.62
(1,332)	1:A:86:CYS:CB	1:A:19:GLY:H	14	7.62
(1,313)	1:A:49:GLN:CB	1:A:70:ALA:H	7	7.62
(4,36)	1:A:26:CYS:CB	1:A:81:VAL:H	6	7.61
(4,142)	1:A:56:PHE:CB	1:A:81:VAL:H	3	7.61
(4,124)	1:A:56:PHE:CB	1:A:35:VAL:H	7	7.61
(4,69)	1:A:49:GLN:CB	1:A:72:SER:H	6	7.6
(4,238)	1:A:86:CYS:CB	1:A:98:LEU:H	19	7.59
(4,175)	1:A:75:SER:CB	1:A:41:GLY:H	8	7.59
(4,142)	1:A:56:PHE:CB	1:A:81:VAL:H	2	7.59
(4,142)	1:A:56:PHE:CB	1:A:81:VAL:H	12	7.59
(4,44)	1:A:26:CYS:CB	1:A:107:ARG:H	1	7.58
(4,177)	1:A:75:SER:CB	1:A:43:GLY:H	14	7.58
(4,142)	1:A:56:PHE:CB	1:A:81:VAL:H	1	7.58
(1,334)	1:A:86:CYS:CB	1:A:21:GLY:H	19	7.58
(1,314)	1:A:49:GLN:CB	1:A:71:GLY:H	15	7.58
(4,236)	1:A:86:CYS:CB	1:A:96:GLY:H	11	7.57
(4,228)	1:A:86:CYS:CB	1:A:62:TRP:H	9	7.57
(4,228)	1:A:86:CYS:CB	1:A:62:TRP:H	15	7.57
(4,210)	1:A:86:CYS:CB	1:A:38:PHE:H	16	7.57
(4,142)	1:A:56:PHE:CB	1:A:81:VAL:H	11	7.57
(1,308)	1:A:26:CYS:CB	1:A:95:THR:H	9	7.57

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,228)	1:A:86:CYS:CB	1:A:62:TRP:H	18	7.56
(4,124)	1:A:56:PHE:CB	1:A:35:VAL:H	10	7.56
(4,123)	1:A:56:PHE:CB	1:A:34:GLY:H	6	7.56
(4,69)	1:A:49:GLN:CB	1:A:72:SER:H	9	7.54
(4,175)	1:A:75:SER:CB	1:A:41:GLY:H	13	7.53
(1,334)	1:A:86:CYS:CB	1:A:21:GLY:H	8	7.53
(1,306)	1:A:26:CYS:CB	1:A:93:LEU:H	18	7.53
(4,56)	1:A:49:GLN:CB	1:A:28:SER:H	12	7.52
(4,228)	1:A:86:CYS:CB	1:A:62:TRP:H	20	7.51
(4,211)	1:A:86:CYS:CB	1:A:39:VAL:H	16	7.51
(4,228)	1:A:86:CYS:CB	1:A:62:TRP:H	12	7.5
(1,312)	1:A:49:GLN:CB	1:A:66:VAL:H	10	7.5
(1,312)	1:A:49:GLN:CB	1:A:66:VAL:H	16	7.5
(1,306)	1:A:26:CYS:CB	1:A:93:LEU:H	8	7.5
(4,9)	1:A:26:CYS:CB	1:A:48:LEU:H	5	7.49
(1,313)	1:A:49:GLN:CB	1:A:70:ALA:H	4	7.49
(4,142)	1:A:56:PHE:CB	1:A:81:VAL:H	5	7.48
(4,124)	1:A:56:PHE:CB	1:A:35:VAL:H	1	7.48
(4,70)	1:A:49:GLN:CB	1:A:74:VAL:H	2	7.46
(4,70)	1:A:49:GLN:CB	1:A:74:VAL:H	18	7.46
(4,240)	1:A:86:CYS:CB	1:A:102:ARG:H	14	7.46
(4,236)	1:A:86:CYS:CB	1:A:96:GLY:H	6	7.46
(4,228)	1:A:86:CYS:CB	1:A:62:TRP:H	14	7.46
(4,196)	1:A:86:CYS:CB	1:A:16:LYS:H	12	7.46
(1,314)	1:A:49:GLN:CB	1:A:71:GLY:H	7	7.46
(4,236)	1:A:86:CYS:CB	1:A:96:GLY:H	14	7.45
(4,240)	1:A:86:CYS:CB	1:A:102:ARG:H	12	7.44
(4,8)	1:A:26:CYS:CB	1:A:47:GLY:H	8	7.43
(4,239)	1:A:86:CYS:CB	1:A:101:ASP:H	6	7.43
(4,195)	1:A:86:CYS:CB	1:A:15:ALA:H	14	7.43
(4,143)	1:A:56:PHE:CB	1:A:82:GLU:H	19	7.43
(1,304)	1:A:26:CYS:CB	1:A:90:TRP:H	3	7.43
(1,304)	1:A:26:CYS:CB	1:A:90:TRP:H	11	7.43
(4,68)	1:A:49:GLN:CB	1:A:69:VAL:H	5	7.42
(4,39)	1:A:26:CYS:CB	1:A:88:ASN:H	18	7.42
(4,176)	1:A:75:SER:CB	1:A:42:THR:H	11	7.41
(4,236)	1:A:86:CYS:CB	1:A:96:GLY:H	19	7.4
(4,142)	1:A:56:PHE:CB	1:A:81:VAL:H	14	7.4
(4,9)	1:A:26:CYS:CB	1:A:48:LEU:H	19	7.39
(4,45)	1:A:26:CYS:CB	1:A:108:SER:H	17	7.39
(4,172)	1:A:75:SER:CB	1:A:38:PHE:H	12	7.39
(4,172)	1:A:75:SER:CB	1:A:38:PHE:H	13	7.39

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,143)	1:A:56:PHE:CB	1:A:82:GLU:H	16	7.39
(1,304)	1:A:26:CYS:CB	1:A:90:TRP:H	1	7.39
(4,43)	1:A:26:CYS:CB	1:A:106:GLN:H	9	7.38
(4,238)	1:A:86:CYS:CB	1:A:98:LEU:H	8	7.37
(4,211)	1:A:86:CYS:CB	1:A:39:VAL:H	19	7.37
(4,68)	1:A:49:GLN:CB	1:A:69:VAL:H	14	7.36
(4,56)	1:A:49:GLN:CB	1:A:28:SER:H	1	7.36
(4,209)	1:A:86:CYS:CB	1:A:37:THR:H	19	7.35
(1,311)	1:A:49:GLN:CB	1:A:65:LEU:H	11	7.35
(4,34)	1:A:26:CYS:CB	1:A:79:THR:H	20	7.34
(4,175)	1:A:75:SER:CB	1:A:41:GLY:H	9	7.34
(4,176)	1:A:75:SER:CB	1:A:42:THR:H	20	7.33
(1,307)	1:A:26:CYS:CB	1:A:94:GLU:H	3	7.33
(4,209)	1:A:86:CYS:CB	1:A:37:THR:H	16	7.32
(4,209)	1:A:86:CYS:CB	1:A:37:THR:H	20	7.32
(4,176)	1:A:75:SER:CB	1:A:42:THR:H	18	7.32
(4,172)	1:A:75:SER:CB	1:A:38:PHE:H	8	7.32
(4,237)	1:A:86:CYS:CB	1:A:97:GLN:H	8	7.31
(4,210)	1:A:86:CYS:CB	1:A:38:PHE:H	19	7.31
(4,209)	1:A:86:CYS:CB	1:A:37:THR:H	15	7.31
(4,175)	1:A:75:SER:CB	1:A:41:GLY:H	3	7.31
(4,172)	1:A:75:SER:CB	1:A:38:PHE:H	19	7.31
(4,44)	1:A:26:CYS:CB	1:A:107:ARG:H	4	7.29
(4,143)	1:A:56:PHE:CB	1:A:82:GLU:H	4	7.29
(4,209)	1:A:86:CYS:CB	1:A:37:THR:H	9	7.28
(4,175)	1:A:75:SER:CB	1:A:41:GLY:H	1	7.28
(4,172)	1:A:75:SER:CB	1:A:38:PHE:H	7	7.28
(4,168)	1:A:75:SER:CB	1:A:34:GLY:H	11	7.28
(4,167)	1:A:75:SER:CB	1:A:30:ALA:H	20	7.28
(1,307)	1:A:26:CYS:CB	1:A:94:GLU:H	4	7.28
(4,68)	1:A:49:GLN:CB	1:A:69:VAL:H	17	7.27
(4,168)	1:A:75:SER:CB	1:A:34:GLY:H	18	7.27
(4,142)	1:A:56:PHE:CB	1:A:81:VAL:H	16	7.27
(1,306)	1:A:26:CYS:CB	1:A:93:LEU:H	7	7.27
(1,304)	1:A:26:CYS:CB	1:A:90:TRP:H	4	7.27
(4,41)	1:A:26:CYS:CB	1:A:104:THR:H	14	7.26
(4,39)	1:A:26:CYS:CB	1:A:88:ASN:H	2	7.26
(4,142)	1:A:56:PHE:CB	1:A:81:VAL:H	19	7.26
(4,56)	1:A:49:GLN:CB	1:A:28:SER:H	11	7.25
(4,142)	1:A:56:PHE:CB	1:A:81:VAL:H	4	7.25
(1,311)	1:A:49:GLN:CB	1:A:65:LEU:H	20	7.25
(4,40)	1:A:26:CYS:CB	1:A:103:SER:H	2	7.24

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,209)	1:A:86:CYS:CB	1:A:37:THR:H	2	7.23
(4,175)	1:A:75:SER:CB	1:A:41:GLY:H	7	7.23
(4,168)	1:A:75:SER:CB	1:A:34:GLY:H	4	7.22
(4,142)	1:A:56:PHE:CB	1:A:81:VAL:H	15	7.22
(4,69)	1:A:49:GLN:CB	1:A:72:SER:H	3	7.21
(4,238)	1:A:86:CYS:CB	1:A:98:LEU:H	7	7.21
(4,124)	1:A:56:PHE:CB	1:A:35:VAL:H	5	7.21
(4,70)	1:A:49:GLN:CB	1:A:74:VAL:H	10	7.2
(4,236)	1:A:86:CYS:CB	1:A:96:GLY:H	10	7.2
(1,313)	1:A:49:GLN:CB	1:A:70:ALA:H	10	7.2
(1,306)	1:A:26:CYS:CB	1:A:93:LEU:H	1	7.19
(4,56)	1:A:49:GLN:CB	1:A:28:SER:H	5	7.18
(4,34)	1:A:26:CYS:CB	1:A:79:THR:H	11	7.17
(4,241)	1:A:86:CYS:CB	1:A:103:SER:H	1	7.17
(4,237)	1:A:86:CYS:CB	1:A:97:GLN:H	15	7.17
(4,236)	1:A:86:CYS:CB	1:A:96:GLY:H	9	7.17
(4,179)	1:A:75:SER:CB	1:A:46:PHE:H	2	7.17
(4,173)	1:A:75:SER:CB	1:A:39:VAL:H	5	7.17
(4,70)	1:A:49:GLN:CB	1:A:74:VAL:H	4	7.16
(4,176)	1:A:75:SER:CB	1:A:42:THR:H	6	7.16
(1,312)	1:A:49:GLN:CB	1:A:66:VAL:H	19	7.16
(4,9)	1:A:26:CYS:CB	1:A:48:LEU:H	16	7.15
(4,38)	1:A:26:CYS:CB	1:A:85:LYS:H	5	7.15
(4,35)	1:A:26:CYS:CB	1:A:80:ARG:H	15	7.15
(4,172)	1:A:75:SER:CB	1:A:38:PHE:H	1	7.15
(4,167)	1:A:75:SER:CB	1:A:30:ALA:H	6	7.15
(4,38)	1:A:26:CYS:CB	1:A:85:LYS:H	9	7.14
(4,236)	1:A:86:CYS:CB	1:A:96:GLY:H	13	7.14
(4,176)	1:A:75:SER:CB	1:A:42:THR:H	7	7.14
(4,37)	1:A:26:CYS:CB	1:A:83:SER:H	5	7.13
(4,240)	1:A:86:CYS:CB	1:A:102:ARG:H	15	7.13
(4,238)	1:A:86:CYS:CB	1:A:98:LEU:H	10	7.13
(4,209)	1:A:86:CYS:CB	1:A:37:THR:H	13	7.13
(4,169)	1:A:75:SER:CB	1:A:35:VAL:H	8	7.13
(4,209)	1:A:86:CYS:CB	1:A:37:THR:H	12	7.12
(4,175)	1:A:75:SER:CB	1:A:41:GLY:H	17	7.12
(1,313)	1:A:49:GLN:CB	1:A:70:ALA:H	2	7.12
(1,311)	1:A:49:GLN:CB	1:A:65:LEU:H	10	7.12
(1,304)	1:A:26:CYS:CB	1:A:90:TRP:H	17	7.12
(4,56)	1:A:49:GLN:CB	1:A:28:SER:H	8	7.11
(4,177)	1:A:75:SER:CB	1:A:43:GLY:H	6	7.11
(4,8)	1:A:26:CYS:CB	1:A:47:GLY:H	9	7.1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,237)	1:A:86:CYS:CB	1:A:97:GLN:H	6	7.1
(4,196)	1:A:86:CYS:CB	1:A:16:LYS:H	13	7.1
(4,171)	1:A:75:SER:CB	1:A:37:THR:H	5	7.1
(1,306)	1:A:26:CYS:CB	1:A:93:LEU:H	13	7.1
(4,209)	1:A:86:CYS:CB	1:A:37:THR:H	7	7.09
(4,11)	1:A:26:CYS:CB	1:A:50:MET:H	15	7.08
(1,339)	1:A:86:CYS:CB	1:A:94:GLU:H	8	7.08
(1,306)	1:A:26:CYS:CB	1:A:93:LEU:H	15	7.08
(4,8)	1:A:26:CYS:CB	1:A:47:GLY:H	13	7.07
(4,240)	1:A:86:CYS:CB	1:A:102:ARG:H	5	7.07
(4,236)	1:A:86:CYS:CB	1:A:96:GLY:H	2	7.07
(4,236)	1:A:86:CYS:CB	1:A:96:GLY:H	16	7.07
(1,314)	1:A:49:GLN:CB	1:A:71:GLY:H	2	7.06
(4,56)	1:A:49:GLN:CB	1:A:28:SER:H	14	7.04
(4,236)	1:A:86:CYS:CB	1:A:96:GLY:H	8	7.03
(1,339)	1:A:86:CYS:CB	1:A:94:GLU:H	6	7.03
(4,236)	1:A:86:CYS:CB	1:A:96:GLY:H	4	7.02
(4,175)	1:A:75:SER:CB	1:A:41:GLY:H	11	7.01
(4,172)	1:A:75:SER:CB	1:A:38:PHE:H	11	7.01
(1,305)	1:A:26:CYS:CB	1:A:91:LEU:H	8	7.01
(4,69)	1:A:49:GLN:CB	1:A:72:SER:H	12	7.0
(4,56)	1:A:49:GLN:CB	1:A:28:SER:H	7	7.0
(4,237)	1:A:86:CYS:CB	1:A:97:GLN:H	5	7.0
(1,313)	1:A:49:GLN:CB	1:A:70:ALA:H	18	7.0
(4,38)	1:A:26:CYS:CB	1:A:85:LYS:H	8	6.99
(4,237)	1:A:86:CYS:CB	1:A:97:GLN:H	11	6.99
(1,334)	1:A:86:CYS:CB	1:A:21:GLY:H	16	6.99
(1,304)	1:A:26:CYS:CB	1:A:90:TRP:H	7	6.99
(4,36)	1:A:26:CYS:CB	1:A:81:VAL:H	20	6.98
(4,237)	1:A:86:CYS:CB	1:A:97:GLN:H	4	6.98
(1,307)	1:A:26:CYS:CB	1:A:94:GLU:H	13	6.98
(4,237)	1:A:86:CYS:CB	1:A:97:GLN:H	13	6.97
(1,339)	1:A:86:CYS:CB	1:A:94:GLU:H	11	6.97
(1,305)	1:A:26:CYS:CB	1:A:91:LEU:H	11	6.96
(4,240)	1:A:86:CYS:CB	1:A:102:ARG:H	9	6.95
(4,174)	1:A:75:SER:CB	1:A:40:THR:H	16	6.95
(4,56)	1:A:49:GLN:CB	1:A:28:SER:H	13	6.94
(4,39)	1:A:26:CYS:CB	1:A:88:ASN:H	3	6.94
(4,241)	1:A:86:CYS:CB	1:A:103:SER:H	14	6.94
(1,339)	1:A:86:CYS:CB	1:A:94:GLU:H	9	6.94
(1,307)	1:A:26:CYS:CB	1:A:94:GLU:H	8	6.94
(1,307)	1:A:26:CYS:CB	1:A:94:GLU:H	17	6.94

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,69)	1:A:49:GLN:CB	1:A:72:SER:H	1	6.93
(4,237)	1:A:86:CYS:CB	1:A:97:GLN:H	14	6.93
(4,237)	1:A:86:CYS:CB	1:A:97:GLN:H	18	6.93
(4,8)	1:A:26:CYS:CB	1:A:47:GLY:H	2	6.92
(4,236)	1:A:86:CYS:CB	1:A:96:GLY:H	5	6.92
(4,178)	1:A:75:SER:CB	1:A:44:MET:H	10	6.92
(4,125)	1:A:56:PHE:CB	1:A:36:PHE:H	15	6.92
(4,172)	1:A:75:SER:CB	1:A:38:PHE:H	2	6.9
(4,179)	1:A:75:SER:CB	1:A:46:PHE:H	15	6.89
(1,306)	1:A:26:CYS:CB	1:A:93:LEU:H	20	6.89
(1,304)	1:A:26:CYS:CB	1:A:90:TRP:H	20	6.89
(4,163)	1:A:56:PHE:CB	1:A:108:SER:H	5	6.88
(4,142)	1:A:56:PHE:CB	1:A:81:VAL:H	20	6.88
(1,304)	1:A:26:CYS:CB	1:A:90:TRP:H	19	6.88
(4,9)	1:A:26:CYS:CB	1:A:48:LEU:H	15	6.87
(4,169)	1:A:75:SER:CB	1:A:35:VAL:H	13	6.87
(4,236)	1:A:86:CYS:CB	1:A:96:GLY:H	7	6.86
(4,56)	1:A:49:GLN:CB	1:A:28:SER:H	18	6.85
(1,311)	1:A:49:GLN:CB	1:A:65:LEU:H	16	6.85
(1,307)	1:A:26:CYS:CB	1:A:94:GLU:H	7	6.85
(4,39)	1:A:26:CYS:CB	1:A:88:ASN:H	1	6.84
(4,237)	1:A:86:CYS:CB	1:A:97:GLN:H	2	6.84
(4,211)	1:A:86:CYS:CB	1:A:39:VAL:H	3	6.84
(1,339)	1:A:86:CYS:CB	1:A:94:GLU:H	16	6.84
(1,306)	1:A:26:CYS:CB	1:A:93:LEU:H	5	6.84
(4,237)	1:A:86:CYS:CB	1:A:97:GLN:H	1	6.83
(4,203)	1:A:86:CYS:CB	1:A:31:PHE:H	10	6.83
(4,176)	1:A:75:SER:CB	1:A:42:THR:H	8	6.83
(4,124)	1:A:56:PHE:CB	1:A:35:VAL:H	4	6.83
(1,311)	1:A:49:GLN:CB	1:A:65:LEU:H	19	6.83
(1,304)	1:A:26:CYS:CB	1:A:90:TRP:H	16	6.83
(4,56)	1:A:49:GLN:CB	1:A:28:SER:H	3	6.82
(4,210)	1:A:86:CYS:CB	1:A:38:PHE:H	9	6.82
(1,314)	1:A:49:GLN:CB	1:A:71:GLY:H	4	6.82
(1,312)	1:A:49:GLN:CB	1:A:66:VAL:H	14	6.82
(1,339)	1:A:86:CYS:CB	1:A:94:GLU:H	4	6.81
(4,236)	1:A:86:CYS:CB	1:A:96:GLY:H	3	6.8
(4,209)	1:A:86:CYS:CB	1:A:37:THR:H	1	6.8
(4,175)	1:A:75:SER:CB	1:A:41:GLY:H	2	6.8
(1,339)	1:A:86:CYS:CB	1:A:94:GLU:H	10	6.8
(4,237)	1:A:86:CYS:CB	1:A:97:GLN:H	9	6.79
(4,236)	1:A:86:CYS:CB	1:A:96:GLY:H	17	6.79

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,304)	1:A:26:CYS:CB	1:A:90:TRP:H	15	6.79
(4,237)	1:A:86:CYS:CB	1:A:97:GLN:H	3	6.78
(1,339)	1:A:86:CYS:CB	1:A:94:GLU:H	13	6.78
(1,311)	1:A:49:GLN:CB	1:A:65:LEU:H	15	6.78
(4,240)	1:A:86:CYS:CB	1:A:102:ARG:H	2	6.77
(4,56)	1:A:49:GLN:CB	1:A:28:SER:H	6	6.76
(4,176)	1:A:75:SER:CB	1:A:42:THR:H	13	6.76
(4,169)	1:A:75:SER:CB	1:A:35:VAL:H	12	6.76
(4,56)	1:A:49:GLN:CB	1:A:28:SER:H	19	6.75
(4,237)	1:A:86:CYS:CB	1:A:97:GLN:H	10	6.74
(4,236)	1:A:86:CYS:CB	1:A:96:GLY:H	18	6.74
(4,211)	1:A:86:CYS:CB	1:A:39:VAL:H	17	6.74
(4,161)	1:A:56:PHE:CB	1:A:106:GLN:H	11	6.74
(1,339)	1:A:86:CYS:CB	1:A:94:GLU:H	2	6.74
(1,339)	1:A:86:CYS:CB	1:A:94:GLU:H	15	6.73
(1,304)	1:A:26:CYS:CB	1:A:90:TRP:H	13	6.73
(4,40)	1:A:26:CYS:CB	1:A:103:SER:H	5	6.72
(4,39)	1:A:26:CYS:CB	1:A:88:ASN:H	17	6.72
(4,237)	1:A:86:CYS:CB	1:A:97:GLN:H	19	6.72
(4,236)	1:A:86:CYS:CB	1:A:96:GLY:H	1	6.72
(4,210)	1:A:86:CYS:CB	1:A:38:PHE:H	6	6.72
(4,209)	1:A:86:CYS:CB	1:A:37:THR:H	3	6.72
(4,193)	1:A:75:SER:CB	1:A:102:ARG:H	11	6.72
(4,43)	1:A:26:CYS:CB	1:A:106:GLN:H	15	6.71
(4,197)	1:A:86:CYS:CB	1:A:17:HIS:H	20	6.7
(1,339)	1:A:86:CYS:CB	1:A:94:GLU:H	5	6.7
(1,339)	1:A:86:CYS:CB	1:A:94:GLU:H	7	6.7
(4,56)	1:A:49:GLN:CB	1:A:28:SER:H	4	6.69
(4,237)	1:A:86:CYS:CB	1:A:97:GLN:H	17	6.68
(1,339)	1:A:86:CYS:CB	1:A:94:GLU:H	3	6.68
(1,312)	1:A:49:GLN:CB	1:A:66:VAL:H	8	6.68
(1,306)	1:A:26:CYS:CB	1:A:93:LEU:H	3	6.68
(1,304)	1:A:26:CYS:CB	1:A:90:TRP:H	12	6.68
(4,39)	1:A:26:CYS:CB	1:A:88:ASN:H	16	6.67
(4,175)	1:A:75:SER:CB	1:A:41:GLY:H	18	6.67
(1,339)	1:A:86:CYS:CB	1:A:94:GLU:H	19	6.67
(1,306)	1:A:26:CYS:CB	1:A:93:LEU:H	12	6.67
(4,39)	1:A:26:CYS:CB	1:A:88:ASN:H	7	6.66
(4,175)	1:A:75:SER:CB	1:A:41:GLY:H	20	6.66
(4,43)	1:A:26:CYS:CB	1:A:106:GLN:H	1	6.65
(4,177)	1:A:75:SER:CB	1:A:43:GLY:H	15	6.65
(4,171)	1:A:75:SER:CB	1:A:37:THR:H	18	6.65

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,237)	1:A:86:CYS:CB	1:A:97:GLN:H	16	6.64
(4,174)	1:A:75:SER:CB	1:A:40:THR:H	14	6.64
(1,308)	1:A:26:CYS:CB	1:A:95:THR:H	6	6.64
(4,39)	1:A:26:CYS:CB	1:A:88:ASN:H	19	6.63
(1,304)	1:A:26:CYS:CB	1:A:90:TRP:H	5	6.63
(4,174)	1:A:75:SER:CB	1:A:40:THR:H	5	6.62
(1,307)	1:A:26:CYS:CB	1:A:94:GLU:H	12	6.62
(4,239)	1:A:86:CYS:CB	1:A:101:ASP:H	9	6.61
(4,236)	1:A:86:CYS:CB	1:A:96:GLY:H	12	6.61
(4,168)	1:A:75:SER:CB	1:A:34:GLY:H	3	6.61
(1,308)	1:A:26:CYS:CB	1:A:95:THR:H	14	6.61
(4,8)	1:A:26:CYS:CB	1:A:47:GLY:H	4	6.6
(4,168)	1:A:75:SER:CB	1:A:34:GLY:H	10	6.6
(4,8)	1:A:26:CYS:CB	1:A:47:GLY:H	17	6.59
(4,68)	1:A:49:GLN:CB	1:A:69:VAL:H	6	6.58
(4,56)	1:A:49:GLN:CB	1:A:28:SER:H	2	6.58
(4,237)	1:A:86:CYS:CB	1:A:97:GLN:H	7	6.58
(4,237)	1:A:86:CYS:CB	1:A:97:GLN:H	20	6.58
(4,169)	1:A:75:SER:CB	1:A:35:VAL:H	7	6.57
(4,161)	1:A:56:PHE:CB	1:A:106:GLN:H	8	6.57
(4,68)	1:A:49:GLN:CB	1:A:69:VAL:H	3	6.56
(4,169)	1:A:75:SER:CB	1:A:35:VAL:H	20	6.55
(1,307)	1:A:26:CYS:CB	1:A:94:GLU:H	16	6.55
(4,68)	1:A:49:GLN:CB	1:A:69:VAL:H	9	6.54
(1,339)	1:A:86:CYS:CB	1:A:94:GLU:H	14	6.54
(1,339)	1:A:86:CYS:CB	1:A:94:GLU:H	18	6.54
(4,69)	1:A:49:GLN:CB	1:A:72:SER:H	18	6.53
(1,339)	1:A:86:CYS:CB	1:A:94:GLU:H	17	6.52
(4,169)	1:A:75:SER:CB	1:A:35:VAL:H	10	6.51
(4,44)	1:A:26:CYS:CB	1:A:107:ARG:H	17	6.5
(4,237)	1:A:86:CYS:CB	1:A:97:GLN:H	12	6.5
(4,236)	1:A:86:CYS:CB	1:A:96:GLY:H	15	6.5
(1,339)	1:A:86:CYS:CB	1:A:94:GLU:H	1	6.5
(4,171)	1:A:75:SER:CB	1:A:37:THR:H	13	6.49
(4,169)	1:A:75:SER:CB	1:A:35:VAL:H	1	6.49
(4,167)	1:A:75:SER:CB	1:A:30:ALA:H	15	6.49
(4,8)	1:A:26:CYS:CB	1:A:47:GLY:H	7	6.48
(4,169)	1:A:75:SER:CB	1:A:35:VAL:H	11	6.48
(1,339)	1:A:86:CYS:CB	1:A:94:GLU:H	20	6.48
(4,43)	1:A:26:CYS:CB	1:A:106:GLN:H	17	6.47
(4,171)	1:A:75:SER:CB	1:A:37:THR:H	7	6.47
(4,169)	1:A:75:SER:CB	1:A:35:VAL:H	16	6.47

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,174)	1:A:75:SER:CB	1:A:40:THR:H	19	6.46
(4,177)	1:A:75:SER:CB	1:A:43:GLY:H	4	6.44
(1,339)	1:A:86:CYS:CB	1:A:94:GLU:H	12	6.44
(1,306)	1:A:26:CYS:CB	1:A:93:LEU:H	16	6.44
(4,39)	1:A:26:CYS:CB	1:A:88:ASN:H	12	6.43
(4,141)	1:A:56:PHE:CB	1:A:80:ARG:H	12	6.43
(4,124)	1:A:56:PHE:CB	1:A:35:VAL:H	18	6.43
(4,37)	1:A:26:CYS:CB	1:A:83:SER:H	8	6.42
(4,240)	1:A:86:CYS:CB	1:A:102:ARG:H	16	6.41
(4,171)	1:A:75:SER:CB	1:A:37:THR:H	12	6.4
(4,169)	1:A:75:SER:CB	1:A:35:VAL:H	2	6.4
(1,307)	1:A:26:CYS:CB	1:A:94:GLU:H	19	6.4
(4,68)	1:A:49:GLN:CB	1:A:69:VAL:H	12	6.39
(4,171)	1:A:75:SER:CB	1:A:37:THR:H	2	6.39
(4,56)	1:A:49:GLN:CB	1:A:28:SER:H	10	6.38
(4,39)	1:A:26:CYS:CB	1:A:88:ASN:H	13	6.38
(1,311)	1:A:49:GLN:CB	1:A:65:LEU:H	14	6.38
(4,56)	1:A:49:GLN:CB	1:A:28:SER:H	16	6.37
(4,34)	1:A:26:CYS:CB	1:A:79:THR:H	15	6.37
(4,141)	1:A:56:PHE:CB	1:A:80:ARG:H	18	6.37
(1,306)	1:A:26:CYS:CB	1:A:93:LEU:H	19	6.37
(4,239)	1:A:86:CYS:CB	1:A:101:ASP:H	2	6.36
(4,209)	1:A:86:CYS:CB	1:A:37:THR:H	17	6.36
(4,208)	1:A:86:CYS:CB	1:A:36:PHE:H	6	6.35
(4,141)	1:A:56:PHE:CB	1:A:80:ARG:H	9	6.35
(4,124)	1:A:56:PHE:CB	1:A:35:VAL:H	3	6.35
(1,312)	1:A:49:GLN:CB	1:A:66:VAL:H	17	6.35
(4,34)	1:A:26:CYS:CB	1:A:79:THR:H	10	6.33
(4,141)	1:A:56:PHE:CB	1:A:80:ARG:H	13	6.33
(4,45)	1:A:26:CYS:CB	1:A:108:SER:H	7	6.32
(4,124)	1:A:56:PHE:CB	1:A:35:VAL:H	16	6.32
(4,68)	1:A:49:GLN:CB	1:A:69:VAL:H	1	6.31
(4,180)	1:A:75:SER:CB	1:A:47:GLY:H	10	6.31
(4,141)	1:A:56:PHE:CB	1:A:80:ARG:H	8	6.31
(1,312)	1:A:49:GLN:CB	1:A:66:VAL:H	5	6.31
(4,208)	1:A:86:CYS:CB	1:A:36:PHE:H	9	6.3
(4,41)	1:A:26:CYS:CB	1:A:104:THR:H	17	6.29
(4,209)	1:A:86:CYS:CB	1:A:37:THR:H	6	6.29
(4,141)	1:A:56:PHE:CB	1:A:80:ARG:H	6	6.29
(4,141)	1:A:56:PHE:CB	1:A:80:ARG:H	17	6.29
(1,307)	1:A:26:CYS:CB	1:A:94:GLU:H	9	6.29
(4,174)	1:A:75:SER:CB	1:A:40:THR:H	6	6.28

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,173)	1:A:75:SER:CB	1:A:39:VAL:H	15	6.28
(4,141)	1:A:56:PHE:CB	1:A:80:ARG:H	7	6.28
(4,168)	1:A:75:SER:CB	1:A:34:GLY:H	17	6.27
(4,141)	1:A:56:PHE:CB	1:A:80:ARG:H	5	6.27
(4,162)	1:A:56:PHE:CB	1:A:107:ARG:H	11	6.24
(4,175)	1:A:75:SER:CB	1:A:41:GLY:H	14	6.23
(1,304)	1:A:26:CYS:CB	1:A:90:TRP:H	10	6.23
(4,8)	1:A:26:CYS:CB	1:A:47:GLY:H	3	6.21
(4,43)	1:A:26:CYS:CB	1:A:106:GLN:H	5	6.2
(4,240)	1:A:86:CYS:CB	1:A:102:ARG:H	17	6.2
(4,141)	1:A:56:PHE:CB	1:A:80:ARG:H	1	6.2
(4,39)	1:A:26:CYS:CB	1:A:88:ASN:H	4	6.19
(4,172)	1:A:75:SER:CB	1:A:38:PHE:H	20	6.19
(4,173)	1:A:75:SER:CB	1:A:39:VAL:H	8	6.18
(4,171)	1:A:75:SER:CB	1:A:37:THR:H	1	6.18
(4,169)	1:A:75:SER:CB	1:A:35:VAL:H	15	6.18
(4,229)	1:A:86:CYS:CB	1:A:63:SER:H	6	6.17
(4,194)	1:A:75:SER:CB	1:A:103:SER:H	10	6.17
(4,179)	1:A:75:SER:CB	1:A:46:PHE:H	10	6.16
(4,160)	1:A:56:PHE:CB	1:A:105:ASP:H	13	6.16
(4,141)	1:A:56:PHE:CB	1:A:80:ARG:H	2	6.16
(1,304)	1:A:26:CYS:CB	1:A:90:TRP:H	9	6.16
(4,39)	1:A:26:CYS:CB	1:A:88:ASN:H	5	6.15
(4,240)	1:A:86:CYS:CB	1:A:102:ARG:H	1	6.15
(4,236)	1:A:86:CYS:CB	1:A:96:GLY:H	20	6.15
(4,203)	1:A:86:CYS:CB	1:A:31:PHE:H	11	6.15
(1,311)	1:A:49:GLN:CB	1:A:65:LEU:H	5	6.15
(4,229)	1:A:86:CYS:CB	1:A:63:SER:H	13	6.14
(4,171)	1:A:75:SER:CB	1:A:37:THR:H	4	6.14
(4,141)	1:A:56:PHE:CB	1:A:80:ARG:H	10	6.14
(4,70)	1:A:49:GLN:CB	1:A:74:VAL:H	11	6.13
(4,176)	1:A:75:SER:CB	1:A:42:THR:H	2	6.13
(4,125)	1:A:56:PHE:CB	1:A:36:PHE:H	20	6.13
(4,210)	1:A:86:CYS:CB	1:A:38:PHE:H	3	6.12
(4,171)	1:A:75:SER:CB	1:A:37:THR:H	3	6.12
(4,141)	1:A:56:PHE:CB	1:A:80:ARG:H	14	6.11
(4,141)	1:A:56:PHE:CB	1:A:80:ARG:H	16	6.11
(4,70)	1:A:49:GLN:CB	1:A:74:VAL:H	20	6.1
(4,66)	1:A:49:GLN:CB	1:A:67:ALA:H	10	6.1
(4,197)	1:A:86:CYS:CB	1:A:17:HIS:H	11	6.1
(4,40)	1:A:26:CYS:CB	1:A:103:SER:H	1	6.09
(4,229)	1:A:86:CYS:CB	1:A:63:SER:H	16	6.08

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,171)	1:A:75:SER:CB	1:A:37:THR:H	9	6.08
(4,141)	1:A:56:PHE:CB	1:A:80:ARG:H	3	6.08
(4,229)	1:A:86:CYS:CB	1:A:63:SER:H	19	6.07
(1,306)	1:A:26:CYS:CB	1:A:93:LEU:H	17	6.07
(4,7)	1:A:26:CYS:CB	1:A:46:PHE:H	9	6.03
(4,204)	1:A:86:CYS:CB	1:A:32:MET:H	10	6.03
(4,241)	1:A:86:CYS:CB	1:A:103:SER:H	2	6.02
(4,229)	1:A:86:CYS:CB	1:A:63:SER:H	8	6.02
(4,229)	1:A:86:CYS:CB	1:A:63:SER:H	17	6.01
(4,42)	1:A:26:CYS:CB	1:A:105:ASP:H	14	6.0
(4,229)	1:A:86:CYS:CB	1:A:63:SER:H	3	6.0
(1,313)	1:A:49:GLN:CB	1:A:70:ALA:H	11	5.99
(4,57)	1:A:49:GLN:CB	1:A:30:ALA:H	9	5.98
(4,172)	1:A:75:SER:CB	1:A:38:PHE:H	15	5.98
(4,141)	1:A:56:PHE:CB	1:A:80:ARG:H	19	5.98
(4,124)	1:A:56:PHE:CB	1:A:35:VAL:H	19	5.98
(4,229)	1:A:86:CYS:CB	1:A:63:SER:H	4	5.97
(4,207)	1:A:86:CYS:CB	1:A:35:VAL:H	20	5.95
(4,163)	1:A:56:PHE:CB	1:A:108:SER:H	11	5.95
(4,141)	1:A:56:PHE:CB	1:A:80:ARG:H	11	5.95
(1,312)	1:A:49:GLN:CB	1:A:66:VAL:H	11	5.95
(4,69)	1:A:49:GLN:CB	1:A:72:SER:H	20	5.94
(4,8)	1:A:26:CYS:CB	1:A:47:GLY:H	11	5.93
(4,210)	1:A:86:CYS:CB	1:A:38:PHE:H	17	5.93
(4,141)	1:A:56:PHE:CB	1:A:80:ARG:H	4	5.93
(1,334)	1:A:86:CYS:CB	1:A:21:GLY:H	5	5.93
(4,36)	1:A:26:CYS:CB	1:A:81:VAL:H	15	5.92
(4,239)	1:A:86:CYS:CB	1:A:101:ASP:H	1	5.92
(4,207)	1:A:86:CYS:CB	1:A:35:VAL:H	15	5.92
(4,174)	1:A:75:SER:CB	1:A:40:THR:H	9	5.92
(4,196)	1:A:86:CYS:CB	1:A:16:LYS:H	20	5.91
(4,168)	1:A:75:SER:CB	1:A:34:GLY:H	20	5.91
(4,207)	1:A:86:CYS:CB	1:A:35:VAL:H	8	5.9
(4,172)	1:A:75:SER:CB	1:A:38:PHE:H	10	5.89
(4,57)	1:A:49:GLN:CB	1:A:30:ALA:H	17	5.88
(1,313)	1:A:49:GLN:CB	1:A:70:ALA:H	20	5.88
(1,304)	1:A:26:CYS:CB	1:A:90:TRP:H	8	5.88
(4,229)	1:A:86:CYS:CB	1:A:63:SER:H	2	5.86
(4,172)	1:A:75:SER:CB	1:A:38:PHE:H	18	5.86
(4,171)	1:A:75:SER:CB	1:A:37:THR:H	8	5.86
(4,168)	1:A:75:SER:CB	1:A:34:GLY:H	9	5.86
(4,171)	1:A:75:SER:CB	1:A:37:THR:H	17	5.85

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,173)	1:A:75:SER:CB	1:A:39:VAL:H	12	5.84
(4,171)	1:A:75:SER:CB	1:A:37:THR:H	14	5.83
(1,311)	1:A:49:GLN:CB	1:A:65:LEU:H	6	5.83
(4,229)	1:A:86:CYS:CB	1:A:63:SER:H	7	5.82
(4,170)	1:A:75:SER:CB	1:A:36:PHE:H	16	5.82
(4,39)	1:A:26:CYS:CB	1:A:88:ASN:H	9	5.8
(4,229)	1:A:86:CYS:CB	1:A:63:SER:H	10	5.8
(4,205)	1:A:86:CYS:CB	1:A:33:LYS:H	10	5.8
(1,311)	1:A:49:GLN:CB	1:A:65:LEU:H	17	5.8
(4,241)	1:A:86:CYS:CB	1:A:103:SER:H	16	5.79
(4,229)	1:A:86:CYS:CB	1:A:63:SER:H	9	5.79
(4,173)	1:A:75:SER:CB	1:A:39:VAL:H	16	5.78
(4,124)	1:A:56:PHE:CB	1:A:35:VAL:H	17	5.77
(4,229)	1:A:86:CYS:CB	1:A:63:SER:H	11	5.76
(4,170)	1:A:75:SER:CB	1:A:36:PHE:H	5	5.76
(4,239)	1:A:86:CYS:CB	1:A:101:ASP:H	20	5.75
(4,8)	1:A:26:CYS:CB	1:A:47:GLY:H	1	5.74
(4,208)	1:A:86:CYS:CB	1:A:36:PHE:H	18	5.74
(4,176)	1:A:75:SER:CB	1:A:42:THR:H	15	5.74
(4,169)	1:A:75:SER:CB	1:A:35:VAL:H	19	5.74
(4,42)	1:A:26:CYS:CB	1:A:105:ASP:H	4	5.73
(4,42)	1:A:26:CYS:CB	1:A:105:ASP:H	19	5.7
(4,229)	1:A:86:CYS:CB	1:A:63:SER:H	5	5.7
(4,229)	1:A:86:CYS:CB	1:A:63:SER:H	12	5.7
(4,173)	1:A:75:SER:CB	1:A:39:VAL:H	20	5.7
(4,125)	1:A:56:PHE:CB	1:A:36:PHE:H	11	5.69
(4,170)	1:A:75:SER:CB	1:A:36:PHE:H	6	5.68
(4,175)	1:A:75:SER:CB	1:A:41:GLY:H	15	5.67
(4,171)	1:A:75:SER:CB	1:A:37:THR:H	11	5.67
(4,7)	1:A:26:CYS:CB	1:A:46:PHE:H	17	5.66
(4,69)	1:A:49:GLN:CB	1:A:72:SER:H	13	5.66
(4,173)	1:A:75:SER:CB	1:A:39:VAL:H	13	5.66
(4,8)	1:A:26:CYS:CB	1:A:47:GLY:H	12	5.65
(4,195)	1:A:86:CYS:CB	1:A:15:ALA:H	11	5.65
(4,141)	1:A:56:PHE:CB	1:A:80:ARG:H	15	5.65
(1,311)	1:A:49:GLN:CB	1:A:65:LEU:H	3	5.64
(4,125)	1:A:56:PHE:CB	1:A:36:PHE:H	2	5.63
(4,124)	1:A:56:PHE:CB	1:A:35:VAL:H	9	5.63
(4,209)	1:A:86:CYS:CB	1:A:37:THR:H	4	5.6
(4,229)	1:A:86:CYS:CB	1:A:63:SER:H	20	5.59
(1,312)	1:A:49:GLN:CB	1:A:66:VAL:H	3	5.59
(4,8)	1:A:26:CYS:CB	1:A:47:GLY:H	6	5.58

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,41)	1:A:26:CYS:CB	1:A:104:THR:H	16	5.58
(4,196)	1:A:86:CYS:CB	1:A:16:LYS:H	11	5.58
(4,195)	1:A:86:CYS:CB	1:A:15:ALA:H	13	5.58
(4,173)	1:A:75:SER:CB	1:A:39:VAL:H	1	5.58
(4,229)	1:A:86:CYS:CB	1:A:63:SER:H	14	5.57
(4,41)	1:A:26:CYS:CB	1:A:104:THR:H	1	5.56
(1,312)	1:A:49:GLN:CB	1:A:66:VAL:H	12	5.56
(4,229)	1:A:86:CYS:CB	1:A:63:SER:H	1	5.55
(4,174)	1:A:75:SER:CB	1:A:40:THR:H	12	5.55
(4,125)	1:A:56:PHE:CB	1:A:36:PHE:H	13	5.55
(1,312)	1:A:49:GLN:CB	1:A:66:VAL:H	6	5.55
(4,141)	1:A:56:PHE:CB	1:A:80:ARG:H	20	5.54
(4,35)	1:A:26:CYS:CB	1:A:80:ARG:H	11	5.53
(4,206)	1:A:86:CYS:CB	1:A:34:GLY:H	8	5.53
(4,179)	1:A:75:SER:CB	1:A:46:PHE:H	4	5.53
(4,229)	1:A:86:CYS:CB	1:A:63:SER:H	15	5.52
(4,175)	1:A:75:SER:CB	1:A:41:GLY:H	10	5.52
(4,241)	1:A:86:CYS:CB	1:A:103:SER:H	13	5.51
(4,239)	1:A:86:CYS:CB	1:A:101:ASP:H	19	5.49
(4,173)	1:A:75:SER:CB	1:A:39:VAL:H	11	5.49
(4,125)	1:A:56:PHE:CB	1:A:36:PHE:H	6	5.49
(4,125)	1:A:56:PHE:CB	1:A:36:PHE:H	10	5.49
(4,208)	1:A:86:CYS:CB	1:A:36:PHE:H	8	5.48
(4,195)	1:A:86:CYS:CB	1:A:15:ALA:H	1	5.48
(4,174)	1:A:75:SER:CB	1:A:40:THR:H	13	5.48
(4,170)	1:A:75:SER:CB	1:A:36:PHE:H	14	5.47
(4,40)	1:A:26:CYS:CB	1:A:103:SER:H	4	5.46
(4,208)	1:A:86:CYS:CB	1:A:36:PHE:H	20	5.46
(4,174)	1:A:75:SER:CB	1:A:40:THR:H	18	5.46
(4,170)	1:A:75:SER:CB	1:A:36:PHE:H	19	5.46
(4,8)	1:A:26:CYS:CB	1:A:47:GLY:H	14	5.45
(4,67)	1:A:49:GLN:CB	1:A:68:VAL:H	19	5.45
(4,57)	1:A:49:GLN:CB	1:A:30:ALA:H	14	5.45
(4,127)	1:A:56:PHE:CB	1:A:38:PHE:H	15	5.45
(4,229)	1:A:86:CYS:CB	1:A:63:SER:H	18	5.44
(4,125)	1:A:56:PHE:CB	1:A:36:PHE:H	8	5.44
(4,67)	1:A:49:GLN:CB	1:A:68:VAL:H	20	5.43
(4,174)	1:A:75:SER:CB	1:A:40:THR:H	7	5.43
(4,68)	1:A:49:GLN:CB	1:A:69:VAL:H	18	5.42
(4,45)	1:A:26:CYS:CB	1:A:108:SER:H	3	5.42
(4,208)	1:A:86:CYS:CB	1:A:36:PHE:H	15	5.42
(4,173)	1:A:75:SER:CB	1:A:39:VAL:H	7	5.42

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,312)	1:A:49:GLN:CB	1:A:66:VAL:H	4	5.42
(4,67)	1:A:49:GLN:CB	1:A:68:VAL:H	5	5.41
(4,174)	1:A:75:SER:CB	1:A:40:THR:H	8	5.41
(4,205)	1:A:86:CYS:CB	1:A:33:LYS:H	11	5.4
(4,168)	1:A:75:SER:CB	1:A:34:GLY:H	15	5.4
(4,67)	1:A:49:GLN:CB	1:A:68:VAL:H	16	5.39
(1,312)	1:A:49:GLN:CB	1:A:66:VAL:H	20	5.39
(4,8)	1:A:26:CYS:CB	1:A:47:GLY:H	10	5.38
(4,69)	1:A:49:GLN:CB	1:A:72:SER:H	8	5.38
(4,69)	1:A:49:GLN:CB	1:A:72:SER:H	7	5.37
(1,311)	1:A:49:GLN:CB	1:A:65:LEU:H	1	5.37
(4,210)	1:A:86:CYS:CB	1:A:38:PHE:H	14	5.36
(1,312)	1:A:49:GLN:CB	1:A:66:VAL:H	1	5.36
(4,67)	1:A:49:GLN:CB	1:A:68:VAL:H	11	5.33
(4,57)	1:A:49:GLN:CB	1:A:30:ALA:H	6	5.33
(4,125)	1:A:56:PHE:CB	1:A:36:PHE:H	7	5.33
(4,57)	1:A:49:GLN:CB	1:A:30:ALA:H	11	5.32
(4,57)	1:A:49:GLN:CB	1:A:30:ALA:H	18	5.31
(4,125)	1:A:56:PHE:CB	1:A:36:PHE:H	12	5.31
(4,208)	1:A:86:CYS:CB	1:A:36:PHE:H	5	5.3
(4,170)	1:A:75:SER:CB	1:A:36:PHE:H	9	5.3
(4,126)	1:A:56:PHE:CB	1:A:37:THR:H	11	5.29
(4,57)	1:A:49:GLN:CB	1:A:30:ALA:H	3	5.28
(4,126)	1:A:56:PHE:CB	1:A:37:THR:H	6	5.28
(1,306)	1:A:26:CYS:CB	1:A:93:LEU:H	9	5.28
(4,57)	1:A:49:GLN:CB	1:A:30:ALA:H	4	5.27
(1,312)	1:A:49:GLN:CB	1:A:66:VAL:H	9	5.27
(4,175)	1:A:75:SER:CB	1:A:41:GLY:H	6	5.26
(4,124)	1:A:56:PHE:CB	1:A:35:VAL:H	6	5.26
(4,176)	1:A:75:SER:CB	1:A:42:THR:H	10	5.25
(4,173)	1:A:75:SER:CB	1:A:39:VAL:H	10	5.25
(4,7)	1:A:26:CYS:CB	1:A:46:PHE:H	3	5.24
(4,128)	1:A:56:PHE:CB	1:A:39:VAL:H	15	5.24
(4,126)	1:A:56:PHE:CB	1:A:37:THR:H	14	5.24
(4,37)	1:A:26:CYS:CB	1:A:83:SER:H	20	5.23
(4,8)	1:A:26:CYS:CB	1:A:47:GLY:H	18	5.22
(4,38)	1:A:26:CYS:CB	1:A:85:LYS:H	14	5.22
(1,305)	1:A:26:CYS:CB	1:A:91:LEU:H	10	5.21
(4,69)	1:A:49:GLN:CB	1:A:72:SER:H	11	5.2
(4,125)	1:A:56:PHE:CB	1:A:36:PHE:H	4	5.19
(4,207)	1:A:86:CYS:CB	1:A:35:VAL:H	5	5.17
(4,177)	1:A:75:SER:CB	1:A:43:GLY:H	10	5.17

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,173)	1:A:75:SER:CB	1:A:39:VAL:H	19	5.16
(4,57)	1:A:49:GLN:CB	1:A:30:ALA:H	19	5.15
(4,125)	1:A:56:PHE:CB	1:A:36:PHE:H	14	5.15
(4,41)	1:A:26:CYS:CB	1:A:104:THR:H	20	5.13
(4,195)	1:A:86:CYS:CB	1:A:15:ALA:H	7	5.13
(4,171)	1:A:75:SER:CB	1:A:37:THR:H	6	5.13
(4,67)	1:A:49:GLN:CB	1:A:68:VAL:H	14	5.12
(4,175)	1:A:75:SER:CB	1:A:41:GLY:H	4	5.11
(4,163)	1:A:56:PHE:CB	1:A:108:SER:H	13	5.11
(4,70)	1:A:49:GLN:CB	1:A:74:VAL:H	15	5.1
(1,311)	1:A:49:GLN:CB	1:A:65:LEU:H	9	5.1
(4,67)	1:A:49:GLN:CB	1:A:68:VAL:H	17	5.09
(4,57)	1:A:49:GLN:CB	1:A:30:ALA:H	1	5.09
(4,69)	1:A:49:GLN:CB	1:A:72:SER:H	2	5.08
(4,37)	1:A:26:CYS:CB	1:A:83:SER:H	14	5.08
(4,170)	1:A:75:SER:CB	1:A:36:PHE:H	13	5.08
(4,126)	1:A:56:PHE:CB	1:A:37:THR:H	3	5.08
(1,313)	1:A:49:GLN:CB	1:A:70:ALA:H	15	5.08
(1,312)	1:A:49:GLN:CB	1:A:66:VAL:H	13	5.08
(4,206)	1:A:86:CYS:CB	1:A:34:GLY:H	5	5.07
(4,206)	1:A:86:CYS:CB	1:A:34:GLY:H	15	5.07
(4,174)	1:A:75:SER:CB	1:A:40:THR:H	2	5.07
(1,305)	1:A:26:CYS:CB	1:A:91:LEU:H	14	5.07
(4,68)	1:A:49:GLN:CB	1:A:69:VAL:H	8	5.06
(4,57)	1:A:49:GLN:CB	1:A:30:ALA:H	12	5.06
(4,125)	1:A:56:PHE:CB	1:A:36:PHE:H	1	5.06
(4,211)	1:A:86:CYS:CB	1:A:39:VAL:H	4	5.05
(4,176)	1:A:75:SER:CB	1:A:42:THR:H	4	5.05
(4,124)	1:A:56:PHE:CB	1:A:35:VAL:H	14	5.05
(4,208)	1:A:86:CYS:CB	1:A:36:PHE:H	3	5.04
(4,172)	1:A:75:SER:CB	1:A:38:PHE:H	4	5.04
(1,311)	1:A:49:GLN:CB	1:A:65:LEU:H	12	5.03
(4,57)	1:A:49:GLN:CB	1:A:30:ALA:H	20	5.02
(4,41)	1:A:26:CYS:CB	1:A:104:THR:H	7	5.02
(4,209)	1:A:86:CYS:CB	1:A:37:THR:H	14	5.02
(4,7)	1:A:26:CYS:CB	1:A:46:PHE:H	6	5.01
(4,44)	1:A:26:CYS:CB	1:A:107:ARG:H	20	5.01
(4,39)	1:A:26:CYS:CB	1:A:88:ASN:H	8	5.01
(4,174)	1:A:75:SER:CB	1:A:40:THR:H	1	5.01
(1,312)	1:A:49:GLN:CB	1:A:66:VAL:H	15	5.01
(4,7)	1:A:26:CYS:CB	1:A:46:PHE:H	8	5.0
(4,206)	1:A:86:CYS:CB	1:A:34:GLY:H	20	5.0

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,126)	1:A:56:PHE:CB	1:A:37:THR:H	10	5.0
(4,125)	1:A:56:PHE:CB	1:A:36:PHE:H	3	5.0
(4,57)	1:A:49:GLN:CB	1:A:30:ALA:H	16	4.99
(4,42)	1:A:26:CYS:CB	1:A:105:ASP:H	1	4.99
(4,126)	1:A:56:PHE:CB	1:A:37:THR:H	2	4.99
(4,66)	1:A:49:GLN:CB	1:A:67:ALA:H	11	4.98
(4,240)	1:A:86:CYS:CB	1:A:102:ARG:H	3	4.97
(4,208)	1:A:86:CYS:CB	1:A:36:PHE:H	17	4.97
(4,7)	1:A:26:CYS:CB	1:A:46:PHE:H	2	4.96
(4,7)	1:A:26:CYS:CB	1:A:46:PHE:H	13	4.96
(4,68)	1:A:49:GLN:CB	1:A:69:VAL:H	13	4.95
(4,42)	1:A:26:CYS:CB	1:A:105:ASP:H	15	4.95
(4,208)	1:A:86:CYS:CB	1:A:36:PHE:H	14	4.95
(4,174)	1:A:75:SER:CB	1:A:40:THR:H	15	4.95
(4,168)	1:A:75:SER:CB	1:A:34:GLY:H	14	4.95
(4,126)	1:A:56:PHE:CB	1:A:37:THR:H	4	4.95
(4,57)	1:A:49:GLN:CB	1:A:30:ALA:H	2	4.94
(4,126)	1:A:56:PHE:CB	1:A:37:THR:H	8	4.94
(4,8)	1:A:26:CYS:CB	1:A:47:GLY:H	19	4.92
(4,8)	1:A:26:CYS:CB	1:A:47:GLY:H	20	4.92
(4,170)	1:A:75:SER:CB	1:A:36:PHE:H	12	4.92
(4,67)	1:A:49:GLN:CB	1:A:68:VAL:H	10	4.91
(4,40)	1:A:26:CYS:CB	1:A:103:SER:H	14	4.9
(4,8)	1:A:26:CYS:CB	1:A:47:GLY:H	5	4.89
(4,7)	1:A:26:CYS:CB	1:A:46:PHE:H	14	4.89
(4,57)	1:A:49:GLN:CB	1:A:30:ALA:H	13	4.88
(4,241)	1:A:86:CYS:CB	1:A:103:SER:H	8	4.88
(4,173)	1:A:75:SER:CB	1:A:39:VAL:H	2	4.88
(4,170)	1:A:75:SER:CB	1:A:36:PHE:H	7	4.87
(4,7)	1:A:26:CYS:CB	1:A:46:PHE:H	4	4.86
(4,39)	1:A:26:CYS:CB	1:A:88:ASN:H	20	4.86
(4,239)	1:A:86:CYS:CB	1:A:101:ASP:H	18	4.86
(4,208)	1:A:86:CYS:CB	1:A:36:PHE:H	19	4.85
(4,41)	1:A:26:CYS:CB	1:A:104:THR:H	6	4.84
(4,208)	1:A:86:CYS:CB	1:A:36:PHE:H	16	4.84
(4,206)	1:A:86:CYS:CB	1:A:34:GLY:H	18	4.84
(4,7)	1:A:26:CYS:CB	1:A:46:PHE:H	11	4.83
(4,57)	1:A:49:GLN:CB	1:A:30:ALA:H	7	4.83
(4,204)	1:A:86:CYS:CB	1:A:32:MET:H	11	4.83
(4,210)	1:A:86:CYS:CB	1:A:38:PHE:H	4	4.82
(4,126)	1:A:56:PHE:CB	1:A:37:THR:H	13	4.8
(4,125)	1:A:56:PHE:CB	1:A:36:PHE:H	5	4.8

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,41)	1:A:26:CYS:CB	1:A:104:THR:H	19	4.79
(4,174)	1:A:75:SER:CB	1:A:40:THR:H	3	4.79
(4,69)	1:A:49:GLN:CB	1:A:72:SER:H	15	4.78
(4,67)	1:A:49:GLN:CB	1:A:68:VAL:H	6	4.77
(4,57)	1:A:49:GLN:CB	1:A:30:ALA:H	5	4.77
(4,206)	1:A:86:CYS:CB	1:A:34:GLY:H	13	4.76
(4,174)	1:A:75:SER:CB	1:A:40:THR:H	11	4.76
(4,170)	1:A:75:SER:CB	1:A:36:PHE:H	8	4.76
(1,305)	1:A:26:CYS:CB	1:A:91:LEU:H	6	4.76
(4,241)	1:A:86:CYS:CB	1:A:103:SER:H	3	4.75
(4,240)	1:A:86:CYS:CB	1:A:102:ARG:H	18	4.75
(4,127)	1:A:56:PHE:CB	1:A:38:PHE:H	11	4.75
(4,125)	1:A:56:PHE:CB	1:A:36:PHE:H	9	4.75
(4,69)	1:A:49:GLN:CB	1:A:72:SER:H	4	4.74
(4,67)	1:A:49:GLN:CB	1:A:68:VAL:H	15	4.73
(1,311)	1:A:49:GLN:CB	1:A:65:LEU:H	18	4.73
(4,7)	1:A:26:CYS:CB	1:A:46:PHE:H	12	4.72
(4,43)	1:A:26:CYS:CB	1:A:106:GLN:H	7	4.72
(4,241)	1:A:86:CYS:CB	1:A:103:SER:H	11	4.72
(4,239)	1:A:86:CYS:CB	1:A:101:ASP:H	12	4.72
(4,126)	1:A:56:PHE:CB	1:A:37:THR:H	7	4.72
(4,57)	1:A:49:GLN:CB	1:A:30:ALA:H	8	4.71
(4,169)	1:A:75:SER:CB	1:A:35:VAL:H	18	4.71
(4,126)	1:A:56:PHE:CB	1:A:37:THR:H	9	4.71
(4,57)	1:A:49:GLN:CB	1:A:30:ALA:H	10	4.7
(4,174)	1:A:75:SER:CB	1:A:40:THR:H	17	4.7
(4,170)	1:A:75:SER:CB	1:A:36:PHE:H	2	4.7
(4,68)	1:A:49:GLN:CB	1:A:69:VAL:H	4	4.68
(4,241)	1:A:86:CYS:CB	1:A:103:SER:H	17	4.68
(4,170)	1:A:75:SER:CB	1:A:36:PHE:H	3	4.68
(4,126)	1:A:56:PHE:CB	1:A:37:THR:H	15	4.68
(4,7)	1:A:26:CYS:CB	1:A:46:PHE:H	18	4.66
(4,67)	1:A:49:GLN:CB	1:A:68:VAL:H	9	4.66
(4,44)	1:A:26:CYS:CB	1:A:107:ARG:H	5	4.66
(4,199)	1:A:86:CYS:CB	1:A:24:ALA:H	10	4.66
(4,206)	1:A:86:CYS:CB	1:A:34:GLY:H	2	4.65
(4,198)	1:A:86:CYS:CB	1:A:23:TYR:H	11	4.65
(4,45)	1:A:26:CYS:CB	1:A:108:SER:H	20	4.64
(4,42)	1:A:26:CYS:CB	1:A:105:ASP:H	17	4.64
(4,7)	1:A:26:CYS:CB	1:A:46:PHE:H	1	4.63
(4,57)	1:A:49:GLN:CB	1:A:30:ALA:H	15	4.63
(1,312)	1:A:49:GLN:CB	1:A:66:VAL:H	7	4.63

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,68)	1:A:49:GLN:CB	1:A:69:VAL:H	7	4.62
(4,239)	1:A:86:CYS:CB	1:A:101:ASP:H	16	4.62
(1,307)	1:A:26:CYS:CB	1:A:94:GLU:H	6	4.62
(4,127)	1:A:56:PHE:CB	1:A:38:PHE:H	20	4.61
(4,8)	1:A:26:CYS:CB	1:A:47:GLY:H	16	4.6
(4,170)	1:A:75:SER:CB	1:A:36:PHE:H	1	4.6
(4,208)	1:A:86:CYS:CB	1:A:36:PHE:H	13	4.58
(4,126)	1:A:56:PHE:CB	1:A:37:THR:H	17	4.58
(4,7)	1:A:26:CYS:CB	1:A:46:PHE:H	19	4.55
(4,240)	1:A:86:CYS:CB	1:A:102:ARG:H	7	4.55
(4,239)	1:A:86:CYS:CB	1:A:101:ASP:H	3	4.55
(4,67)	1:A:49:GLN:CB	1:A:68:VAL:H	3	4.54
(4,202)	1:A:86:CYS:CB	1:A:30:ALA:H	11	4.53
(4,127)	1:A:56:PHE:CB	1:A:38:PHE:H	2	4.53
(4,170)	1:A:75:SER:CB	1:A:36:PHE:H	17	4.52
(4,125)	1:A:56:PHE:CB	1:A:36:PHE:H	17	4.52
(4,7)	1:A:26:CYS:CB	1:A:46:PHE:H	7	4.51
(4,208)	1:A:86:CYS:CB	1:A:36:PHE:H	7	4.51
(4,127)	1:A:56:PHE:CB	1:A:38:PHE:H	12	4.51
(4,127)	1:A:56:PHE:CB	1:A:38:PHE:H	13	4.51
(4,202)	1:A:86:CYS:CB	1:A:30:ALA:H	10	4.5
(1,306)	1:A:26:CYS:CB	1:A:93:LEU:H	14	4.5
(4,208)	1:A:86:CYS:CB	1:A:36:PHE:H	12	4.49
(4,199)	1:A:86:CYS:CB	1:A:24:ALA:H	11	4.49
(4,198)	1:A:86:CYS:CB	1:A:23:TYR:H	17	4.49
(4,127)	1:A:56:PHE:CB	1:A:38:PHE:H	8	4.49
(4,68)	1:A:49:GLN:CB	1:A:69:VAL:H	20	4.48
(4,173)	1:A:75:SER:CB	1:A:39:VAL:H	14	4.48
(4,208)	1:A:86:CYS:CB	1:A:36:PHE:H	2	4.47
(4,170)	1:A:75:SER:CB	1:A:36:PHE:H	18	4.47
(4,127)	1:A:56:PHE:CB	1:A:38:PHE:H	10	4.47
(4,126)	1:A:56:PHE:CB	1:A:37:THR:H	18	4.47
(4,169)	1:A:75:SER:CB	1:A:35:VAL:H	4	4.46
(4,126)	1:A:56:PHE:CB	1:A:37:THR:H	12	4.46
(4,125)	1:A:56:PHE:CB	1:A:36:PHE:H	18	4.46
(4,58)	1:A:49:GLN:CB	1:A:31:PHE:H	20	4.45
(1,311)	1:A:49:GLN:CB	1:A:65:LEU:H	4	4.45
(4,43)	1:A:26:CYS:CB	1:A:106:GLN:H	20	4.44
(4,58)	1:A:49:GLN:CB	1:A:31:PHE:H	15	4.43
(4,198)	1:A:86:CYS:CB	1:A:23:TYR:H	3	4.43
(4,170)	1:A:75:SER:CB	1:A:36:PHE:H	11	4.43
(4,42)	1:A:26:CYS:CB	1:A:105:ASP:H	16	4.42

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,173)	1:A:75:SER:CB	1:A:39:VAL:H	6	4.42
(4,161)	1:A:56:PHE:CB	1:A:106:GLN:H	13	4.42
(4,37)	1:A:26:CYS:CB	1:A:83:SER:H	6	4.41
(4,36)	1:A:26:CYS:CB	1:A:81:VAL:H	10	4.41
(4,174)	1:A:75:SER:CB	1:A:40:THR:H	20	4.41
(4,172)	1:A:75:SER:CB	1:A:38:PHE:H	3	4.41
(4,170)	1:A:75:SER:CB	1:A:36:PHE:H	4	4.41
(1,311)	1:A:49:GLN:CB	1:A:65:LEU:H	8	4.41
(4,7)	1:A:26:CYS:CB	1:A:46:PHE:H	16	4.4
(4,38)	1:A:26:CYS:CB	1:A:85:LYS:H	20	4.4
(4,205)	1:A:86:CYS:CB	1:A:33:LYS:H	18	4.4
(4,206)	1:A:86:CYS:CB	1:A:34:GLY:H	7	4.39
(4,127)	1:A:56:PHE:CB	1:A:38:PHE:H	7	4.39
(4,207)	1:A:86:CYS:CB	1:A:35:VAL:H	13	4.36
(4,45)	1:A:26:CYS:CB	1:A:108:SER:H	18	4.35
(4,198)	1:A:86:CYS:CB	1:A:23:TYR:H	2	4.35
(4,42)	1:A:26:CYS:CB	1:A:105:ASP:H	20	4.34
(4,206)	1:A:86:CYS:CB	1:A:34:GLY:H	12	4.33
(4,126)	1:A:56:PHE:CB	1:A:37:THR:H	1	4.33
(4,39)	1:A:26:CYS:CB	1:A:88:ASN:H	15	4.32
(4,205)	1:A:86:CYS:CB	1:A:33:LYS:H	9	4.32
(4,140)	1:A:56:PHE:CB	1:A:79:THR:H	10	4.32
(4,140)	1:A:56:PHE:CB	1:A:79:THR:H	12	4.32
(4,127)	1:A:56:PHE:CB	1:A:38:PHE:H	1	4.32
(4,67)	1:A:49:GLN:CB	1:A:68:VAL:H	1	4.31
(4,206)	1:A:86:CYS:CB	1:A:34:GLY:H	1	4.31
(4,168)	1:A:75:SER:CB	1:A:34:GLY:H	6	4.31
(4,7)	1:A:26:CYS:CB	1:A:46:PHE:H	10	4.3
(4,6)	1:A:26:CYS:CB	1:A:44:MET:H	9	4.3
(4,35)	1:A:26:CYS:CB	1:A:80:ARG:H	10	4.3
(4,140)	1:A:56:PHE:CB	1:A:79:THR:H	18	4.3
(4,69)	1:A:49:GLN:CB	1:A:72:SER:H	10	4.29
(4,201)	1:A:86:CYS:CB	1:A:27:GLN:H	10	4.29
(4,195)	1:A:86:CYS:CB	1:A:15:ALA:H	20	4.29
(4,198)	1:A:86:CYS:CB	1:A:23:TYR:H	7	4.28
(4,126)	1:A:56:PHE:CB	1:A:37:THR:H	16	4.28
(4,126)	1:A:56:PHE:CB	1:A:37:THR:H	20	4.27
(4,230)	1:A:86:CYS:CB	1:A:64:LEU:H	4	4.26
(4,201)	1:A:86:CYS:CB	1:A:27:GLN:H	11	4.26
(4,198)	1:A:86:CYS:CB	1:A:23:TYR:H	4	4.26
(4,67)	1:A:49:GLN:CB	1:A:68:VAL:H	12	4.25
(4,66)	1:A:49:GLN:CB	1:A:67:ALA:H	20	4.25

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,230)	1:A:86:CYS:CB	1:A:64:LEU:H	19	4.25
(4,208)	1:A:86:CYS:CB	1:A:36:PHE:H	1	4.25
(4,68)	1:A:49:GLN:CB	1:A:69:VAL:H	2	4.24
(4,8)	1:A:26:CYS:CB	1:A:47:GLY:H	15	4.23
(4,37)	1:A:26:CYS:CB	1:A:83:SER:H	15	4.23
(4,230)	1:A:86:CYS:CB	1:A:64:LEU:H	6	4.23
(4,140)	1:A:56:PHE:CB	1:A:79:THR:H	6	4.23
(4,6)	1:A:26:CYS:CB	1:A:44:MET:H	13	4.22
(4,140)	1:A:56:PHE:CB	1:A:79:THR:H	8	4.22
(4,140)	1:A:56:PHE:CB	1:A:79:THR:H	9	4.22
(4,230)	1:A:86:CYS:CB	1:A:64:LEU:H	8	4.21
(4,239)	1:A:86:CYS:CB	1:A:101:ASP:H	5	4.2
(4,6)	1:A:26:CYS:CB	1:A:44:MET:H	7	4.19
(4,230)	1:A:86:CYS:CB	1:A:64:LEU:H	16	4.19
(4,140)	1:A:56:PHE:CB	1:A:79:THR:H	11	4.19
(4,140)	1:A:56:PHE:CB	1:A:79:THR:H	13	4.19
(4,125)	1:A:56:PHE:CB	1:A:36:PHE:H	16	4.19
(4,230)	1:A:86:CYS:CB	1:A:64:LEU:H	13	4.18
(4,162)	1:A:56:PHE:CB	1:A:107:ARG:H	13	4.18
(4,170)	1:A:75:SER:CB	1:A:36:PHE:H	20	4.17
(4,230)	1:A:86:CYS:CB	1:A:64:LEU:H	2	4.16
(4,205)	1:A:86:CYS:CB	1:A:33:LYS:H	3	4.16
(4,6)	1:A:26:CYS:CB	1:A:44:MET:H	8	4.15
(4,198)	1:A:86:CYS:CB	1:A:23:TYR:H	13	4.15
(4,58)	1:A:49:GLN:CB	1:A:31:PHE:H	1	4.14
(4,230)	1:A:86:CYS:CB	1:A:64:LEU:H	3	4.14
(4,7)	1:A:26:CYS:CB	1:A:46:PHE:H	20	4.13
(4,171)	1:A:75:SER:CB	1:A:37:THR:H	10	4.13
(4,170)	1:A:75:SER:CB	1:A:36:PHE:H	15	4.13
(4,140)	1:A:56:PHE:CB	1:A:79:THR:H	1	4.13
(4,140)	1:A:56:PHE:CB	1:A:79:THR:H	7	4.13
(4,174)	1:A:75:SER:CB	1:A:40:THR:H	4	4.12
(4,58)	1:A:49:GLN:CB	1:A:31:PHE:H	12	4.11
(4,230)	1:A:86:CYS:CB	1:A:64:LEU:H	17	4.11
(4,206)	1:A:86:CYS:CB	1:A:34:GLY:H	16	4.11
(4,140)	1:A:56:PHE:CB	1:A:79:THR:H	17	4.11
(1,307)	1:A:26:CYS:CB	1:A:94:GLU:H	14	4.11
(4,58)	1:A:49:GLN:CB	1:A:31:PHE:H	17	4.1
(4,230)	1:A:86:CYS:CB	1:A:64:LEU:H	10	4.1
(4,140)	1:A:56:PHE:CB	1:A:79:THR:H	5	4.1
(1,312)	1:A:49:GLN:CB	1:A:66:VAL:H	2	4.1
(4,207)	1:A:86:CYS:CB	1:A:35:VAL:H	6	4.09

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,127)	1:A:56:PHE:CB	1:A:38:PHE:H	5	4.09
(4,140)	1:A:56:PHE:CB	1:A:79:THR:H	2	4.08
(4,126)	1:A:56:PHE:CB	1:A:37:THR:H	19	4.08
(4,170)	1:A:75:SER:CB	1:A:36:PHE:H	10	4.07
(4,198)	1:A:86:CYS:CB	1:A:23:TYR:H	12	4.05
(4,125)	1:A:56:PHE:CB	1:A:36:PHE:H	19	4.05
(1,312)	1:A:49:GLN:CB	1:A:66:VAL:H	18	4.05
(4,207)	1:A:86:CYS:CB	1:A:35:VAL:H	12	4.04
(4,198)	1:A:86:CYS:CB	1:A:23:TYR:H	1	4.03
(4,172)	1:A:75:SER:CB	1:A:38:PHE:H	17	4.03
(4,67)	1:A:49:GLN:CB	1:A:68:VAL:H	18	4.02
(4,127)	1:A:56:PHE:CB	1:A:38:PHE:H	4	4.02
(4,7)	1:A:26:CYS:CB	1:A:46:PHE:H	5	4.01
(4,230)	1:A:86:CYS:CB	1:A:64:LEU:H	14	4.01
(4,230)	1:A:86:CYS:CB	1:A:64:LEU:H	20	4.01
(4,171)	1:A:75:SER:CB	1:A:37:THR:H	20	4.01
(4,140)	1:A:56:PHE:CB	1:A:79:THR:H	3	4.0
(4,58)	1:A:49:GLN:CB	1:A:31:PHE:H	5	3.98
(4,198)	1:A:86:CYS:CB	1:A:23:TYR:H	10	3.98
(4,140)	1:A:56:PHE:CB	1:A:79:THR:H	15	3.98
(4,58)	1:A:49:GLN:CB	1:A:31:PHE:H	9	3.97
(4,207)	1:A:86:CYS:CB	1:A:35:VAL:H	7	3.97
(4,41)	1:A:26:CYS:CB	1:A:104:THR:H	9	3.96
(4,230)	1:A:86:CYS:CB	1:A:64:LEU:H	7	3.96
(4,230)	1:A:86:CYS:CB	1:A:64:LEU:H	9	3.95
(4,205)	1:A:86:CYS:CB	1:A:33:LYS:H	17	3.95
(4,58)	1:A:49:GLN:CB	1:A:31:PHE:H	7	3.94
(4,230)	1:A:86:CYS:CB	1:A:64:LEU:H	15	3.93
(4,207)	1:A:86:CYS:CB	1:A:35:VAL:H	2	3.93
(4,207)	1:A:86:CYS:CB	1:A:35:VAL:H	18	3.93
(4,198)	1:A:86:CYS:CB	1:A:23:TYR:H	20	3.93
(4,169)	1:A:75:SER:CB	1:A:35:VAL:H	3	3.92
(4,66)	1:A:49:GLN:CB	1:A:67:ALA:H	15	3.91
(4,6)	1:A:26:CYS:CB	1:A:44:MET:H	2	3.91
(4,140)	1:A:56:PHE:CB	1:A:79:THR:H	14	3.91
(4,140)	1:A:56:PHE:CB	1:A:79:THR:H	16	3.89
(4,140)	1:A:56:PHE:CB	1:A:79:THR:H	20	3.89
(4,230)	1:A:86:CYS:CB	1:A:64:LEU:H	11	3.88
(4,230)	1:A:86:CYS:CB	1:A:64:LEU:H	1	3.87
(4,230)	1:A:86:CYS:CB	1:A:64:LEU:H	12	3.87
(4,169)	1:A:75:SER:CB	1:A:35:VAL:H	9	3.87
(4,127)	1:A:56:PHE:CB	1:A:38:PHE:H	3	3.87

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,41)	1:A:26:CYS:CB	1:A:104:THR:H	5	3.86
(4,206)	1:A:86:CYS:CB	1:A:34:GLY:H	19	3.86
(4,58)	1:A:49:GLN:CB	1:A:31:PHE:H	11	3.85
(4,172)	1:A:75:SER:CB	1:A:38:PHE:H	14	3.84
(4,161)	1:A:56:PHE:CB	1:A:106:GLN:H	10	3.84
(4,230)	1:A:86:CYS:CB	1:A:64:LEU:H	5	3.83
(4,172)	1:A:75:SER:CB	1:A:38:PHE:H	9	3.83
(4,126)	1:A:56:PHE:CB	1:A:37:THR:H	5	3.83
(4,127)	1:A:56:PHE:CB	1:A:38:PHE:H	16	3.82
(4,58)	1:A:49:GLN:CB	1:A:31:PHE:H	8	3.81
(4,207)	1:A:86:CYS:CB	1:A:35:VAL:H	1	3.81
(4,68)	1:A:49:GLN:CB	1:A:69:VAL:H	11	3.8
(1,304)	1:A:26:CYS:CB	1:A:90:TRP:H	14	3.78
(4,173)	1:A:75:SER:CB	1:A:39:VAL:H	18	3.77
(4,127)	1:A:56:PHE:CB	1:A:38:PHE:H	18	3.76
(4,198)	1:A:86:CYS:CB	1:A:23:TYR:H	9	3.75
(4,37)	1:A:26:CYS:CB	1:A:83:SER:H	11	3.74
(4,200)	1:A:86:CYS:CB	1:A:26:CYS:H	3	3.74
(4,66)	1:A:49:GLN:CB	1:A:67:ALA:H	16	3.72
(4,58)	1:A:49:GLN:CB	1:A:31:PHE:H	16	3.71
(4,58)	1:A:49:GLN:CB	1:A:31:PHE:H	2	3.7
(4,58)	1:A:49:GLN:CB	1:A:31:PHE:H	10	3.7
(4,231)	1:A:86:CYS:CB	1:A:65:LEU:H	19	3.7
(4,58)	1:A:49:GLN:CB	1:A:31:PHE:H	18	3.69
(4,207)	1:A:86:CYS:CB	1:A:35:VAL:H	9	3.69
(4,169)	1:A:75:SER:CB	1:A:35:VAL:H	6	3.69
(4,240)	1:A:86:CYS:CB	1:A:102:ARG:H	4	3.68
(4,230)	1:A:86:CYS:CB	1:A:64:LEU:H	18	3.68
(4,200)	1:A:86:CYS:CB	1:A:26:CYS:H	17	3.68
(4,127)	1:A:56:PHE:CB	1:A:38:PHE:H	19	3.68
(4,208)	1:A:86:CYS:CB	1:A:36:PHE:H	4	3.67
(4,140)	1:A:56:PHE:CB	1:A:79:THR:H	19	3.67
(1,311)	1:A:49:GLN:CB	1:A:65:LEU:H	13	3.67
(4,231)	1:A:86:CYS:CB	1:A:65:LEU:H	4	3.65
(4,171)	1:A:75:SER:CB	1:A:37:THR:H	15	3.65
(4,231)	1:A:86:CYS:CB	1:A:65:LEU:H	8	3.64
(4,231)	1:A:86:CYS:CB	1:A:65:LEU:H	16	3.64
(4,231)	1:A:86:CYS:CB	1:A:65:LEU:H	10	3.63
(4,174)	1:A:75:SER:CB	1:A:40:THR:H	10	3.63
(4,162)	1:A:56:PHE:CB	1:A:107:ARG:H	8	3.63
(4,140)	1:A:56:PHE:CB	1:A:79:THR:H	4	3.63
(4,42)	1:A:26:CYS:CB	1:A:105:ASP:H	9	3.61

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,40)	1:A:26:CYS:CB	1:A:103:SER:H	7	3.61
(4,231)	1:A:86:CYS:CB	1:A:65:LEU:H	2	3.61
(4,231)	1:A:86:CYS:CB	1:A:65:LEU:H	14	3.61
(4,58)	1:A:49:GLN:CB	1:A:31:PHE:H	13	3.59
(4,231)	1:A:86:CYS:CB	1:A:65:LEU:H	17	3.58
(4,231)	1:A:86:CYS:CB	1:A:65:LEU:H	20	3.57
(4,173)	1:A:75:SER:CB	1:A:39:VAL:H	9	3.57
(4,66)	1:A:49:GLN:CB	1:A:67:ALA:H	19	3.56
(4,231)	1:A:86:CYS:CB	1:A:65:LEU:H	3	3.56
(4,198)	1:A:86:CYS:CB	1:A:23:TYR:H	18	3.56
(4,231)	1:A:86:CYS:CB	1:A:65:LEU:H	13	3.55
(4,231)	1:A:86:CYS:CB	1:A:65:LEU:H	15	3.55
(4,169)	1:A:75:SER:CB	1:A:35:VAL:H	17	3.52
(4,38)	1:A:26:CYS:CB	1:A:85:LYS:H	6	3.51
(4,231)	1:A:86:CYS:CB	1:A:65:LEU:H	6	3.51
(4,58)	1:A:49:GLN:CB	1:A:31:PHE:H	19	3.5
(4,128)	1:A:56:PHE:CB	1:A:39:VAL:H	20	3.5
(4,6)	1:A:26:CYS:CB	1:A:44:MET:H	17	3.48
(4,231)	1:A:86:CYS:CB	1:A:65:LEU:H	1	3.48
(4,231)	1:A:86:CYS:CB	1:A:65:LEU:H	7	3.48
(4,231)	1:A:86:CYS:CB	1:A:65:LEU:H	11	3.48
(4,231)	1:A:86:CYS:CB	1:A:65:LEU:H	12	3.48
(4,58)	1:A:49:GLN:CB	1:A:31:PHE:H	3	3.47
(4,231)	1:A:86:CYS:CB	1:A:65:LEU:H	9	3.47
(4,68)	1:A:49:GLN:CB	1:A:69:VAL:H	15	3.46
(4,197)	1:A:86:CYS:CB	1:A:17:HIS:H	15	3.46
(4,38)	1:A:26:CYS:CB	1:A:85:LYS:H	15	3.45
(4,231)	1:A:86:CYS:CB	1:A:65:LEU:H	5	3.44
(4,7)	1:A:26:CYS:CB	1:A:46:PHE:H	15	3.43
(4,6)	1:A:26:CYS:CB	1:A:44:MET:H	4	3.41
(4,44)	1:A:26:CYS:CB	1:A:107:ARG:H	18	3.41
(4,239)	1:A:86:CYS:CB	1:A:101:ASP:H	14	3.4
(4,169)	1:A:75:SER:CB	1:A:35:VAL:H	14	3.4
(4,200)	1:A:86:CYS:CB	1:A:26:CYS:H	4	3.38
(4,6)	1:A:26:CYS:CB	1:A:44:MET:H	3	3.36
(4,205)	1:A:86:CYS:CB	1:A:33:LYS:H	4	3.36
(4,205)	1:A:86:CYS:CB	1:A:33:LYS:H	19	3.35
(4,231)	1:A:86:CYS:CB	1:A:65:LEU:H	18	3.34
(4,6)	1:A:26:CYS:CB	1:A:44:MET:H	12	3.31
(4,39)	1:A:26:CYS:CB	1:A:88:ASN:H	14	3.3
(4,198)	1:A:86:CYS:CB	1:A:23:TYR:H	8	3.3
(4,42)	1:A:26:CYS:CB	1:A:105:ASP:H	5	3.29

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,207)	1:A:86:CYS:CB	1:A:35:VAL:H	16	3.28
(4,205)	1:A:86:CYS:CB	1:A:33:LYS:H	6	3.28
(4,206)	1:A:86:CYS:CB	1:A:34:GLY:H	3	3.27
(4,198)	1:A:86:CYS:CB	1:A:23:TYR:H	19	3.27
(4,68)	1:A:49:GLN:CB	1:A:69:VAL:H	10	3.26
(4,6)	1:A:26:CYS:CB	1:A:44:MET:H	11	3.24
(4,172)	1:A:75:SER:CB	1:A:38:PHE:H	6	3.24
(4,206)	1:A:86:CYS:CB	1:A:34:GLY:H	9	3.23
(4,66)	1:A:49:GLN:CB	1:A:67:ALA:H	5	3.22
(4,58)	1:A:49:GLN:CB	1:A:31:PHE:H	4	3.22
(4,40)	1:A:26:CYS:CB	1:A:103:SER:H	9	3.22
(4,66)	1:A:49:GLN:CB	1:A:67:ALA:H	14	3.2
(4,66)	1:A:49:GLN:CB	1:A:67:ALA:H	8	3.17
(4,58)	1:A:49:GLN:CB	1:A:31:PHE:H	14	3.17
(4,200)	1:A:86:CYS:CB	1:A:26:CYS:H	9	3.16
(4,66)	1:A:49:GLN:CB	1:A:67:ALA:H	17	3.15
(4,6)	1:A:26:CYS:CB	1:A:44:MET:H	1	3.15
(4,198)	1:A:86:CYS:CB	1:A:23:TYR:H	16	3.15
(4,36)	1:A:26:CYS:CB	1:A:81:VAL:H	11	3.14
(4,239)	1:A:86:CYS:CB	1:A:101:ASP:H	7	3.13
(4,40)	1:A:26:CYS:CB	1:A:103:SER:H	17	3.12
(4,205)	1:A:86:CYS:CB	1:A:33:LYS:H	16	3.1
(4,203)	1:A:86:CYS:CB	1:A:31:PHE:H	15	3.1
(4,162)	1:A:56:PHE:CB	1:A:107:ARG:H	10	3.1
(1,306)	1:A:26:CYS:CB	1:A:93:LEU:H	6	3.1
(4,199)	1:A:86:CYS:CB	1:A:24:ALA:H	20	3.09
(4,127)	1:A:56:PHE:CB	1:A:38:PHE:H	17	3.09
(4,203)	1:A:86:CYS:CB	1:A:31:PHE:H	20	3.08
(1,311)	1:A:49:GLN:CB	1:A:65:LEU:H	7	3.05
(4,205)	1:A:86:CYS:CB	1:A:33:LYS:H	8	3.03
(4,198)	1:A:86:CYS:CB	1:A:23:TYR:H	15	3.03
(4,6)	1:A:26:CYS:CB	1:A:44:MET:H	14	3.0
(4,59)	1:A:49:GLN:CB	1:A:32:MET:H	15	3.0
(4,42)	1:A:26:CYS:CB	1:A:105:ASP:H	7	3.0
(4,67)	1:A:49:GLN:CB	1:A:68:VAL:H	8	2.99
(4,207)	1:A:86:CYS:CB	1:A:35:VAL:H	19	2.99
(4,205)	1:A:86:CYS:CB	1:A:33:LYS:H	2	2.99
(4,58)	1:A:49:GLN:CB	1:A:31:PHE:H	6	2.96
(4,239)	1:A:86:CYS:CB	1:A:101:ASP:H	17	2.95
(4,198)	1:A:86:CYS:CB	1:A:23:TYR:H	14	2.94
(4,40)	1:A:26:CYS:CB	1:A:103:SER:H	6	2.93
(4,200)	1:A:86:CYS:CB	1:A:26:CYS:H	18	2.93

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,204)	1:A:86:CYS:CB	1:A:32:MET:H	6	2.92
(4,205)	1:A:86:CYS:CB	1:A:33:LYS:H	5	2.91
(4,240)	1:A:86:CYS:CB	1:A:102:ARG:H	8	2.9
(4,6)	1:A:26:CYS:CB	1:A:44:MET:H	6	2.88
(4,44)	1:A:26:CYS:CB	1:A:107:ARG:H	7	2.87
(4,241)	1:A:86:CYS:CB	1:A:103:SER:H	4	2.86
(4,206)	1:A:86:CYS:CB	1:A:34:GLY:H	17	2.84
(4,195)	1:A:86:CYS:CB	1:A:15:ALA:H	15	2.84
(4,173)	1:A:75:SER:CB	1:A:39:VAL:H	3	2.83
(4,129)	1:A:56:PHE:CB	1:A:40:THR:H	15	2.83
(4,207)	1:A:86:CYS:CB	1:A:35:VAL:H	14	2.82
(4,6)	1:A:26:CYS:CB	1:A:44:MET:H	10	2.81
(4,127)	1:A:56:PHE:CB	1:A:38:PHE:H	14	2.8
(4,128)	1:A:56:PHE:CB	1:A:39:VAL:H	12	2.79
(1,311)	1:A:49:GLN:CB	1:A:65:LEU:H	2	2.79
(4,40)	1:A:26:CYS:CB	1:A:103:SER:H	16	2.75
(4,128)	1:A:56:PHE:CB	1:A:39:VAL:H	1	2.75
(4,59)	1:A:49:GLN:CB	1:A:32:MET:H	20	2.72
(4,127)	1:A:56:PHE:CB	1:A:38:PHE:H	6	2.72
(4,127)	1:A:56:PHE:CB	1:A:38:PHE:H	9	2.72
(4,202)	1:A:86:CYS:CB	1:A:30:ALA:H	18	2.71
(4,203)	1:A:86:CYS:CB	1:A:31:PHE:H	8	2.69
(4,199)	1:A:86:CYS:CB	1:A:24:ALA:H	14	2.69
(4,199)	1:A:86:CYS:CB	1:A:24:ALA:H	17	2.69
(4,6)	1:A:26:CYS:CB	1:A:44:MET:H	20	2.66
(4,40)	1:A:26:CYS:CB	1:A:103:SER:H	20	2.66
(4,205)	1:A:86:CYS:CB	1:A:33:LYS:H	13	2.66
(4,200)	1:A:86:CYS:CB	1:A:26:CYS:H	11	2.66
(4,173)	1:A:75:SER:CB	1:A:39:VAL:H	4	2.65
(4,206)	1:A:86:CYS:CB	1:A:34:GLY:H	4	2.64
(4,6)	1:A:26:CYS:CB	1:A:44:MET:H	18	2.63
(1,304)	1:A:26:CYS:CB	1:A:90:TRP:H	6	2.62
(4,199)	1:A:86:CYS:CB	1:A:24:ALA:H	15	2.61
(4,128)	1:A:56:PHE:CB	1:A:39:VAL:H	11	2.61
(4,198)	1:A:86:CYS:CB	1:A:23:TYR:H	5	2.58
(4,207)	1:A:86:CYS:CB	1:A:35:VAL:H	3	2.57
(4,204)	1:A:86:CYS:CB	1:A:32:MET:H	9	2.56
(4,67)	1:A:49:GLN:CB	1:A:68:VAL:H	13	2.54
(4,205)	1:A:86:CYS:CB	1:A:33:LYS:H	14	2.54
(4,5)	1:A:26:CYS:CB	1:A:43:GLY:H	8	2.52
(4,6)	1:A:26:CYS:CB	1:A:44:MET:H	19	2.51
(4,205)	1:A:86:CYS:CB	1:A:33:LYS:H	15	2.51

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,239)	1:A:86:CYS:CB	1:A:101:ASP:H	13	2.5
(4,202)	1:A:86:CYS:CB	1:A:30:ALA:H	3	2.5
(4,240)	1:A:86:CYS:CB	1:A:102:ARG:H	13	2.48
(4,199)	1:A:86:CYS:CB	1:A:24:ALA:H	3	2.47
(4,66)	1:A:49:GLN:CB	1:A:67:ALA:H	6	2.45
(4,128)	1:A:56:PHE:CB	1:A:39:VAL:H	7	2.45
(4,66)	1:A:49:GLN:CB	1:A:67:ALA:H	9	2.43
(4,204)	1:A:86:CYS:CB	1:A:32:MET:H	14	2.43
(4,6)	1:A:26:CYS:CB	1:A:44:MET:H	16	2.42
(4,205)	1:A:86:CYS:CB	1:A:33:LYS:H	20	2.42
(4,173)	1:A:75:SER:CB	1:A:39:VAL:H	17	2.42
(4,204)	1:A:86:CYS:CB	1:A:32:MET:H	3	2.4
(4,6)	1:A:26:CYS:CB	1:A:44:MET:H	15	2.39
(4,128)	1:A:56:PHE:CB	1:A:39:VAL:H	10	2.39
(4,128)	1:A:56:PHE:CB	1:A:39:VAL:H	13	2.39
(4,59)	1:A:49:GLN:CB	1:A:32:MET:H	17	2.38
(4,207)	1:A:86:CYS:CB	1:A:35:VAL:H	17	2.38
(4,6)	1:A:26:CYS:CB	1:A:44:MET:H	5	2.36
(4,59)	1:A:49:GLN:CB	1:A:32:MET:H	9	2.36
(4,239)	1:A:86:CYS:CB	1:A:101:ASP:H	8	2.36
(4,202)	1:A:86:CYS:CB	1:A:30:ALA:H	2	2.36
(4,128)	1:A:56:PHE:CB	1:A:39:VAL:H	8	2.36
(4,66)	1:A:49:GLN:CB	1:A:67:ALA:H	3	2.35
(4,128)	1:A:56:PHE:CB	1:A:39:VAL:H	2	2.34
(4,128)	1:A:56:PHE:CB	1:A:39:VAL:H	5	2.32
(4,196)	1:A:86:CYS:CB	1:A:16:LYS:H	15	2.31
(4,239)	1:A:86:CYS:CB	1:A:101:ASP:H	4	2.3
(4,67)	1:A:49:GLN:CB	1:A:68:VAL:H	7	2.27
(4,66)	1:A:49:GLN:CB	1:A:67:ALA:H	12	2.26
(4,199)	1:A:86:CYS:CB	1:A:24:ALA:H	6	2.25
(4,40)	1:A:26:CYS:CB	1:A:103:SER:H	19	2.22
(4,205)	1:A:86:CYS:CB	1:A:33:LYS:H	7	2.22
(4,205)	1:A:86:CYS:CB	1:A:33:LYS:H	1	2.2
(4,200)	1:A:86:CYS:CB	1:A:26:CYS:H	10	2.2
(4,198)	1:A:86:CYS:CB	1:A:23:TYR:H	6	2.19
(4,37)	1:A:26:CYS:CB	1:A:83:SER:H	10	2.18
(4,206)	1:A:86:CYS:CB	1:A:34:GLY:H	6	2.17
(4,199)	1:A:86:CYS:CB	1:A:24:ALA:H	13	2.17
(4,39)	1:A:26:CYS:CB	1:A:88:ASN:H	6	2.16
(4,202)	1:A:86:CYS:CB	1:A:30:ALA:H	4	2.16
(4,67)	1:A:49:GLN:CB	1:A:68:VAL:H	4	2.15
(4,205)	1:A:86:CYS:CB	1:A:33:LYS:H	12	2.15

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,59)	1:A:49:GLN:CB	1:A:32:MET:H	14	2.14
(4,199)	1:A:86:CYS:CB	1:A:24:ALA:H	9	2.13
(4,66)	1:A:49:GLN:CB	1:A:67:ALA:H	1	2.1
(4,59)	1:A:49:GLN:CB	1:A:32:MET:H	6	2.09
(4,200)	1:A:86:CYS:CB	1:A:26:CYS:H	2	2.09
(4,199)	1:A:86:CYS:CB	1:A:24:ALA:H	4	2.09
(4,199)	1:A:86:CYS:CB	1:A:24:ALA:H	8	2.09
(4,38)	1:A:26:CYS:CB	1:A:85:LYS:H	10	2.07
(4,200)	1:A:86:CYS:CB	1:A:26:CYS:H	19	2.07
(4,129)	1:A:56:PHE:CB	1:A:40:THR:H	6	2.06
(4,199)	1:A:86:CYS:CB	1:A:24:ALA:H	2	2.04
(1,55)	1:A:36:PHE:H	1:A:38:PHE:H	15	2.02
(1,55)	1:A:36:PHE:H	1:A:38:PHE:H	6	2.01
(1,55)	1:A:36:PHE:H	1:A:38:PHE:H	8	2.01
(1,55)	1:A:36:PHE:H	1:A:38:PHE:H	9	2.01
(1,55)	1:A:36:PHE:H	1:A:38:PHE:H	14	2.01
(1,55)	1:A:36:PHE:H	1:A:38:PHE:H	20	2.01
(1,21)	1:A:20:LEU:H	1:A:19:GLY:H	8	2.01
(1,20)	1:A:19:GLY:H	1:A:20:LEU:H	8	2.01
(4,200)	1:A:86:CYS:CB	1:A:26:CYS:H	16	2.0
(1,55)	1:A:36:PHE:H	1:A:38:PHE:H	1	2.0
(1,55)	1:A:36:PHE:H	1:A:38:PHE:H	4	2.0
(1,55)	1:A:36:PHE:H	1:A:38:PHE:H	5	2.0
(1,55)	1:A:36:PHE:H	1:A:38:PHE:H	7	2.0
(1,55)	1:A:36:PHE:H	1:A:38:PHE:H	11	2.0
(1,55)	1:A:36:PHE:H	1:A:38:PHE:H	18	2.0
(1,21)	1:A:20:LEU:H	1:A:19:GLY:H	16	2.0
(1,20)	1:A:19:GLY:H	1:A:20:LEU:H	16	2.0
(1,2)	1:A:5:GLY:H	1:A:4:LEU:H	4	2.0
(1,1)	1:A:4:LEU:H	1:A:5:GLY:H	4	2.0
(4,40)	1:A:26:CYS:CB	1:A:103:SER:H	15	1.99
(1,55)	1:A:36:PHE:H	1:A:38:PHE:H	2	1.99
(4,204)	1:A:86:CYS:CB	1:A:32:MET:H	15	1.98
(1,55)	1:A:36:PHE:H	1:A:38:PHE:H	19	1.98
(1,55)	1:A:36:PHE:H	1:A:38:PHE:H	10	1.97
(1,55)	1:A:36:PHE:H	1:A:38:PHE:H	16	1.97
(4,43)	1:A:26:CYS:CB	1:A:106:GLN:H	3	1.96
(4,200)	1:A:86:CYS:CB	1:A:26:CYS:H	14	1.96
(1,21)	1:A:20:LEU:H	1:A:19:GLY:H	6	1.96
(1,20)	1:A:19:GLY:H	1:A:20:LEU:H	6	1.96
(4,202)	1:A:86:CYS:CB	1:A:30:ALA:H	9	1.94
(1,2)	1:A:5:GLY:H	1:A:4:LEU:H	9	1.94

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1)	1:A:4:LEU:H	1:A:5:GLY:H	9	1.94
(4,202)	1:A:86:CYS:CB	1:A:30:ALA:H	16	1.93
(4,199)	1:A:86:CYS:CB	1:A:24:ALA:H	12	1.92
(1,2)	1:A:5:GLY:H	1:A:4:LEU:H	10	1.92
(1,146)	1:A:102:ARG:H	1:A:101:ASP:H	19	1.92
(1,144)	1:A:101:ASP:H	1:A:102:ARG:H	19	1.92
(1,1)	1:A:4:LEU:H	1:A:5:GLY:H	10	1.92
(1,146)	1:A:102:ARG:H	1:A:101:ASP:H	1	1.91
(1,144)	1:A:101:ASP:H	1:A:102:ARG:H	1	1.91
(4,199)	1:A:86:CYS:CB	1:A:24:ALA:H	7	1.9
(1,55)	1:A:36:PHE:H	1:A:38:PHE:H	12	1.9
(4,59)	1:A:49:GLN:CB	1:A:32:MET:H	1	1.89
(1,55)	1:A:36:PHE:H	1:A:38:PHE:H	17	1.89
(4,129)	1:A:56:PHE:CB	1:A:40:THR:H	14	1.88
(1,67)	1:A:42:THR:H	1:A:43:GLY:H	8	1.88
(1,63)	1:A:43:GLY:H	1:A:42:THR:H	8	1.88
(1,55)	1:A:36:PHE:H	1:A:38:PHE:H	13	1.88
(4,67)	1:A:49:GLN:CB	1:A:68:VAL:H	2	1.87
(4,202)	1:A:86:CYS:CB	1:A:30:ALA:H	17	1.87
(1,55)	1:A:36:PHE:H	1:A:38:PHE:H	3	1.87
(4,240)	1:A:86:CYS:CB	1:A:102:ARG:H	11	1.86
(1,21)	1:A:20:LEU:H	1:A:19:GLY:H	3	1.86
(1,20)	1:A:19:GLY:H	1:A:20:LEU:H	3	1.86
(1,149)	1:A:104:THR:H	1:A:103:SER:H	18	1.86
(1,148)	1:A:103:SER:H	1:A:104:THR:H	18	1.86
(4,239)	1:A:86:CYS:CB	1:A:101:ASP:H	11	1.85
(4,240)	1:A:86:CYS:CB	1:A:102:ARG:H	10	1.84
(4,201)	1:A:86:CYS:CB	1:A:27:GLN:H	20	1.84
(1,149)	1:A:104:THR:H	1:A:103:SER:H	1	1.84
(1,148)	1:A:103:SER:H	1:A:104:THR:H	1	1.84
(1,145)	1:A:100:LYS:H	1:A:101:ASP:H	20	1.84
(1,143)	1:A:101:ASP:H	1:A:100:LYS:H	20	1.84
(4,202)	1:A:86:CYS:CB	1:A:30:ALA:H	13	1.83
(4,204)	1:A:86:CYS:CB	1:A:32:MET:H	17	1.82
(1,2)	1:A:5:GLY:H	1:A:4:LEU:H	17	1.82
(1,1)	1:A:4:LEU:H	1:A:5:GLY:H	17	1.82
(4,59)	1:A:49:GLN:CB	1:A:32:MET:H	12	1.81
(1,21)	1:A:20:LEU:H	1:A:19:GLY:H	14	1.81
(1,20)	1:A:19:GLY:H	1:A:20:LEU:H	14	1.81
(1,2)	1:A:5:GLY:H	1:A:4:LEU:H	5	1.81
(1,1)	1:A:4:LEU:H	1:A:5:GLY:H	5	1.81
(1,2)	1:A:5:GLY:H	1:A:4:LEU:H	1	1.8

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,149)	1:A:104:THR:H	1:A:103:SER:H	17	1.8
(1,148)	1:A:103:SER:H	1:A:104:THR:H	17	1.8
(1,1)	1:A:4:LEU:H	1:A:5:GLY:H	1	1.8
(1,146)	1:A:102:ARG:H	1:A:101:ASP:H	18	1.79
(1,144)	1:A:101:ASP:H	1:A:102:ARG:H	18	1.79
(4,5)	1:A:26:CYS:CB	1:A:43:GLY:H	13	1.78
(1,2)	1:A:5:GLY:H	1:A:4:LEU:H	8	1.78
(1,1)	1:A:4:LEU:H	1:A:5:GLY:H	8	1.78
(4,204)	1:A:86:CYS:CB	1:A:32:MET:H	20	1.77
(4,203)	1:A:86:CYS:CB	1:A:31:PHE:H	5	1.77
(1,149)	1:A:104:THR:H	1:A:103:SER:H	5	1.77
(1,149)	1:A:104:THR:H	1:A:103:SER:H	16	1.77
(1,148)	1:A:103:SER:H	1:A:104:THR:H	5	1.77
(1,148)	1:A:103:SER:H	1:A:104:THR:H	16	1.77
(1,149)	1:A:104:THR:H	1:A:103:SER:H	2	1.76
(1,148)	1:A:103:SER:H	1:A:104:THR:H	2	1.76
(1,146)	1:A:102:ARG:H	1:A:101:ASP:H	8	1.76
(1,146)	1:A:102:ARG:H	1:A:101:ASP:H	15	1.76
(1,144)	1:A:101:ASP:H	1:A:102:ARG:H	8	1.76
(1,144)	1:A:101:ASP:H	1:A:102:ARG:H	15	1.76
(4,60)	1:A:49:GLN:CB	1:A:33:LYS:H	6	1.75
(4,199)	1:A:86:CYS:CB	1:A:24:ALA:H	1	1.75
(1,149)	1:A:104:THR:H	1:A:103:SER:H	19	1.75
(1,148)	1:A:103:SER:H	1:A:104:THR:H	19	1.75
(1,147)	1:A:103:SER:H	1:A:102:ARG:H	18	1.75
(4,202)	1:A:86:CYS:CB	1:A:30:ALA:H	8	1.74
(1,147)	1:A:103:SER:H	1:A:102:ARG:H	8	1.74
(1,146)	1:A:102:ARG:H	1:A:101:ASP:H	20	1.74
(1,144)	1:A:101:ASP:H	1:A:102:ARG:H	20	1.74
(1,147)	1:A:103:SER:H	1:A:102:ARG:H	14	1.73
(4,59)	1:A:49:GLN:CB	1:A:32:MET:H	11	1.72
(4,202)	1:A:86:CYS:CB	1:A:30:ALA:H	20	1.72
(4,5)	1:A:26:CYS:CB	1:A:43:GLY:H	7	1.71
(1,146)	1:A:102:ARG:H	1:A:101:ASP:H	10	1.71
(1,146)	1:A:102:ARG:H	1:A:101:ASP:H	14	1.71
(1,144)	1:A:101:ASP:H	1:A:102:ARG:H	10	1.71
(1,144)	1:A:101:ASP:H	1:A:102:ARG:H	14	1.71
(4,59)	1:A:49:GLN:CB	1:A:32:MET:H	5	1.7
(4,204)	1:A:86:CYS:CB	1:A:32:MET:H	18	1.7
(1,147)	1:A:103:SER:H	1:A:102:ARG:H	4	1.7
(1,146)	1:A:102:ARG:H	1:A:101:ASP:H	12	1.7
(1,144)	1:A:101:ASP:H	1:A:102:ARG:H	12	1.7

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:5:GLY:H	1:A:4:LEU:H	15	1.69
(1,149)	1:A:104:THR:H	1:A:103:SER:H	4	1.69
(1,148)	1:A:103:SER:H	1:A:104:THR:H	4	1.69
(1,1)	1:A:4:LEU:H	1:A:5:GLY:H	15	1.69
(4,60)	1:A:49:GLN:CB	1:A:33:LYS:H	14	1.68
(4,59)	1:A:49:GLN:CB	1:A:32:MET:H	18	1.68
(1,146)	1:A:102:ARG:H	1:A:101:ASP:H	4	1.67
(1,144)	1:A:101:ASP:H	1:A:102:ARG:H	4	1.67
(4,202)	1:A:86:CYS:CB	1:A:30:ALA:H	7	1.66
(1,21)	1:A:20:LEU:H	1:A:19:GLY:H	15	1.66
(1,20)	1:A:19:GLY:H	1:A:20:LEU:H	15	1.66
(1,149)	1:A:104:THR:H	1:A:103:SER:H	8	1.66
(1,149)	1:A:104:THR:H	1:A:103:SER:H	20	1.66
(1,148)	1:A:103:SER:H	1:A:104:THR:H	8	1.66
(1,148)	1:A:103:SER:H	1:A:104:THR:H	20	1.66
(1,147)	1:A:103:SER:H	1:A:102:ARG:H	11	1.66
(1,146)	1:A:102:ARG:H	1:A:101:ASP:H	11	1.65
(1,144)	1:A:101:ASP:H	1:A:102:ARG:H	11	1.65
(1,147)	1:A:103:SER:H	1:A:102:ARG:H	17	1.64
(4,5)	1:A:26:CYS:CB	1:A:43:GLY:H	9	1.63
(1,147)	1:A:103:SER:H	1:A:102:ARG:H	5	1.63
(4,44)	1:A:26:CYS:CB	1:A:107:ARG:H	3	1.62
(4,66)	1:A:49:GLN:CB	1:A:67:ALA:H	18	1.61
(4,163)	1:A:56:PHE:CB	1:A:108:SER:H	8	1.61
(1,145)	1:A:100:LYS:H	1:A:101:ASP:H	4	1.61
(1,143)	1:A:101:ASP:H	1:A:100:LYS:H	4	1.61
(4,60)	1:A:49:GLN:CB	1:A:33:LYS:H	9	1.6
(4,203)	1:A:86:CYS:CB	1:A:31:PHE:H	2	1.6
(1,149)	1:A:104:THR:H	1:A:103:SER:H	15	1.59
(1,148)	1:A:103:SER:H	1:A:104:THR:H	15	1.59
(1,146)	1:A:102:ARG:H	1:A:101:ASP:H	5	1.59
(1,144)	1:A:101:ASP:H	1:A:102:ARG:H	5	1.59
(4,202)	1:A:86:CYS:CB	1:A:30:ALA:H	5	1.58
(1,147)	1:A:103:SER:H	1:A:102:ARG:H	9	1.58
(1,147)	1:A:103:SER:H	1:A:102:ARG:H	20	1.58
(4,200)	1:A:86:CYS:CB	1:A:26:CYS:H	7	1.56
(4,59)	1:A:49:GLN:CB	1:A:32:MET:H	3	1.55
(4,200)	1:A:86:CYS:CB	1:A:26:CYS:H	13	1.55
(1,145)	1:A:100:LYS:H	1:A:101:ASP:H	19	1.55
(1,143)	1:A:101:ASP:H	1:A:100:LYS:H	19	1.55
(4,202)	1:A:86:CYS:CB	1:A:30:ALA:H	19	1.54
(4,201)	1:A:86:CYS:CB	1:A:27:GLN:H	15	1.54

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:5:GLY:H	1:A:4:LEU:H	7	1.54
(1,149)	1:A:104:THR:H	1:A:103:SER:H	7	1.54
(1,148)	1:A:103:SER:H	1:A:104:THR:H	7	1.54
(1,147)	1:A:103:SER:H	1:A:102:ARG:H	1	1.54
(1,146)	1:A:102:ARG:H	1:A:101:ASP:H	17	1.54
(1,144)	1:A:101:ASP:H	1:A:102:ARG:H	17	1.54
(1,1)	1:A:4:LEU:H	1:A:5:GLY:H	7	1.54
(4,59)	1:A:49:GLN:CB	1:A:32:MET:H	4	1.53
(4,66)	1:A:49:GLN:CB	1:A:67:ALA:H	13	1.52
(1,147)	1:A:103:SER:H	1:A:102:ARG:H	16	1.52
(1,146)	1:A:102:ARG:H	1:A:101:ASP:H	2	1.52
(1,145)	1:A:100:LYS:H	1:A:101:ASP:H	15	1.52
(1,144)	1:A:101:ASP:H	1:A:102:ARG:H	2	1.52
(1,143)	1:A:101:ASP:H	1:A:100:LYS:H	15	1.52
(4,203)	1:A:86:CYS:CB	1:A:31:PHE:H	13	1.51
(4,202)	1:A:86:CYS:CB	1:A:30:ALA:H	1	1.51
(4,128)	1:A:56:PHE:CB	1:A:39:VAL:H	16	1.51
(4,59)	1:A:49:GLN:CB	1:A:32:MET:H	7	1.5
(4,202)	1:A:86:CYS:CB	1:A:30:ALA:H	15	1.5
(1,149)	1:A:104:THR:H	1:A:103:SER:H	13	1.5
(1,148)	1:A:103:SER:H	1:A:104:THR:H	13	1.5
(1,146)	1:A:102:ARG:H	1:A:101:ASP:H	6	1.5
(1,145)	1:A:100:LYS:H	1:A:101:ASP:H	9	1.5
(1,144)	1:A:101:ASP:H	1:A:102:ARG:H	6	1.5
(1,143)	1:A:101:ASP:H	1:A:100:LYS:H	9	1.5
(4,128)	1:A:56:PHE:CB	1:A:39:VAL:H	4	1.49
(1,21)	1:A:20:LEU:H	1:A:19:GLY:H	17	1.49
(1,21)	1:A:20:LEU:H	1:A:19:GLY:H	18	1.49
(1,20)	1:A:19:GLY:H	1:A:20:LEU:H	17	1.49
(1,20)	1:A:19:GLY:H	1:A:20:LEU:H	18	1.49
(1,21)	1:A:20:LEU:H	1:A:19:GLY:H	12	1.47
(1,20)	1:A:19:GLY:H	1:A:20:LEU:H	12	1.47
(4,204)	1:A:86:CYS:CB	1:A:32:MET:H	8	1.46
(1,146)	1:A:102:ARG:H	1:A:101:ASP:H	16	1.46
(1,144)	1:A:101:ASP:H	1:A:102:ARG:H	16	1.46
(4,41)	1:A:26:CYS:CB	1:A:104:THR:H	15	1.45
(4,59)	1:A:49:GLN:CB	1:A:32:MET:H	2	1.44
(1,146)	1:A:102:ARG:H	1:A:101:ASP:H	7	1.44
(1,144)	1:A:101:ASP:H	1:A:102:ARG:H	7	1.44
(4,59)	1:A:49:GLN:CB	1:A:32:MET:H	8	1.43
(4,128)	1:A:56:PHE:CB	1:A:39:VAL:H	3	1.43
(1,147)	1:A:103:SER:H	1:A:102:ARG:H	2	1.43

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,146)	1:A:102:ARG:H	1:A:101:ASP:H	13	1.43
(1,144)	1:A:101:ASP:H	1:A:102:ARG:H	13	1.43
(4,59)	1:A:49:GLN:CB	1:A:32:MET:H	19	1.42
(4,203)	1:A:86:CYS:CB	1:A:31:PHE:H	7	1.41
(4,59)	1:A:49:GLN:CB	1:A:32:MET:H	16	1.38
(1,147)	1:A:103:SER:H	1:A:102:ARG:H	13	1.38
(1,2)	1:A:5:GLY:H	1:A:4:LEU:H	20	1.37
(1,1)	1:A:4:LEU:H	1:A:5:GLY:H	20	1.37
(4,163)	1:A:56:PHE:CB	1:A:108:SER:H	10	1.36
(1,21)	1:A:20:LEU:H	1:A:19:GLY:H	7	1.35
(1,20)	1:A:19:GLY:H	1:A:20:LEU:H	7	1.35
(1,149)	1:A:104:THR:H	1:A:103:SER:H	14	1.34
(1,148)	1:A:103:SER:H	1:A:104:THR:H	14	1.34
(4,207)	1:A:86:CYS:CB	1:A:35:VAL:H	4	1.33
(1,67)	1:A:42:THR:H	1:A:43:GLY:H	13	1.33
(1,63)	1:A:43:GLY:H	1:A:42:THR:H	13	1.33
(1,146)	1:A:102:ARG:H	1:A:101:ASP:H	9	1.33
(1,144)	1:A:101:ASP:H	1:A:102:ARG:H	9	1.33
(4,200)	1:A:86:CYS:CB	1:A:26:CYS:H	6	1.31
(1,67)	1:A:42:THR:H	1:A:43:GLY:H	17	1.31
(1,63)	1:A:43:GLY:H	1:A:42:THR:H	17	1.31
(4,66)	1:A:49:GLN:CB	1:A:67:ALA:H	4	1.3
(4,203)	1:A:86:CYS:CB	1:A:31:PHE:H	1	1.3
(4,202)	1:A:86:CYS:CB	1:A:30:ALA:H	12	1.3
(1,146)	1:A:102:ARG:H	1:A:101:ASP:H	3	1.3
(1,144)	1:A:101:ASP:H	1:A:102:ARG:H	3	1.3
(4,60)	1:A:49:GLN:CB	1:A:33:LYS:H	17	1.29
(4,201)	1:A:86:CYS:CB	1:A:27:GLN:H	3	1.29
(4,5)	1:A:26:CYS:CB	1:A:43:GLY:H	2	1.28
(4,206)	1:A:86:CYS:CB	1:A:34:GLY:H	14	1.28
(4,203)	1:A:86:CYS:CB	1:A:31:PHE:H	12	1.28
(4,59)	1:A:49:GLN:CB	1:A:32:MET:H	10	1.26
(4,59)	1:A:49:GLN:CB	1:A:32:MET:H	13	1.26
(1,2)	1:A:5:GLY:H	1:A:4:LEU:H	14	1.26
(1,145)	1:A:100:LYS:H	1:A:101:ASP:H	6	1.26
(1,143)	1:A:101:ASP:H	1:A:100:LYS:H	6	1.26
(1,1)	1:A:4:LEU:H	1:A:5:GLY:H	14	1.26
(4,201)	1:A:86:CYS:CB	1:A:27:GLN:H	8	1.24
(4,128)	1:A:56:PHE:CB	1:A:39:VAL:H	18	1.23
(1,67)	1:A:42:THR:H	1:A:43:GLY:H	3	1.23
(1,63)	1:A:43:GLY:H	1:A:42:THR:H	3	1.23
(1,147)	1:A:103:SER:H	1:A:102:ARG:H	10	1.22

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,241)	1:A:86:CYS:CB	1:A:103:SER:H	10	1.21
(4,201)	1:A:86:CYS:CB	1:A:27:GLN:H	17	1.21
(4,203)	1:A:86:CYS:CB	1:A:31:PHE:H	18	1.2
(4,201)	1:A:86:CYS:CB	1:A:27:GLN:H	13	1.19
(1,147)	1:A:103:SER:H	1:A:102:ARG:H	19	1.19
(4,128)	1:A:56:PHE:CB	1:A:39:VAL:H	19	1.18
(1,67)	1:A:42:THR:H	1:A:43:GLY:H	7	1.18
(1,67)	1:A:42:THR:H	1:A:43:GLY:H	20	1.18
(1,63)	1:A:43:GLY:H	1:A:42:THR:H	7	1.18
(1,63)	1:A:43:GLY:H	1:A:42:THR:H	20	1.18
(1,149)	1:A:104:THR:H	1:A:103:SER:H	9	1.18
(1,148)	1:A:103:SER:H	1:A:104:THR:H	9	1.18
(1,151)	1:A:97:GLN:H	1:A:98:LEU:H	18	1.17
(1,21)	1:A:20:LEU:H	1:A:19:GLY:H	2	1.16
(1,20)	1:A:19:GLY:H	1:A:20:LEU:H	2	1.16
(1,151)	1:A:97:GLN:H	1:A:98:LEU:H	2	1.16
(4,66)	1:A:49:GLN:CB	1:A:67:ALA:H	7	1.15
(4,201)	1:A:86:CYS:CB	1:A:27:GLN:H	2	1.15
(4,128)	1:A:56:PHE:CB	1:A:39:VAL:H	6	1.15
(1,151)	1:A:97:GLN:H	1:A:98:LEU:H	20	1.15
(1,21)	1:A:20:LEU:H	1:A:19:GLY:H	11	1.14
(1,20)	1:A:19:GLY:H	1:A:20:LEU:H	11	1.14
(1,151)	1:A:97:GLN:H	1:A:98:LEU:H	4	1.14
(1,151)	1:A:97:GLN:H	1:A:98:LEU:H	19	1.14
(1,21)	1:A:20:LEU:H	1:A:19:GLY:H	9	1.13
(1,20)	1:A:19:GLY:H	1:A:20:LEU:H	9	1.13
(1,151)	1:A:97:GLN:H	1:A:98:LEU:H	1	1.13
(4,200)	1:A:86:CYS:CB	1:A:26:CYS:H	1	1.12
(1,67)	1:A:42:THR:H	1:A:43:GLY:H	6	1.12
(1,63)	1:A:43:GLY:H	1:A:42:THR:H	6	1.12
(1,151)	1:A:97:GLN:H	1:A:98:LEU:H	13	1.12
(1,151)	1:A:97:GLN:H	1:A:98:LEU:H	16	1.12
(1,145)	1:A:100:LYS:H	1:A:101:ASP:H	13	1.12
(1,143)	1:A:101:ASP:H	1:A:100:LYS:H	13	1.12
(1,151)	1:A:97:GLN:H	1:A:98:LEU:H	17	1.11
(1,149)	1:A:104:THR:H	1:A:103:SER:H	11	1.11
(1,148)	1:A:103:SER:H	1:A:104:THR:H	11	1.11
(4,239)	1:A:86:CYS:CB	1:A:101:ASP:H	10	1.1
(4,129)	1:A:56:PHE:CB	1:A:40:THR:H	20	1.1
(1,68)	1:A:45:ALA:H	1:A:44:MET:H	9	1.1
(1,68)	1:A:45:ALA:H	1:A:44:MET:H	17	1.1
(1,65)	1:A:44:MET:H	1:A:45:ALA:H	9	1.1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,65)	1:A:44:MET:H	1:A:45:ALA:H	17	1.1
(1,68)	1:A:45:ALA:H	1:A:44:MET:H	3	1.09
(1,68)	1:A:45:ALA:H	1:A:44:MET:H	5	1.09
(1,68)	1:A:45:ALA:H	1:A:44:MET:H	6	1.09
(1,68)	1:A:45:ALA:H	1:A:44:MET:H	20	1.09
(1,65)	1:A:44:MET:H	1:A:45:ALA:H	3	1.09
(1,65)	1:A:44:MET:H	1:A:45:ALA:H	5	1.09
(1,65)	1:A:44:MET:H	1:A:45:ALA:H	6	1.09
(1,65)	1:A:44:MET:H	1:A:45:ALA:H	20	1.09
(4,200)	1:A:86:CYS:CB	1:A:26:CYS:H	12	1.08
(1,145)	1:A:100:LYS:H	1:A:101:ASP:H	16	1.08
(1,143)	1:A:101:ASP:H	1:A:100:LYS:H	16	1.08
(1,68)	1:A:45:ALA:H	1:A:44:MET:H	12	1.07
(1,65)	1:A:44:MET:H	1:A:45:ALA:H	12	1.07
(4,201)	1:A:86:CYS:CB	1:A:27:GLN:H	18	1.06
(1,68)	1:A:45:ALA:H	1:A:44:MET:H	14	1.06
(1,65)	1:A:44:MET:H	1:A:45:ALA:H	14	1.06
(4,5)	1:A:26:CYS:CB	1:A:43:GLY:H	17	1.05
(4,128)	1:A:56:PHE:CB	1:A:39:VAL:H	14	1.05
(1,68)	1:A:45:ALA:H	1:A:44:MET:H	1	1.05
(1,65)	1:A:44:MET:H	1:A:45:ALA:H	1	1.05
(1,151)	1:A:97:GLN:H	1:A:98:LEU:H	10	1.04
(1,151)	1:A:97:GLN:H	1:A:98:LEU:H	14	1.04
(1,145)	1:A:100:LYS:H	1:A:101:ASP:H	10	1.04
(1,143)	1:A:101:ASP:H	1:A:100:LYS:H	10	1.04
(4,201)	1:A:86:CYS:CB	1:A:27:GLN:H	4	1.02
(1,68)	1:A:45:ALA:H	1:A:44:MET:H	4	1.01
(1,68)	1:A:45:ALA:H	1:A:44:MET:H	13	1.01
(1,65)	1:A:44:MET:H	1:A:45:ALA:H	4	1.01
(1,65)	1:A:44:MET:H	1:A:45:ALA:H	13	1.01
(1,147)	1:A:103:SER:H	1:A:102:ARG:H	7	1.01
(4,41)	1:A:26:CYS:CB	1:A:104:THR:H	3	1.0
(4,201)	1:A:86:CYS:CB	1:A:27:GLN:H	7	0.99
(4,204)	1:A:86:CYS:CB	1:A:32:MET:H	4	0.98
(1,21)	1:A:20:LEU:H	1:A:19:GLY:H	4	0.98
(1,20)	1:A:19:GLY:H	1:A:20:LEU:H	4	0.98
(4,199)	1:A:86:CYS:CB	1:A:24:ALA:H	18	0.97
(1,2)	1:A:5:GLY:H	1:A:4:LEU:H	3	0.97
(1,1)	1:A:4:LEU:H	1:A:5:GLY:H	3	0.97
(4,5)	1:A:26:CYS:CB	1:A:43:GLY:H	4	0.96
(1,2)	1:A:5:GLY:H	1:A:4:LEU:H	16	0.95
(1,151)	1:A:97:GLN:H	1:A:98:LEU:H	15	0.95

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1)	1:A:4:LEU:H	1:A:5:GLY:H	16	0.95
(1,2)	1:A:5:GLY:H	1:A:4:LEU:H	18	0.94
(1,1)	1:A:4:LEU:H	1:A:5:GLY:H	18	0.94
(1,68)	1:A:45:ALA:H	1:A:44:MET:H	10	0.93
(1,65)	1:A:44:MET:H	1:A:45:ALA:H	10	0.93
(1,147)	1:A:103:SER:H	1:A:102:ARG:H	15	0.93
(1,147)	1:A:103:SER:H	1:A:102:ARG:H	6	0.92
(1,147)	1:A:103:SER:H	1:A:102:ARG:H	3	0.91
(1,51)	1:A:35:VAL:H	1:A:34:GLY:H	19	0.9
(1,46)	1:A:31:PHE:H	1:A:32:MET:H	7	0.9
(1,44)	1:A:32:MET:H	1:A:31:PHE:H	7	0.9
(1,27)	1:A:21:GLY:H	1:A:20:LEU:H	17	0.9
(1,26)	1:A:20:LEU:H	1:A:21:GLY:H	17	0.9
(1,23)	1:A:21:GLY:H	1:A:20:LEU:H	17	0.9
(1,22)	1:A:20:LEU:H	1:A:21:GLY:H	17	0.9
(1,13)	1:A:13:VAL:H	1:A:12:ALA:H	4	0.9
(1,70)	1:A:46:PHE:H	1:A:45:ALA:H	11	0.89
(1,70)	1:A:46:PHE:H	1:A:45:ALA:H	16	0.89
(1,70)	1:A:46:PHE:H	1:A:45:ALA:H	18	0.89
(1,70)	1:A:46:PHE:H	1:A:45:ALA:H	19	0.89
(1,69)	1:A:45:ALA:H	1:A:46:PHE:H	11	0.89
(1,69)	1:A:45:ALA:H	1:A:46:PHE:H	16	0.89
(1,69)	1:A:45:ALA:H	1:A:46:PHE:H	18	0.89
(1,69)	1:A:45:ALA:H	1:A:46:PHE:H	19	0.89
(1,68)	1:A:45:ALA:H	1:A:44:MET:H	7	0.89
(1,67)	1:A:42:THR:H	1:A:43:GLY:H	14	0.89
(1,65)	1:A:44:MET:H	1:A:45:ALA:H	7	0.89
(1,63)	1:A:43:GLY:H	1:A:42:THR:H	14	0.89
(1,51)	1:A:35:VAL:H	1:A:34:GLY:H	4	0.89
(1,27)	1:A:21:GLY:H	1:A:20:LEU:H	19	0.89
(1,26)	1:A:20:LEU:H	1:A:21:GLY:H	19	0.89
(1,23)	1:A:21:GLY:H	1:A:20:LEU:H	19	0.89
(1,22)	1:A:20:LEU:H	1:A:21:GLY:H	19	0.89
(1,13)	1:A:13:VAL:H	1:A:12:ALA:H	12	0.89
(4,5)	1:A:26:CYS:CB	1:A:43:GLY:H	12	0.88
(1,70)	1:A:46:PHE:H	1:A:45:ALA:H	4	0.88
(1,69)	1:A:45:ALA:H	1:A:46:PHE:H	4	0.88
(1,68)	1:A:45:ALA:H	1:A:44:MET:H	11	0.88
(1,68)	1:A:45:ALA:H	1:A:44:MET:H	18	0.88
(1,65)	1:A:44:MET:H	1:A:45:ALA:H	11	0.88
(1,65)	1:A:44:MET:H	1:A:45:ALA:H	18	0.88
(4,129)	1:A:56:PHE:CB	1:A:40:THR:H	11	0.87

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,70)	1:A:46:PHE:H	1:A:45:ALA:H	1	0.87
(1,69)	1:A:45:ALA:H	1:A:46:PHE:H	1	0.87
(1,68)	1:A:45:ALA:H	1:A:44:MET:H	8	0.87
(1,65)	1:A:44:MET:H	1:A:45:ALA:H	8	0.87
(1,56)	1:A:37:THR:H	1:A:36:PHE:H	15	0.87
(1,54)	1:A:36:PHE:H	1:A:37:THR:H	15	0.87
(1,51)	1:A:35:VAL:H	1:A:34:GLY:H	18	0.87
(1,51)	1:A:35:VAL:H	1:A:34:GLY:H	20	0.87
(1,13)	1:A:13:VAL:H	1:A:12:ALA:H	3	0.87
(1,68)	1:A:45:ALA:H	1:A:44:MET:H	2	0.86
(1,65)	1:A:44:MET:H	1:A:45:ALA:H	2	0.86
(1,27)	1:A:21:GLY:H	1:A:20:LEU:H	3	0.86
(1,26)	1:A:20:LEU:H	1:A:21:GLY:H	3	0.86
(1,23)	1:A:21:GLY:H	1:A:20:LEU:H	3	0.86
(1,22)	1:A:20:LEU:H	1:A:21:GLY:H	3	0.86
(1,13)	1:A:13:VAL:H	1:A:12:ALA:H	16	0.86
(1,70)	1:A:46:PHE:H	1:A:45:ALA:H	6	0.85
(1,70)	1:A:46:PHE:H	1:A:45:ALA:H	14	0.85
(1,69)	1:A:45:ALA:H	1:A:46:PHE:H	6	0.85
(1,69)	1:A:45:ALA:H	1:A:46:PHE:H	14	0.85
(1,51)	1:A:35:VAL:H	1:A:34:GLY:H	5	0.85
(1,51)	1:A:35:VAL:H	1:A:34:GLY:H	11	0.85
(1,51)	1:A:35:VAL:H	1:A:34:GLY:H	12	0.85
(1,51)	1:A:35:VAL:H	1:A:34:GLY:H	17	0.85
(1,45)	1:A:31:PHE:H	1:A:30:ALA:H	19	0.85
(1,43)	1:A:30:ALA:H	1:A:31:PHE:H	19	0.85
(1,35)	1:A:25:ALA:H	1:A:24:ALA:H	15	0.85
(1,33)	1:A:24:ALA:H	1:A:25:ALA:H	15	0.85
(1,29)	1:A:22:GLU:H	1:A:21:GLY:H	16	0.85
(1,28)	1:A:21:GLY:H	1:A:22:GLU:H	16	0.85
(1,24)	1:A:21:GLY:H	1:A:22:GLU:H	16	0.85
(1,70)	1:A:46:PHE:H	1:A:45:ALA:H	2	0.84
(1,70)	1:A:46:PHE:H	1:A:45:ALA:H	10	0.84
(1,69)	1:A:45:ALA:H	1:A:46:PHE:H	2	0.84
(1,69)	1:A:45:ALA:H	1:A:46:PHE:H	10	0.84
(1,67)	1:A:42:THR:H	1:A:43:GLY:H	9	0.84
(1,63)	1:A:43:GLY:H	1:A:42:THR:H	9	0.84
(1,60)	1:A:38:PHE:H	1:A:39:VAL:H	19	0.84
(1,59)	1:A:39:VAL:H	1:A:38:PHE:H	19	0.84
(1,51)	1:A:35:VAL:H	1:A:34:GLY:H	8	0.84
(1,46)	1:A:31:PHE:H	1:A:32:MET:H	5	0.84
(1,45)	1:A:31:PHE:H	1:A:30:ALA:H	5	0.84

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,45)	1:A:31:PHE:H	1:A:30:ALA:H	12	0.84
(1,44)	1:A:32:MET:H	1:A:31:PHE:H	5	0.84
(1,43)	1:A:30:ALA:H	1:A:31:PHE:H	5	0.84
(1,43)	1:A:30:ALA:H	1:A:31:PHE:H	12	0.84
(1,29)	1:A:22:GLU:H	1:A:21:GLY:H	17	0.84
(1,28)	1:A:21:GLY:H	1:A:22:GLU:H	17	0.84
(1,24)	1:A:21:GLY:H	1:A:22:GLU:H	17	0.84
(1,70)	1:A:46:PHE:H	1:A:45:ALA:H	12	0.83
(1,69)	1:A:45:ALA:H	1:A:46:PHE:H	12	0.83
(1,68)	1:A:45:ALA:H	1:A:44:MET:H	19	0.83
(1,65)	1:A:44:MET:H	1:A:45:ALA:H	19	0.83
(1,60)	1:A:38:PHE:H	1:A:39:VAL:H	4	0.83
(1,59)	1:A:39:VAL:H	1:A:38:PHE:H	4	0.83
(1,56)	1:A:37:THR:H	1:A:36:PHE:H	6	0.83
(1,56)	1:A:37:THR:H	1:A:36:PHE:H	18	0.83
(1,54)	1:A:36:PHE:H	1:A:37:THR:H	6	0.83
(1,54)	1:A:36:PHE:H	1:A:37:THR:H	18	0.83
(1,51)	1:A:35:VAL:H	1:A:34:GLY:H	2	0.83
(1,49)	1:A:33:LYS:H	1:A:32:MET:H	9	0.83
(1,47)	1:A:32:MET:H	1:A:33:LYS:H	9	0.83
(1,34)	1:A:24:ALA:H	1:A:23:TYR:H	7	0.83
(1,32)	1:A:23:TYR:H	1:A:24:ALA:H	7	0.83
(1,2)	1:A:5:GLY:H	1:A:4:LEU:H	13	0.83
(1,1)	1:A:4:LEU:H	1:A:5:GLY:H	13	0.83
(1,75)	1:A:50:MET:H	1:A:49:GLN:H	20	0.82
(1,74)	1:A:49:GLN:H	1:A:50:MET:H	20	0.82
(1,70)	1:A:46:PHE:H	1:A:45:ALA:H	17	0.82
(1,69)	1:A:45:ALA:H	1:A:46:PHE:H	17	0.82
(1,50)	1:A:34:GLY:H	1:A:33:LYS:H	9	0.82
(1,48)	1:A:33:LYS:H	1:A:34:GLY:H	9	0.82
(1,46)	1:A:31:PHE:H	1:A:32:MET:H	12	0.82
(1,45)	1:A:31:PHE:H	1:A:30:ALA:H	9	0.82
(1,45)	1:A:31:PHE:H	1:A:30:ALA:H	15	0.82
(1,44)	1:A:32:MET:H	1:A:31:PHE:H	12	0.82
(1,43)	1:A:30:ALA:H	1:A:31:PHE:H	9	0.82
(1,43)	1:A:30:ALA:H	1:A:31:PHE:H	15	0.82
(1,29)	1:A:22:GLU:H	1:A:21:GLY:H	7	0.82
(1,28)	1:A:21:GLY:H	1:A:22:GLU:H	7	0.82
(1,27)	1:A:21:GLY:H	1:A:20:LEU:H	8	0.82
(1,26)	1:A:20:LEU:H	1:A:21:GLY:H	8	0.82
(1,24)	1:A:21:GLY:H	1:A:22:GLU:H	7	0.82
(1,23)	1:A:21:GLY:H	1:A:20:LEU:H	8	0.82

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,22)	1:A:20:LEU:H	1:A:21:GLY:H	8	0.82
(1,134)	1:A:93:LEU:H	1:A:92:PHE:H	12	0.82
(1,133)	1:A:92:PHE:H	1:A:93:LEU:H	12	0.82
(1,13)	1:A:13:VAL:H	1:A:12:ALA:H	10	0.82
(4,5)	1:A:26:CYS:CB	1:A:43:GLY:H	3	0.81
(4,129)	1:A:56:PHE:CB	1:A:40:THR:H	8	0.81
(4,129)	1:A:56:PHE:CB	1:A:40:THR:H	10	0.81
(4,129)	1:A:56:PHE:CB	1:A:40:THR:H	12	0.81
(1,70)	1:A:46:PHE:H	1:A:45:ALA:H	3	0.81
(1,70)	1:A:46:PHE:H	1:A:45:ALA:H	5	0.81
(1,70)	1:A:46:PHE:H	1:A:45:ALA:H	9	0.81
(1,70)	1:A:46:PHE:H	1:A:45:ALA:H	20	0.81
(1,69)	1:A:45:ALA:H	1:A:46:PHE:H	3	0.81
(1,69)	1:A:45:ALA:H	1:A:46:PHE:H	5	0.81
(1,69)	1:A:45:ALA:H	1:A:46:PHE:H	9	0.81
(1,69)	1:A:45:ALA:H	1:A:46:PHE:H	20	0.81
(1,46)	1:A:31:PHE:H	1:A:32:MET:H	20	0.81
(1,44)	1:A:32:MET:H	1:A:31:PHE:H	20	0.81
(1,29)	1:A:22:GLU:H	1:A:21:GLY:H	14	0.81
(1,29)	1:A:22:GLU:H	1:A:21:GLY:H	15	0.81
(1,28)	1:A:21:GLY:H	1:A:22:GLU:H	14	0.81
(1,28)	1:A:21:GLY:H	1:A:22:GLU:H	15	0.81
(1,27)	1:A:21:GLY:H	1:A:20:LEU:H	14	0.81
(1,26)	1:A:20:LEU:H	1:A:21:GLY:H	14	0.81
(1,24)	1:A:21:GLY:H	1:A:22:GLU:H	14	0.81
(1,24)	1:A:21:GLY:H	1:A:22:GLU:H	15	0.81
(1,23)	1:A:21:GLY:H	1:A:20:LEU:H	14	0.81
(1,22)	1:A:20:LEU:H	1:A:21:GLY:H	14	0.81
(1,134)	1:A:93:LEU:H	1:A:92:PHE:H	11	0.81
(1,134)	1:A:93:LEU:H	1:A:92:PHE:H	14	0.81
(1,133)	1:A:92:PHE:H	1:A:93:LEU:H	11	0.81
(1,133)	1:A:92:PHE:H	1:A:93:LEU:H	14	0.81
(1,108)	1:A:76:TYR:H	1:A:77:GLY:H	12	0.81
(1,107)	1:A:77:GLY:H	1:A:76:TYR:H	12	0.81
(4,60)	1:A:49:GLN:CB	1:A:33:LYS:H	4	0.8
(1,79)	1:A:52:ILE:H	1:A:51:PHE:H	6	0.8
(1,79)	1:A:52:ILE:H	1:A:51:PHE:H	9	0.8
(1,76)	1:A:51:PHE:H	1:A:52:ILE:H	6	0.8
(1,76)	1:A:51:PHE:H	1:A:52:ILE:H	9	0.8
(1,75)	1:A:50:MET:H	1:A:49:GLN:H	12	0.8
(1,74)	1:A:49:GLN:H	1:A:50:MET:H	12	0.8
(1,70)	1:A:46:PHE:H	1:A:45:ALA:H	13	0.8

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,69)	1:A:45:ALA:H	1:A:46:PHE:H	13	0.8
(1,68)	1:A:45:ALA:H	1:A:44:MET:H	16	0.8
(1,66)	1:A:44:MET:H	1:A:43:GLY:H	9	0.8
(1,65)	1:A:44:MET:H	1:A:45:ALA:H	16	0.8
(1,64)	1:A:43:GLY:H	1:A:44:MET:H	9	0.8
(1,56)	1:A:37:THR:H	1:A:36:PHE:H	19	0.8
(1,54)	1:A:36:PHE:H	1:A:37:THR:H	19	0.8
(1,51)	1:A:35:VAL:H	1:A:34:GLY:H	10	0.8
(1,46)	1:A:31:PHE:H	1:A:32:MET:H	1	0.8
(1,46)	1:A:31:PHE:H	1:A:32:MET:H	16	0.8
(1,45)	1:A:31:PHE:H	1:A:30:ALA:H	2	0.8
(1,45)	1:A:31:PHE:H	1:A:30:ALA:H	8	0.8
(1,44)	1:A:32:MET:H	1:A:31:PHE:H	1	0.8
(1,44)	1:A:32:MET:H	1:A:31:PHE:H	16	0.8
(1,43)	1:A:30:ALA:H	1:A:31:PHE:H	2	0.8
(1,43)	1:A:30:ALA:H	1:A:31:PHE:H	8	0.8
(1,36)	1:A:25:ALA:H	1:A:26:CYS:H	14	0.8
(1,29)	1:A:22:GLU:H	1:A:21:GLY:H	11	0.8
(1,28)	1:A:21:GLY:H	1:A:22:GLU:H	11	0.8
(1,24)	1:A:21:GLY:H	1:A:22:GLU:H	11	0.8
(1,134)	1:A:93:LEU:H	1:A:92:PHE:H	8	0.8
(1,133)	1:A:92:PHE:H	1:A:93:LEU:H	8	0.8
(1,13)	1:A:13:VAL:H	1:A:12:ALA:H	17	0.8
(1,108)	1:A:76:TYR:H	1:A:77:GLY:H	16	0.8
(1,107)	1:A:77:GLY:H	1:A:76:TYR:H	16	0.8
(1,8)	1:A:9:VAL:H	1:A:8:ARG:H	16	0.79
(1,79)	1:A:52:ILE:H	1:A:51:PHE:H	20	0.79
(1,76)	1:A:51:PHE:H	1:A:52:ILE:H	20	0.79
(1,7)	1:A:8:ARG:H	1:A:9:VAL:H	16	0.79
(1,56)	1:A:37:THR:H	1:A:36:PHE:H	2	0.79
(1,56)	1:A:37:THR:H	1:A:36:PHE:H	8	0.79
(1,54)	1:A:36:PHE:H	1:A:37:THR:H	2	0.79
(1,54)	1:A:36:PHE:H	1:A:37:THR:H	8	0.79
(1,51)	1:A:35:VAL:H	1:A:34:GLY:H	6	0.79
(1,49)	1:A:33:LYS:H	1:A:32:MET:H	4	0.79
(1,49)	1:A:33:LYS:H	1:A:32:MET:H	6	0.79
(1,49)	1:A:33:LYS:H	1:A:32:MET:H	17	0.79
(1,47)	1:A:32:MET:H	1:A:33:LYS:H	4	0.79
(1,47)	1:A:32:MET:H	1:A:33:LYS:H	6	0.79
(1,47)	1:A:32:MET:H	1:A:33:LYS:H	17	0.79
(1,46)	1:A:31:PHE:H	1:A:32:MET:H	8	0.79
(1,46)	1:A:31:PHE:H	1:A:32:MET:H	9	0.79

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,46)	1:A:31:PHE:H	1:A:32:MET:H	10	0.79
(1,46)	1:A:31:PHE:H	1:A:32:MET:H	15	0.79
(1,45)	1:A:31:PHE:H	1:A:30:ALA:H	1	0.79
(1,45)	1:A:31:PHE:H	1:A:30:ALA:H	7	0.79
(1,45)	1:A:31:PHE:H	1:A:30:ALA:H	11	0.79
(1,45)	1:A:31:PHE:H	1:A:30:ALA:H	20	0.79
(1,44)	1:A:32:MET:H	1:A:31:PHE:H	8	0.79
(1,44)	1:A:32:MET:H	1:A:31:PHE:H	9	0.79
(1,44)	1:A:32:MET:H	1:A:31:PHE:H	10	0.79
(1,44)	1:A:32:MET:H	1:A:31:PHE:H	15	0.79
(1,43)	1:A:30:ALA:H	1:A:31:PHE:H	1	0.79
(1,43)	1:A:30:ALA:H	1:A:31:PHE:H	7	0.79
(1,43)	1:A:30:ALA:H	1:A:31:PHE:H	11	0.79
(1,43)	1:A:30:ALA:H	1:A:31:PHE:H	20	0.79
(1,31)	1:A:23:TYR:H	1:A:22:GLU:H	16	0.79
(1,30)	1:A:22:GLU:H	1:A:23:TYR:H	16	0.79
(1,136)	1:A:94:GLU:H	1:A:93:LEU:H	10	0.79
(1,135)	1:A:93:LEU:H	1:A:94:GLU:H	10	0.79
(1,134)	1:A:93:LEU:H	1:A:92:PHE:H	7	0.79
(1,133)	1:A:92:PHE:H	1:A:93:LEU:H	7	0.79
(1,131)	1:A:92:PHE:H	1:A:91:LEU:H	19	0.79
(1,130)	1:A:91:LEU:H	1:A:92:PHE:H	19	0.79
(1,125)	1:A:88:ASN:H	1:A:87:ASN:H	20	0.79
(1,123)	1:A:87:ASN:H	1:A:88:ASN:H	20	0.79
(1,119)	1:A:84:GLU:H	1:A:85:LYS:H	13	0.79
(4,129)	1:A:56:PHE:CB	1:A:40:THR:H	2	0.78
(1,8)	1:A:9:VAL:H	1:A:8:ARG:H	18	0.78
(1,79)	1:A:52:ILE:H	1:A:51:PHE:H	12	0.78
(1,76)	1:A:51:PHE:H	1:A:52:ILE:H	12	0.78
(1,7)	1:A:8:ARG:H	1:A:9:VAL:H	18	0.78
(1,68)	1:A:45:ALA:H	1:A:44:MET:H	15	0.78
(1,66)	1:A:44:MET:H	1:A:43:GLY:H	2	0.78
(1,65)	1:A:44:MET:H	1:A:45:ALA:H	15	0.78
(1,64)	1:A:43:GLY:H	1:A:44:MET:H	2	0.78
(1,62)	1:A:40:THR:H	1:A:39:VAL:H	9	0.78
(1,61)	1:A:39:VAL:H	1:A:40:THR:H	9	0.78
(1,60)	1:A:38:PHE:H	1:A:39:VAL:H	18	0.78
(1,59)	1:A:39:VAL:H	1:A:38:PHE:H	18	0.78
(1,56)	1:A:37:THR:H	1:A:36:PHE:H	4	0.78
(1,56)	1:A:37:THR:H	1:A:36:PHE:H	20	0.78
(1,54)	1:A:36:PHE:H	1:A:37:THR:H	4	0.78
(1,54)	1:A:36:PHE:H	1:A:37:THR:H	20	0.78

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,51)	1:A:35:VAL:H	1:A:34:GLY:H	7	0.78
(1,50)	1:A:34:GLY:H	1:A:33:LYS:H	7	0.78
(1,48)	1:A:33:LYS:H	1:A:34:GLY:H	7	0.78
(1,36)	1:A:25:ALA:H	1:A:26:CYS:H	6	0.78
(1,34)	1:A:24:ALA:H	1:A:23:TYR:H	8	0.78
(1,32)	1:A:23:TYR:H	1:A:24:ALA:H	8	0.78
(1,31)	1:A:23:TYR:H	1:A:22:GLU:H	7	0.78
(1,30)	1:A:22:GLU:H	1:A:23:TYR:H	7	0.78
(1,29)	1:A:22:GLU:H	1:A:21:GLY:H	5	0.78
(1,29)	1:A:22:GLU:H	1:A:21:GLY:H	20	0.78
(1,28)	1:A:21:GLY:H	1:A:22:GLU:H	5	0.78
(1,28)	1:A:21:GLY:H	1:A:22:GLU:H	20	0.78
(1,24)	1:A:21:GLY:H	1:A:22:GLU:H	5	0.78
(1,24)	1:A:21:GLY:H	1:A:22:GLU:H	20	0.78
(1,15)	1:A:13:VAL:H	1:A:14:ALA:H	12	0.78
(1,14)	1:A:14:ALA:H	1:A:13:VAL:H	12	0.78
(1,138)	1:A:95:THR:H	1:A:94:GLU:H	20	0.78
(1,137)	1:A:94:GLU:H	1:A:95:THR:H	20	0.78
(1,136)	1:A:94:GLU:H	1:A:93:LEU:H	7	0.78
(1,135)	1:A:93:LEU:H	1:A:94:GLU:H	7	0.78
(1,131)	1:A:92:PHE:H	1:A:91:LEU:H	14	0.78
(1,130)	1:A:91:LEU:H	1:A:92:PHE:H	14	0.78
(1,13)	1:A:13:VAL:H	1:A:12:ALA:H	20	0.78
(1,119)	1:A:84:GLU:H	1:A:85:LYS:H	3	0.78
(1,119)	1:A:84:GLU:H	1:A:85:LYS:H	4	0.78
(1,119)	1:A:84:GLU:H	1:A:85:LYS:H	5	0.78
(1,119)	1:A:84:GLU:H	1:A:85:LYS:H	6	0.78
(1,119)	1:A:84:GLU:H	1:A:85:LYS:H	11	0.78
(1,101)	1:A:70:ALA:H	1:A:69:VAL:H	16	0.78
(1,100)	1:A:69:VAL:H	1:A:70:ALA:H	16	0.78
(4,41)	1:A:26:CYS:CB	1:A:104:THR:H	18	0.77
(4,129)	1:A:56:PHE:CB	1:A:40:THR:H	3	0.77
(1,8)	1:A:9:VAL:H	1:A:8:ARG:H	7	0.77
(1,79)	1:A:52:ILE:H	1:A:51:PHE:H	1	0.77
(1,79)	1:A:52:ILE:H	1:A:51:PHE:H	11	0.77
(1,79)	1:A:52:ILE:H	1:A:51:PHE:H	17	0.77
(1,76)	1:A:51:PHE:H	1:A:52:ILE:H	1	0.77
(1,76)	1:A:51:PHE:H	1:A:52:ILE:H	11	0.77
(1,76)	1:A:51:PHE:H	1:A:52:ILE:H	17	0.77
(1,75)	1:A:50:MET:H	1:A:49:GLN:H	3	0.77
(1,74)	1:A:49:GLN:H	1:A:50:MET:H	3	0.77
(1,73)	1:A:49:GLN:H	1:A:48:LEU:H	7	0.77

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,73)	1:A:49:GLN:H	1:A:48:LEU:H	13	0.77
(1,72)	1:A:47:GLY:H	1:A:46:PHE:H	8	0.77
(1,72)	1:A:47:GLY:H	1:A:46:PHE:H	10	0.77
(1,71)	1:A:46:PHE:H	1:A:47:GLY:H	8	0.77
(1,71)	1:A:46:PHE:H	1:A:47:GLY:H	10	0.77
(1,7)	1:A:8:ARG:H	1:A:9:VAL:H	7	0.77
(1,67)	1:A:42:THR:H	1:A:43:GLY:H	1	0.77
(1,63)	1:A:43:GLY:H	1:A:42:THR:H	1	0.77
(1,51)	1:A:35:VAL:H	1:A:34:GLY:H	14	0.77
(1,50)	1:A:34:GLY:H	1:A:33:LYS:H	12	0.77
(1,50)	1:A:34:GLY:H	1:A:33:LYS:H	16	0.77
(1,48)	1:A:33:LYS:H	1:A:34:GLY:H	12	0.77
(1,48)	1:A:33:LYS:H	1:A:34:GLY:H	16	0.77
(1,45)	1:A:31:PHE:H	1:A:30:ALA:H	10	0.77
(1,45)	1:A:31:PHE:H	1:A:30:ALA:H	18	0.77
(1,43)	1:A:30:ALA:H	1:A:31:PHE:H	10	0.77
(1,43)	1:A:30:ALA:H	1:A:31:PHE:H	18	0.77
(1,34)	1:A:24:ALA:H	1:A:23:TYR:H	15	0.77
(1,32)	1:A:23:TYR:H	1:A:24:ALA:H	15	0.77
(1,31)	1:A:23:TYR:H	1:A:22:GLU:H	17	0.77
(1,30)	1:A:22:GLU:H	1:A:23:TYR:H	17	0.77
(1,29)	1:A:22:GLU:H	1:A:21:GLY:H	1	0.77
(1,29)	1:A:22:GLU:H	1:A:21:GLY:H	10	0.77
(1,28)	1:A:21:GLY:H	1:A:22:GLU:H	1	0.77
(1,28)	1:A:21:GLY:H	1:A:22:GLU:H	10	0.77
(1,25)	1:A:14:ALA:H	1:A:15:ALA:H	7	0.77
(1,24)	1:A:21:GLY:H	1:A:22:GLU:H	1	0.77
(1,24)	1:A:21:GLY:H	1:A:22:GLU:H	10	0.77
(1,16)	1:A:15:ALA:H	1:A:14:ALA:H	7	0.77
(1,150)	1:A:36:PHE:H	1:A:34:GLY:H	6	0.77
(1,147)	1:A:103:SER:H	1:A:102:ARG:H	12	0.77
(1,131)	1:A:92:PHE:H	1:A:91:LEU:H	20	0.77
(1,130)	1:A:91:LEU:H	1:A:92:PHE:H	20	0.77
(1,13)	1:A:13:VAL:H	1:A:12:ALA:H	14	0.77
(1,13)	1:A:13:VAL:H	1:A:12:ALA:H	19	0.77
(1,117)	1:A:84:GLU:H	1:A:83:SER:H	4	0.77
(1,117)	1:A:84:GLU:H	1:A:83:SER:H	9	0.77
(4,201)	1:A:86:CYS:CB	1:A:27:GLN:H	9	0.76
(1,79)	1:A:52:ILE:H	1:A:51:PHE:H	5	0.76
(1,79)	1:A:52:ILE:H	1:A:51:PHE:H	16	0.76
(1,76)	1:A:51:PHE:H	1:A:52:ILE:H	5	0.76
(1,76)	1:A:51:PHE:H	1:A:52:ILE:H	16	0.76

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,75)	1:A:50:MET:H	1:A:49:GLN:H	6	0.76
(1,75)	1:A:50:MET:H	1:A:49:GLN:H	15	0.76
(1,75)	1:A:50:MET:H	1:A:49:GLN:H	17	0.76
(1,74)	1:A:49:GLN:H	1:A:50:MET:H	6	0.76
(1,74)	1:A:49:GLN:H	1:A:50:MET:H	15	0.76
(1,74)	1:A:49:GLN:H	1:A:50:MET:H	17	0.76
(1,73)	1:A:49:GLN:H	1:A:48:LEU:H	3	0.76
(1,73)	1:A:49:GLN:H	1:A:48:LEU:H	15	0.76
(1,70)	1:A:46:PHE:H	1:A:45:ALA:H	8	0.76
(1,69)	1:A:45:ALA:H	1:A:46:PHE:H	8	0.76
(1,60)	1:A:38:PHE:H	1:A:39:VAL:H	5	0.76
(1,59)	1:A:39:VAL:H	1:A:38:PHE:H	5	0.76
(1,56)	1:A:37:THR:H	1:A:36:PHE:H	5	0.76
(1,56)	1:A:37:THR:H	1:A:36:PHE:H	14	0.76
(1,54)	1:A:36:PHE:H	1:A:37:THR:H	5	0.76
(1,54)	1:A:36:PHE:H	1:A:37:THR:H	14	0.76
(1,51)	1:A:35:VAL:H	1:A:34:GLY:H	3	0.76
(1,51)	1:A:35:VAL:H	1:A:34:GLY:H	15	0.76
(1,51)	1:A:35:VAL:H	1:A:34:GLY:H	16	0.76
(1,49)	1:A:33:LYS:H	1:A:32:MET:H	16	0.76
(1,47)	1:A:32:MET:H	1:A:33:LYS:H	16	0.76
(1,42)	1:A:29:HIS:H	1:A:28:SER:H	12	0.76
(1,41)	1:A:28:SER:H	1:A:29:HIS:H	12	0.76
(1,36)	1:A:25:ALA:H	1:A:26:CYS:H	12	0.76
(1,35)	1:A:25:ALA:H	1:A:24:ALA:H	1	0.76
(1,35)	1:A:25:ALA:H	1:A:24:ALA:H	14	0.76
(1,34)	1:A:24:ALA:H	1:A:23:TYR:H	10	0.76
(1,33)	1:A:24:ALA:H	1:A:25:ALA:H	1	0.76
(1,33)	1:A:24:ALA:H	1:A:25:ALA:H	14	0.76
(1,32)	1:A:23:TYR:H	1:A:24:ALA:H	10	0.76
(1,29)	1:A:22:GLU:H	1:A:21:GLY:H	9	0.76
(1,28)	1:A:21:GLY:H	1:A:22:GLU:H	9	0.76
(1,24)	1:A:21:GLY:H	1:A:22:GLU:H	9	0.76
(1,151)	1:A:97:GLN:H	1:A:98:LEU:H	11	0.76
(1,136)	1:A:94:GLU:H	1:A:93:LEU:H	15	0.76
(1,135)	1:A:93:LEU:H	1:A:94:GLU:H	15	0.76
(1,134)	1:A:93:LEU:H	1:A:92:PHE:H	1	0.76
(1,134)	1:A:93:LEU:H	1:A:92:PHE:H	13	0.76
(1,133)	1:A:92:PHE:H	1:A:93:LEU:H	1	0.76
(1,133)	1:A:92:PHE:H	1:A:93:LEU:H	13	0.76
(1,131)	1:A:92:PHE:H	1:A:91:LEU:H	8	0.76
(1,131)	1:A:92:PHE:H	1:A:91:LEU:H	15	0.76

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,130)	1:A:91:LEU:H	1:A:92:PHE:H	8	0.76
(1,130)	1:A:91:LEU:H	1:A:92:PHE:H	15	0.76
(1,13)	1:A:13:VAL:H	1:A:12:ALA:H	7	0.76
(1,13)	1:A:13:VAL:H	1:A:12:ALA:H	8	0.76
(1,13)	1:A:13:VAL:H	1:A:12:ALA:H	13	0.76
(1,13)	1:A:13:VAL:H	1:A:12:ALA:H	18	0.76
(1,128)	1:A:90:TRP:H	1:A:89:LEU:H	10	0.76
(1,127)	1:A:89:LEU:H	1:A:90:TRP:H	10	0.76
(1,126)	1:A:89:LEU:H	1:A:88:ASN:H	8	0.76
(1,124)	1:A:88:ASN:H	1:A:89:LEU:H	8	0.76
(1,119)	1:A:84:GLU:H	1:A:85:LYS:H	8	0.76
(1,119)	1:A:84:GLU:H	1:A:85:LYS:H	9	0.76
(1,108)	1:A:76:TYR:H	1:A:77:GLY:H	11	0.76
(1,107)	1:A:77:GLY:H	1:A:76:TYR:H	11	0.76
(4,60)	1:A:49:GLN:CB	1:A:33:LYS:H	3	0.75
(4,5)	1:A:26:CYS:CB	1:A:43:GLY:H	11	0.75
(4,201)	1:A:86:CYS:CB	1:A:27:GLN:H	12	0.75
(1,89)	1:A:64:LEU:H	1:A:63:SER:H	16	0.75
(1,88)	1:A:63:SER:H	1:A:64:LEU:H	16	0.75
(1,87)	1:A:63:SER:H	1:A:62:TRP:H	10	0.75
(1,86)	1:A:62:TRP:H	1:A:63:SER:H	10	0.75
(1,8)	1:A:9:VAL:H	1:A:8:ARG:H	12	0.75
(1,75)	1:A:50:MET:H	1:A:49:GLN:H	9	0.75
(1,74)	1:A:49:GLN:H	1:A:50:MET:H	9	0.75
(1,73)	1:A:49:GLN:H	1:A:48:LEU:H	2	0.75
(1,73)	1:A:49:GLN:H	1:A:48:LEU:H	9	0.75
(1,73)	1:A:49:GLN:H	1:A:48:LEU:H	10	0.75
(1,73)	1:A:49:GLN:H	1:A:48:LEU:H	17	0.75
(1,7)	1:A:8:ARG:H	1:A:9:VAL:H	12	0.75
(1,67)	1:A:42:THR:H	1:A:43:GLY:H	5	0.75
(1,63)	1:A:43:GLY:H	1:A:42:THR:H	5	0.75
(1,62)	1:A:40:THR:H	1:A:39:VAL:H	1	0.75
(1,62)	1:A:40:THR:H	1:A:39:VAL:H	4	0.75
(1,62)	1:A:40:THR:H	1:A:39:VAL:H	6	0.75
(1,61)	1:A:39:VAL:H	1:A:40:THR:H	1	0.75
(1,61)	1:A:39:VAL:H	1:A:40:THR:H	4	0.75
(1,61)	1:A:39:VAL:H	1:A:40:THR:H	6	0.75
(1,6)	1:A:8:ARG:H	1:A:7:SER:H	18	0.75
(1,56)	1:A:37:THR:H	1:A:36:PHE:H	12	0.75
(1,54)	1:A:36:PHE:H	1:A:37:THR:H	12	0.75
(1,5)	1:A:6:LEU:H	1:A:7:SER:H	7	0.75
(1,49)	1:A:33:LYS:H	1:A:32:MET:H	19	0.75

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,49)	1:A:33:LYS:H	1:A:32:MET:H	20	0.75
(1,47)	1:A:32:MET:H	1:A:33:LYS:H	19	0.75
(1,47)	1:A:32:MET:H	1:A:33:LYS:H	20	0.75
(1,45)	1:A:31:PHE:H	1:A:30:ALA:H	13	0.75
(1,43)	1:A:30:ALA:H	1:A:31:PHE:H	13	0.75
(1,40)	1:A:27:GLN:H	1:A:28:SER:H	5	0.75
(1,40)	1:A:27:GLN:H	1:A:28:SER:H	7	0.75
(1,4)	1:A:7:SER:H	1:A:8:ARG:H	18	0.75
(1,39)	1:A:28:SER:H	1:A:27:GLN:H	5	0.75
(1,39)	1:A:28:SER:H	1:A:27:GLN:H	7	0.75
(1,36)	1:A:25:ALA:H	1:A:26:CYS:H	9	0.75
(1,35)	1:A:25:ALA:H	1:A:24:ALA:H	12	0.75
(1,33)	1:A:24:ALA:H	1:A:25:ALA:H	12	0.75
(1,31)	1:A:23:TYR:H	1:A:22:GLU:H	3	0.75
(1,30)	1:A:22:GLU:H	1:A:23:TYR:H	3	0.75
(1,3)	1:A:7:SER:H	1:A:6:LEU:H	7	0.75
(1,29)	1:A:22:GLU:H	1:A:21:GLY:H	12	0.75
(1,28)	1:A:21:GLY:H	1:A:22:GLU:H	12	0.75
(1,25)	1:A:14:ALA:H	1:A:15:ALA:H	13	0.75
(1,24)	1:A:21:GLY:H	1:A:22:GLU:H	12	0.75
(1,16)	1:A:15:ALA:H	1:A:14:ALA:H	13	0.75
(1,136)	1:A:94:GLU:H	1:A:93:LEU:H	3	0.75
(1,136)	1:A:94:GLU:H	1:A:93:LEU:H	19	0.75
(1,135)	1:A:93:LEU:H	1:A:94:GLU:H	3	0.75
(1,135)	1:A:93:LEU:H	1:A:94:GLU:H	19	0.75
(1,134)	1:A:93:LEU:H	1:A:92:PHE:H	6	0.75
(1,133)	1:A:92:PHE:H	1:A:93:LEU:H	6	0.75
(1,13)	1:A:13:VAL:H	1:A:12:ALA:H	5	0.75
(1,13)	1:A:13:VAL:H	1:A:12:ALA:H	11	0.75
(1,125)	1:A:88:ASN:H	1:A:87:ASN:H	16	0.75
(1,125)	1:A:88:ASN:H	1:A:87:ASN:H	19	0.75
(1,123)	1:A:87:ASN:H	1:A:88:ASN:H	16	0.75
(1,123)	1:A:87:ASN:H	1:A:88:ASN:H	19	0.75
(1,12)	1:A:11:ASP:H	1:A:12:ALA:H	12	0.75
(1,119)	1:A:84:GLU:H	1:A:85:LYS:H	7	0.75
(1,11)	1:A:12:ALA:H	1:A:11:ASP:H	12	0.75
(1,108)	1:A:76:TYR:H	1:A:77:GLY:H	9	0.75
(1,107)	1:A:77:GLY:H	1:A:76:TYR:H	9	0.75
(1,101)	1:A:70:ALA:H	1:A:69:VAL:H	14	0.75
(1,100)	1:A:69:VAL:H	1:A:70:ALA:H	14	0.75
(4,130)	1:A:56:PHE:CB	1:A:41:GLY:H	3	0.74
(4,129)	1:A:56:PHE:CB	1:A:40:THR:H	13	0.74

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,8)	1:A:9:VAL:H	1:A:8:ARG:H	9	0.74
(1,75)	1:A:50:MET:H	1:A:49:GLN:H	10	0.74
(1,74)	1:A:49:GLN:H	1:A:50:MET:H	10	0.74
(1,73)	1:A:49:GLN:H	1:A:48:LEU:H	20	0.74
(1,7)	1:A:8:ARG:H	1:A:9:VAL:H	9	0.74
(1,60)	1:A:38:PHE:H	1:A:39:VAL:H	6	0.74
(1,60)	1:A:38:PHE:H	1:A:39:VAL:H	12	0.74
(1,59)	1:A:39:VAL:H	1:A:38:PHE:H	6	0.74
(1,59)	1:A:39:VAL:H	1:A:38:PHE:H	12	0.74
(1,40)	1:A:27:GLN:H	1:A:28:SER:H	10	0.74
(1,39)	1:A:28:SER:H	1:A:27:GLN:H	10	0.74
(1,36)	1:A:25:ALA:H	1:A:26:CYS:H	3	0.74
(1,35)	1:A:25:ALA:H	1:A:24:ALA:H	7	0.74
(1,33)	1:A:24:ALA:H	1:A:25:ALA:H	7	0.74
(1,27)	1:A:21:GLY:H	1:A:20:LEU:H	4	0.74
(1,26)	1:A:20:LEU:H	1:A:21:GLY:H	4	0.74
(1,25)	1:A:14:ALA:H	1:A:15:ALA:H	5	0.74
(1,25)	1:A:14:ALA:H	1:A:15:ALA:H	11	0.74
(1,25)	1:A:14:ALA:H	1:A:15:ALA:H	14	0.74
(1,23)	1:A:21:GLY:H	1:A:20:LEU:H	4	0.74
(1,22)	1:A:20:LEU:H	1:A:21:GLY:H	4	0.74
(1,16)	1:A:15:ALA:H	1:A:14:ALA:H	5	0.74
(1,16)	1:A:15:ALA:H	1:A:14:ALA:H	11	0.74
(1,16)	1:A:15:ALA:H	1:A:14:ALA:H	14	0.74
(1,150)	1:A:36:PHE:H	1:A:34:GLY:H	15	0.74
(1,15)	1:A:13:VAL:H	1:A:14:ALA:H	4	0.74
(1,145)	1:A:100:LYS:H	1:A:101:ASP:H	2	0.74
(1,143)	1:A:101:ASP:H	1:A:100:LYS:H	2	0.74
(1,14)	1:A:14:ALA:H	1:A:13:VAL:H	4	0.74
(1,138)	1:A:95:THR:H	1:A:94:GLU:H	12	0.74
(1,137)	1:A:94:GLU:H	1:A:95:THR:H	12	0.74
(1,136)	1:A:94:GLU:H	1:A:93:LEU:H	12	0.74
(1,135)	1:A:93:LEU:H	1:A:94:GLU:H	12	0.74
(1,131)	1:A:92:PHE:H	1:A:91:LEU:H	18	0.74
(1,130)	1:A:91:LEU:H	1:A:92:PHE:H	18	0.74
(1,128)	1:A:90:TRP:H	1:A:89:LEU:H	5	0.74
(1,127)	1:A:89:LEU:H	1:A:90:TRP:H	5	0.74
(1,126)	1:A:89:LEU:H	1:A:88:ASN:H	6	0.74
(1,125)	1:A:88:ASN:H	1:A:87:ASN:H	15	0.74
(1,124)	1:A:88:ASN:H	1:A:89:LEU:H	6	0.74
(1,123)	1:A:87:ASN:H	1:A:88:ASN:H	15	0.74
(1,119)	1:A:84:GLU:H	1:A:85:LYS:H	12	0.74

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,119)	1:A:84:GLU:H	1:A:85:LYS:H	18	0.74
(1,108)	1:A:76:TYR:H	1:A:77:GLY:H	1	0.74
(1,108)	1:A:76:TYR:H	1:A:77:GLY:H	2	0.74
(1,108)	1:A:76:TYR:H	1:A:77:GLY:H	3	0.74
(1,108)	1:A:76:TYR:H	1:A:77:GLY:H	7	0.74
(1,108)	1:A:76:TYR:H	1:A:77:GLY:H	10	0.74
(1,108)	1:A:76:TYR:H	1:A:77:GLY:H	15	0.74
(1,107)	1:A:77:GLY:H	1:A:76:TYR:H	1	0.74
(1,107)	1:A:77:GLY:H	1:A:76:TYR:H	2	0.74
(1,107)	1:A:77:GLY:H	1:A:76:TYR:H	3	0.74
(1,107)	1:A:77:GLY:H	1:A:76:TYR:H	7	0.74
(1,107)	1:A:77:GLY:H	1:A:76:TYR:H	10	0.74
(1,107)	1:A:77:GLY:H	1:A:76:TYR:H	15	0.74
(1,101)	1:A:70:ALA:H	1:A:69:VAL:H	6	0.74
(1,101)	1:A:70:ALA:H	1:A:69:VAL:H	13	0.74
(1,100)	1:A:69:VAL:H	1:A:70:ALA:H	6	0.74
(1,100)	1:A:69:VAL:H	1:A:70:ALA:H	13	0.74
(4,43)	1:A:26:CYS:CB	1:A:106:GLN:H	18	0.73
(1,87)	1:A:63:SER:H	1:A:62:TRP:H	18	0.73
(1,86)	1:A:62:TRP:H	1:A:63:SER:H	18	0.73
(1,8)	1:A:9:VAL:H	1:A:8:ARG:H	8	0.73
(1,8)	1:A:9:VAL:H	1:A:8:ARG:H	17	0.73
(1,79)	1:A:52:ILE:H	1:A:51:PHE:H	10	0.73
(1,76)	1:A:51:PHE:H	1:A:52:ILE:H	10	0.73
(1,75)	1:A:50:MET:H	1:A:49:GLN:H	11	0.73
(1,74)	1:A:49:GLN:H	1:A:50:MET:H	11	0.73
(1,72)	1:A:47:GLY:H	1:A:46:PHE:H	7	0.73
(1,71)	1:A:46:PHE:H	1:A:47:GLY:H	7	0.73
(1,7)	1:A:8:ARG:H	1:A:9:VAL:H	8	0.73
(1,7)	1:A:8:ARG:H	1:A:9:VAL:H	17	0.73
(1,60)	1:A:38:PHE:H	1:A:39:VAL:H	10	0.73
(1,59)	1:A:39:VAL:H	1:A:38:PHE:H	10	0.73
(1,49)	1:A:33:LYS:H	1:A:32:MET:H	7	0.73
(1,49)	1:A:33:LYS:H	1:A:32:MET:H	11	0.73
(1,49)	1:A:33:LYS:H	1:A:32:MET:H	12	0.73
(1,49)	1:A:33:LYS:H	1:A:32:MET:H	15	0.73
(1,49)	1:A:33:LYS:H	1:A:32:MET:H	18	0.73
(1,47)	1:A:32:MET:H	1:A:33:LYS:H	7	0.73
(1,47)	1:A:32:MET:H	1:A:33:LYS:H	11	0.73
(1,47)	1:A:32:MET:H	1:A:33:LYS:H	12	0.73
(1,47)	1:A:32:MET:H	1:A:33:LYS:H	15	0.73
(1,47)	1:A:32:MET:H	1:A:33:LYS:H	18	0.73

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,40)	1:A:27:GLN:H	1:A:28:SER:H	12	0.73
(1,39)	1:A:28:SER:H	1:A:27:GLN:H	12	0.73
(1,36)	1:A:25:ALA:H	1:A:26:CYS:H	7	0.73
(1,35)	1:A:25:ALA:H	1:A:24:ALA:H	2	0.73
(1,35)	1:A:25:ALA:H	1:A:24:ALA:H	5	0.73
(1,35)	1:A:25:ALA:H	1:A:24:ALA:H	10	0.73
(1,34)	1:A:24:ALA:H	1:A:23:TYR:H	5	0.73
(1,33)	1:A:24:ALA:H	1:A:25:ALA:H	2	0.73
(1,33)	1:A:24:ALA:H	1:A:25:ALA:H	5	0.73
(1,33)	1:A:24:ALA:H	1:A:25:ALA:H	10	0.73
(1,32)	1:A:23:TYR:H	1:A:24:ALA:H	5	0.73
(1,31)	1:A:23:TYR:H	1:A:22:GLU:H	14	0.73
(1,30)	1:A:22:GLU:H	1:A:23:TYR:H	14	0.73
(1,29)	1:A:22:GLU:H	1:A:21:GLY:H	4	0.73
(1,28)	1:A:21:GLY:H	1:A:22:GLU:H	4	0.73
(1,27)	1:A:21:GLY:H	1:A:20:LEU:H	10	0.73
(1,26)	1:A:20:LEU:H	1:A:21:GLY:H	10	0.73
(1,24)	1:A:21:GLY:H	1:A:22:GLU:H	4	0.73
(1,23)	1:A:21:GLY:H	1:A:20:LEU:H	10	0.73
(1,22)	1:A:20:LEU:H	1:A:21:GLY:H	10	0.73
(1,15)	1:A:13:VAL:H	1:A:14:ALA:H	8	0.73
(1,14)	1:A:14:ALA:H	1:A:13:VAL:H	8	0.73
(1,136)	1:A:94:GLU:H	1:A:93:LEU:H	8	0.73
(1,135)	1:A:93:LEU:H	1:A:94:GLU:H	8	0.73
(1,134)	1:A:93:LEU:H	1:A:92:PHE:H	15	0.73
(1,133)	1:A:92:PHE:H	1:A:93:LEU:H	15	0.73
(1,131)	1:A:92:PHE:H	1:A:91:LEU:H	4	0.73
(1,131)	1:A:92:PHE:H	1:A:91:LEU:H	7	0.73
(1,130)	1:A:91:LEU:H	1:A:92:PHE:H	4	0.73
(1,130)	1:A:91:LEU:H	1:A:92:PHE:H	7	0.73
(1,128)	1:A:90:TRP:H	1:A:89:LEU:H	20	0.73
(1,127)	1:A:89:LEU:H	1:A:90:TRP:H	20	0.73
(1,126)	1:A:89:LEU:H	1:A:88:ASN:H	4	0.73
(1,126)	1:A:89:LEU:H	1:A:88:ASN:H	10	0.73
(1,125)	1:A:88:ASN:H	1:A:87:ASN:H	9	0.73
(1,124)	1:A:88:ASN:H	1:A:89:LEU:H	4	0.73
(1,124)	1:A:88:ASN:H	1:A:89:LEU:H	10	0.73
(1,123)	1:A:87:ASN:H	1:A:88:ASN:H	9	0.73
(1,12)	1:A:11:ASP:H	1:A:12:ALA:H	4	0.73
(1,11)	1:A:12:ALA:H	1:A:11:ASP:H	4	0.73
(1,108)	1:A:76:TYR:H	1:A:77:GLY:H	8	0.73
(1,108)	1:A:76:TYR:H	1:A:77:GLY:H	17	0.73

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,108)	1:A:76:TYR:H	1:A:77:GLY:H	18	0.73
(1,107)	1:A:77:GLY:H	1:A:76:TYR:H	8	0.73
(1,107)	1:A:77:GLY:H	1:A:76:TYR:H	17	0.73
(1,107)	1:A:77:GLY:H	1:A:76:TYR:H	18	0.73
(1,101)	1:A:70:ALA:H	1:A:69:VAL:H	8	0.73
(1,101)	1:A:70:ALA:H	1:A:69:VAL:H	9	0.73
(1,100)	1:A:69:VAL:H	1:A:70:ALA:H	8	0.73
(1,100)	1:A:69:VAL:H	1:A:70:ALA:H	9	0.73
(4,200)	1:A:86:CYS:CB	1:A:26:CYS:H	20	0.72
(4,128)	1:A:56:PHE:CB	1:A:39:VAL:H	9	0.72
(1,89)	1:A:64:LEU:H	1:A:63:SER:H	13	0.72
(1,89)	1:A:64:LEU:H	1:A:63:SER:H	17	0.72
(1,88)	1:A:63:SER:H	1:A:64:LEU:H	13	0.72
(1,88)	1:A:63:SER:H	1:A:64:LEU:H	17	0.72
(1,8)	1:A:9:VAL:H	1:A:8:ARG:H	11	0.72
(1,79)	1:A:52:ILE:H	1:A:51:PHE:H	2	0.72
(1,76)	1:A:51:PHE:H	1:A:52:ILE:H	2	0.72
(1,75)	1:A:50:MET:H	1:A:49:GLN:H	5	0.72
(1,74)	1:A:49:GLN:H	1:A:50:MET:H	5	0.72
(1,72)	1:A:47:GLY:H	1:A:46:PHE:H	2	0.72
(1,72)	1:A:47:GLY:H	1:A:46:PHE:H	16	0.72
(1,71)	1:A:46:PHE:H	1:A:47:GLY:H	2	0.72
(1,71)	1:A:46:PHE:H	1:A:47:GLY:H	16	0.72
(1,7)	1:A:8:ARG:H	1:A:9:VAL:H	11	0.72
(1,67)	1:A:42:THR:H	1:A:43:GLY:H	15	0.72
(1,63)	1:A:43:GLY:H	1:A:42:THR:H	15	0.72
(1,60)	1:A:38:PHE:H	1:A:39:VAL:H	13	0.72
(1,60)	1:A:38:PHE:H	1:A:39:VAL:H	16	0.72
(1,6)	1:A:8:ARG:H	1:A:7:SER:H	10	0.72
(1,59)	1:A:39:VAL:H	1:A:38:PHE:H	13	0.72
(1,59)	1:A:39:VAL:H	1:A:38:PHE:H	16	0.72
(1,53)	1:A:36:PHE:H	1:A:35:VAL:H	6	0.72
(1,52)	1:A:35:VAL:H	1:A:36:PHE:H	6	0.72
(1,50)	1:A:34:GLY:H	1:A:33:LYS:H	6	0.72
(1,48)	1:A:33:LYS:H	1:A:34:GLY:H	6	0.72
(1,46)	1:A:31:PHE:H	1:A:32:MET:H	13	0.72
(1,45)	1:A:31:PHE:H	1:A:30:ALA:H	16	0.72
(1,44)	1:A:32:MET:H	1:A:31:PHE:H	13	0.72
(1,43)	1:A:30:ALA:H	1:A:31:PHE:H	16	0.72
(1,42)	1:A:29:HIS:H	1:A:28:SER:H	14	0.72
(1,41)	1:A:28:SER:H	1:A:29:HIS:H	14	0.72
(1,40)	1:A:27:GLN:H	1:A:28:SER:H	8	0.72

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,4)	1:A:7:SER:H	1:A:8:ARG:H	10	0.72
(1,39)	1:A:28:SER:H	1:A:27:GLN:H	8	0.72
(1,35)	1:A:25:ALA:H	1:A:24:ALA:H	9	0.72
(1,33)	1:A:24:ALA:H	1:A:25:ALA:H	9	0.72
(1,31)	1:A:23:TYR:H	1:A:22:GLU:H	15	0.72
(1,30)	1:A:22:GLU:H	1:A:23:TYR:H	15	0.72
(1,29)	1:A:22:GLU:H	1:A:21:GLY:H	3	0.72
(1,28)	1:A:21:GLY:H	1:A:22:GLU:H	3	0.72
(1,27)	1:A:21:GLY:H	1:A:20:LEU:H	18	0.72
(1,26)	1:A:20:LEU:H	1:A:21:GLY:H	18	0.72
(1,25)	1:A:14:ALA:H	1:A:15:ALA:H	12	0.72
(1,24)	1:A:21:GLY:H	1:A:22:GLU:H	3	0.72
(1,23)	1:A:21:GLY:H	1:A:20:LEU:H	18	0.72
(1,22)	1:A:20:LEU:H	1:A:21:GLY:H	18	0.72
(1,16)	1:A:15:ALA:H	1:A:14:ALA:H	12	0.72
(1,138)	1:A:95:THR:H	1:A:94:GLU:H	3	0.72
(1,138)	1:A:95:THR:H	1:A:94:GLU:H	5	0.72
(1,138)	1:A:95:THR:H	1:A:94:GLU:H	7	0.72
(1,137)	1:A:94:GLU:H	1:A:95:THR:H	3	0.72
(1,137)	1:A:94:GLU:H	1:A:95:THR:H	5	0.72
(1,137)	1:A:94:GLU:H	1:A:95:THR:H	7	0.72
(1,134)	1:A:93:LEU:H	1:A:92:PHE:H	19	0.72
(1,133)	1:A:92:PHE:H	1:A:93:LEU:H	19	0.72
(1,128)	1:A:90:TRP:H	1:A:89:LEU:H	19	0.72
(1,127)	1:A:89:LEU:H	1:A:90:TRP:H	19	0.72
(1,126)	1:A:89:LEU:H	1:A:88:ASN:H	5	0.72
(1,126)	1:A:89:LEU:H	1:A:88:ASN:H	12	0.72
(1,124)	1:A:88:ASN:H	1:A:89:LEU:H	5	0.72
(1,124)	1:A:88:ASN:H	1:A:89:LEU:H	12	0.72
(1,12)	1:A:11:ASP:H	1:A:12:ALA:H	3	0.72
(1,117)	1:A:84:GLU:H	1:A:83:SER:H	17	0.72
(1,11)	1:A:12:ALA:H	1:A:11:ASP:H	3	0.72
(1,108)	1:A:76:TYR:H	1:A:77:GLY:H	5	0.72
(1,108)	1:A:76:TYR:H	1:A:77:GLY:H	14	0.72
(1,108)	1:A:76:TYR:H	1:A:77:GLY:H	19	0.72
(1,107)	1:A:77:GLY:H	1:A:76:TYR:H	5	0.72
(1,107)	1:A:77:GLY:H	1:A:76:TYR:H	14	0.72
(1,107)	1:A:77:GLY:H	1:A:76:TYR:H	19	0.72
(1,105)	1:A:73:VAL:H	1:A:72:SER:H	8	0.72
(1,101)	1:A:70:ALA:H	1:A:69:VAL:H	2	0.72
(1,101)	1:A:70:ALA:H	1:A:69:VAL:H	7	0.72
(1,101)	1:A:70:ALA:H	1:A:69:VAL:H	15	0.72

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,101)	1:A:70:ALA:H	1:A:69:VAL:H	18	0.72
(1,100)	1:A:69:VAL:H	1:A:70:ALA:H	2	0.72
(1,100)	1:A:69:VAL:H	1:A:70:ALA:H	7	0.72
(1,100)	1:A:69:VAL:H	1:A:70:ALA:H	15	0.72
(1,100)	1:A:69:VAL:H	1:A:70:ALA:H	18	0.72
(4,204)	1:A:86:CYS:CB	1:A:32:MET:H	5	0.71
(4,199)	1:A:86:CYS:CB	1:A:24:ALA:H	19	0.71
(1,87)	1:A:63:SER:H	1:A:62:TRP:H	1	0.71
(1,87)	1:A:63:SER:H	1:A:62:TRP:H	11	0.71
(1,87)	1:A:63:SER:H	1:A:62:TRP:H	13	0.71
(1,86)	1:A:62:TRP:H	1:A:63:SER:H	1	0.71
(1,86)	1:A:62:TRP:H	1:A:63:SER:H	11	0.71
(1,86)	1:A:62:TRP:H	1:A:63:SER:H	13	0.71
(1,8)	1:A:9:VAL:H	1:A:8:ARG:H	4	0.71
(1,8)	1:A:9:VAL:H	1:A:8:ARG:H	10	0.71
(1,79)	1:A:52:ILE:H	1:A:51:PHE:H	14	0.71
(1,79)	1:A:52:ILE:H	1:A:51:PHE:H	15	0.71
(1,76)	1:A:51:PHE:H	1:A:52:ILE:H	14	0.71
(1,76)	1:A:51:PHE:H	1:A:52:ILE:H	15	0.71
(1,75)	1:A:50:MET:H	1:A:49:GLN:H	1	0.71
(1,74)	1:A:49:GLN:H	1:A:50:MET:H	1	0.71
(1,73)	1:A:49:GLN:H	1:A:48:LEU:H	14	0.71
(1,72)	1:A:47:GLY:H	1:A:46:PHE:H	14	0.71
(1,71)	1:A:46:PHE:H	1:A:47:GLY:H	14	0.71
(1,7)	1:A:8:ARG:H	1:A:9:VAL:H	4	0.71
(1,7)	1:A:8:ARG:H	1:A:9:VAL:H	10	0.71
(1,6)	1:A:8:ARG:H	1:A:7:SER:H	1	0.71
(1,56)	1:A:37:THR:H	1:A:36:PHE:H	13	0.71
(1,54)	1:A:36:PHE:H	1:A:37:THR:H	13	0.71
(1,49)	1:A:33:LYS:H	1:A:32:MET:H	5	0.71
(1,47)	1:A:32:MET:H	1:A:33:LYS:H	5	0.71
(1,46)	1:A:31:PHE:H	1:A:32:MET:H	2	0.71
(1,45)	1:A:31:PHE:H	1:A:30:ALA:H	6	0.71
(1,44)	1:A:32:MET:H	1:A:31:PHE:H	2	0.71
(1,43)	1:A:30:ALA:H	1:A:31:PHE:H	6	0.71
(1,42)	1:A:29:HIS:H	1:A:28:SER:H	5	0.71
(1,41)	1:A:28:SER:H	1:A:29:HIS:H	5	0.71
(1,4)	1:A:7:SER:H	1:A:8:ARG:H	1	0.71
(1,35)	1:A:25:ALA:H	1:A:24:ALA:H	20	0.71
(1,33)	1:A:24:ALA:H	1:A:25:ALA:H	20	0.71
(1,31)	1:A:23:TYR:H	1:A:22:GLU:H	19	0.71
(1,30)	1:A:22:GLU:H	1:A:23:TYR:H	19	0.71

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,15)	1:A:13:VAL:H	1:A:14:ALA:H	3	0.71
(1,15)	1:A:13:VAL:H	1:A:14:ALA:H	20	0.71
(1,14)	1:A:14:ALA:H	1:A:13:VAL:H	3	0.71
(1,14)	1:A:14:ALA:H	1:A:13:VAL:H	20	0.71
(1,138)	1:A:95:THR:H	1:A:94:GLU:H	15	0.71
(1,137)	1:A:94:GLU:H	1:A:95:THR:H	15	0.71
(1,136)	1:A:94:GLU:H	1:A:93:LEU:H	2	0.71
(1,136)	1:A:94:GLU:H	1:A:93:LEU:H	18	0.71
(1,135)	1:A:93:LEU:H	1:A:94:GLU:H	2	0.71
(1,135)	1:A:93:LEU:H	1:A:94:GLU:H	18	0.71
(1,134)	1:A:93:LEU:H	1:A:92:PHE:H	5	0.71
(1,134)	1:A:93:LEU:H	1:A:92:PHE:H	18	0.71
(1,133)	1:A:92:PHE:H	1:A:93:LEU:H	5	0.71
(1,133)	1:A:92:PHE:H	1:A:93:LEU:H	18	0.71
(1,132)	1:A:91:LEU:H	1:A:90:TRP:H	6	0.71
(1,132)	1:A:91:LEU:H	1:A:90:TRP:H	8	0.71
(1,131)	1:A:92:PHE:H	1:A:91:LEU:H	11	0.71
(1,131)	1:A:92:PHE:H	1:A:91:LEU:H	12	0.71
(1,131)	1:A:92:PHE:H	1:A:91:LEU:H	17	0.71
(1,130)	1:A:91:LEU:H	1:A:92:PHE:H	11	0.71
(1,130)	1:A:91:LEU:H	1:A:92:PHE:H	12	0.71
(1,130)	1:A:91:LEU:H	1:A:92:PHE:H	17	0.71
(1,13)	1:A:13:VAL:H	1:A:12:ALA:H	1	0.71
(1,129)	1:A:90:TRP:H	1:A:91:LEU:H	6	0.71
(1,129)	1:A:90:TRP:H	1:A:91:LEU:H	8	0.71
(1,125)	1:A:88:ASN:H	1:A:87:ASN:H	4	0.71
(1,125)	1:A:88:ASN:H	1:A:87:ASN:H	10	0.71
(1,125)	1:A:88:ASN:H	1:A:87:ASN:H	11	0.71
(1,123)	1:A:87:ASN:H	1:A:88:ASN:H	4	0.71
(1,123)	1:A:87:ASN:H	1:A:88:ASN:H	10	0.71
(1,123)	1:A:87:ASN:H	1:A:88:ASN:H	11	0.71
(1,12)	1:A:11:ASP:H	1:A:12:ALA:H	10	0.71
(1,119)	1:A:84:GLU:H	1:A:85:LYS:H	15	0.71
(1,117)	1:A:84:GLU:H	1:A:83:SER:H	18	0.71
(1,11)	1:A:12:ALA:H	1:A:11:ASP:H	10	0.71
(1,108)	1:A:76:TYR:H	1:A:77:GLY:H	4	0.71
(1,108)	1:A:76:TYR:H	1:A:77:GLY:H	6	0.71
(1,108)	1:A:76:TYR:H	1:A:77:GLY:H	20	0.71
(1,107)	1:A:77:GLY:H	1:A:76:TYR:H	4	0.71
(1,107)	1:A:77:GLY:H	1:A:76:TYR:H	6	0.71
(1,107)	1:A:77:GLY:H	1:A:76:TYR:H	20	0.71
(1,103)	1:A:71:GLY:H	1:A:72:SER:H	8	0.71

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,101)	1:A:70:ALA:H	1:A:69:VAL:H	1	0.71
(1,101)	1:A:70:ALA:H	1:A:69:VAL:H	4	0.71
(1,101)	1:A:70:ALA:H	1:A:69:VAL:H	11	0.71
(1,101)	1:A:70:ALA:H	1:A:69:VAL:H	17	0.71
(1,101)	1:A:70:ALA:H	1:A:69:VAL:H	19	0.71
(1,101)	1:A:70:ALA:H	1:A:69:VAL:H	20	0.71
(1,100)	1:A:69:VAL:H	1:A:70:ALA:H	1	0.71
(1,100)	1:A:69:VAL:H	1:A:70:ALA:H	4	0.71
(1,100)	1:A:69:VAL:H	1:A:70:ALA:H	11	0.71
(1,100)	1:A:69:VAL:H	1:A:70:ALA:H	17	0.71
(1,100)	1:A:69:VAL:H	1:A:70:ALA:H	19	0.71
(1,100)	1:A:69:VAL:H	1:A:70:ALA:H	20	0.71
(1,87)	1:A:63:SER:H	1:A:62:TRP:H	8	0.7
(1,86)	1:A:62:TRP:H	1:A:63:SER:H	8	0.7
(1,83)	1:A:55:LYS:H	1:A:54:ARG:H	7	0.7
(1,82)	1:A:54:ARG:H	1:A:55:LYS:H	7	0.7
(1,75)	1:A:50:MET:H	1:A:49:GLN:H	2	0.7
(1,75)	1:A:50:MET:H	1:A:49:GLN:H	13	0.7
(1,74)	1:A:49:GLN:H	1:A:50:MET:H	2	0.7
(1,74)	1:A:49:GLN:H	1:A:50:MET:H	13	0.7
(1,73)	1:A:49:GLN:H	1:A:48:LEU:H	12	0.7
(1,72)	1:A:47:GLY:H	1:A:46:PHE:H	11	0.7
(1,72)	1:A:47:GLY:H	1:A:46:PHE:H	13	0.7
(1,72)	1:A:47:GLY:H	1:A:46:PHE:H	19	0.7
(1,71)	1:A:46:PHE:H	1:A:47:GLY:H	11	0.7
(1,71)	1:A:46:PHE:H	1:A:47:GLY:H	13	0.7
(1,71)	1:A:46:PHE:H	1:A:47:GLY:H	19	0.7
(1,70)	1:A:46:PHE:H	1:A:45:ALA:H	15	0.7
(1,69)	1:A:45:ALA:H	1:A:46:PHE:H	15	0.7
(1,62)	1:A:40:THR:H	1:A:39:VAL:H	16	0.7
(1,61)	1:A:39:VAL:H	1:A:40:THR:H	16	0.7
(1,60)	1:A:38:PHE:H	1:A:39:VAL:H	8	0.7
(1,60)	1:A:38:PHE:H	1:A:39:VAL:H	14	0.7
(1,59)	1:A:39:VAL:H	1:A:38:PHE:H	8	0.7
(1,59)	1:A:39:VAL:H	1:A:38:PHE:H	14	0.7
(1,58)	1:A:38:PHE:H	1:A:37:THR:H	9	0.7
(1,57)	1:A:37:THR:H	1:A:38:PHE:H	9	0.7
(1,56)	1:A:37:THR:H	1:A:36:PHE:H	9	0.7
(1,56)	1:A:37:THR:H	1:A:36:PHE:H	16	0.7
(1,54)	1:A:36:PHE:H	1:A:37:THR:H	9	0.7
(1,54)	1:A:36:PHE:H	1:A:37:THR:H	16	0.7
(1,51)	1:A:35:VAL:H	1:A:34:GLY:H	1	0.7

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,51)	1:A:35:VAL:H	1:A:34:GLY:H	9	0.7
(1,49)	1:A:33:LYS:H	1:A:32:MET:H	2	0.7
(1,47)	1:A:32:MET:H	1:A:33:LYS:H	2	0.7
(1,42)	1:A:29:HIS:H	1:A:28:SER:H	8	0.7
(1,42)	1:A:29:HIS:H	1:A:28:SER:H	20	0.7
(1,41)	1:A:28:SER:H	1:A:29:HIS:H	8	0.7
(1,41)	1:A:28:SER:H	1:A:29:HIS:H	20	0.7
(1,40)	1:A:27:GLN:H	1:A:28:SER:H	11	0.7
(1,40)	1:A:27:GLN:H	1:A:28:SER:H	20	0.7
(1,39)	1:A:28:SER:H	1:A:27:GLN:H	11	0.7
(1,39)	1:A:28:SER:H	1:A:27:GLN:H	20	0.7
(1,34)	1:A:24:ALA:H	1:A:23:TYR:H	3	0.7
(1,32)	1:A:23:TYR:H	1:A:24:ALA:H	3	0.7
(1,31)	1:A:23:TYR:H	1:A:22:GLU:H	1	0.7
(1,31)	1:A:23:TYR:H	1:A:22:GLU:H	5	0.7
(1,31)	1:A:23:TYR:H	1:A:22:GLU:H	12	0.7
(1,30)	1:A:22:GLU:H	1:A:23:TYR:H	1	0.7
(1,30)	1:A:22:GLU:H	1:A:23:TYR:H	5	0.7
(1,30)	1:A:22:GLU:H	1:A:23:TYR:H	12	0.7
(1,29)	1:A:22:GLU:H	1:A:21:GLY:H	13	0.7
(1,29)	1:A:22:GLU:H	1:A:21:GLY:H	18	0.7
(1,28)	1:A:21:GLY:H	1:A:22:GLU:H	13	0.7
(1,28)	1:A:21:GLY:H	1:A:22:GLU:H	18	0.7
(1,27)	1:A:21:GLY:H	1:A:20:LEU:H	9	0.7
(1,26)	1:A:20:LEU:H	1:A:21:GLY:H	9	0.7
(1,25)	1:A:14:ALA:H	1:A:15:ALA:H	1	0.7
(1,25)	1:A:14:ALA:H	1:A:15:ALA:H	15	0.7
(1,25)	1:A:14:ALA:H	1:A:15:ALA:H	18	0.7
(1,24)	1:A:21:GLY:H	1:A:22:GLU:H	13	0.7
(1,24)	1:A:21:GLY:H	1:A:22:GLU:H	18	0.7
(1,23)	1:A:21:GLY:H	1:A:20:LEU:H	9	0.7
(1,22)	1:A:20:LEU:H	1:A:21:GLY:H	9	0.7
(1,16)	1:A:15:ALA:H	1:A:14:ALA:H	1	0.7
(1,16)	1:A:15:ALA:H	1:A:14:ALA:H	15	0.7
(1,16)	1:A:15:ALA:H	1:A:14:ALA:H	18	0.7
(1,15)	1:A:13:VAL:H	1:A:14:ALA:H	19	0.7
(1,14)	1:A:14:ALA:H	1:A:13:VAL:H	19	0.7
(1,136)	1:A:94:GLU:H	1:A:93:LEU:H	5	0.7
(1,136)	1:A:94:GLU:H	1:A:93:LEU:H	14	0.7
(1,135)	1:A:93:LEU:H	1:A:94:GLU:H	5	0.7
(1,135)	1:A:93:LEU:H	1:A:94:GLU:H	14	0.7
(1,134)	1:A:93:LEU:H	1:A:92:PHE:H	3	0.7

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,134)	1:A:93:LEU:H	1:A:92:PHE:H	4	0.7
(1,133)	1:A:92:PHE:H	1:A:93:LEU:H	3	0.7
(1,133)	1:A:92:PHE:H	1:A:93:LEU:H	4	0.7
(1,128)	1:A:90:TRP:H	1:A:89:LEU:H	4	0.7
(1,128)	1:A:90:TRP:H	1:A:89:LEU:H	16	0.7
(1,127)	1:A:89:LEU:H	1:A:90:TRP:H	4	0.7
(1,127)	1:A:89:LEU:H	1:A:90:TRP:H	16	0.7
(1,126)	1:A:89:LEU:H	1:A:88:ASN:H	7	0.7
(1,126)	1:A:89:LEU:H	1:A:88:ASN:H	13	0.7
(1,126)	1:A:89:LEU:H	1:A:88:ASN:H	16	0.7
(1,126)	1:A:89:LEU:H	1:A:88:ASN:H	19	0.7
(1,124)	1:A:88:ASN:H	1:A:89:LEU:H	7	0.7
(1,124)	1:A:88:ASN:H	1:A:89:LEU:H	13	0.7
(1,124)	1:A:88:ASN:H	1:A:89:LEU:H	16	0.7
(1,124)	1:A:88:ASN:H	1:A:89:LEU:H	19	0.7
(1,12)	1:A:11:ASP:H	1:A:12:ALA:H	20	0.7
(1,11)	1:A:12:ALA:H	1:A:11:ASP:H	20	0.7
(1,101)	1:A:70:ALA:H	1:A:69:VAL:H	3	0.7
(1,101)	1:A:70:ALA:H	1:A:69:VAL:H	5	0.7
(1,100)	1:A:69:VAL:H	1:A:70:ALA:H	3	0.7
(1,100)	1:A:69:VAL:H	1:A:70:ALA:H	5	0.7
(4,128)	1:A:56:PHE:CB	1:A:39:VAL:H	17	0.69
(1,9)	1:A:9:VAL:H	1:A:10:ASP:H	8	0.69
(1,8)	1:A:9:VAL:H	1:A:8:ARG:H	5	0.69
(1,8)	1:A:9:VAL:H	1:A:8:ARG:H	13	0.69
(1,79)	1:A:52:ILE:H	1:A:51:PHE:H	4	0.69
(1,76)	1:A:51:PHE:H	1:A:52:ILE:H	4	0.69
(1,73)	1:A:49:GLN:H	1:A:48:LEU:H	6	0.69
(1,72)	1:A:47:GLY:H	1:A:46:PHE:H	12	0.69
(1,72)	1:A:47:GLY:H	1:A:46:PHE:H	17	0.69
(1,71)	1:A:46:PHE:H	1:A:47:GLY:H	12	0.69
(1,71)	1:A:46:PHE:H	1:A:47:GLY:H	17	0.69
(1,7)	1:A:8:ARG:H	1:A:9:VAL:H	5	0.69
(1,7)	1:A:8:ARG:H	1:A:9:VAL:H	13	0.69
(1,67)	1:A:42:THR:H	1:A:43:GLY:H	2	0.69
(1,63)	1:A:43:GLY:H	1:A:42:THR:H	2	0.69
(1,60)	1:A:38:PHE:H	1:A:39:VAL:H	7	0.69
(1,6)	1:A:8:ARG:H	1:A:7:SER:H	7	0.69
(1,6)	1:A:8:ARG:H	1:A:7:SER:H	8	0.69
(1,6)	1:A:8:ARG:H	1:A:7:SER:H	9	0.69
(1,59)	1:A:39:VAL:H	1:A:38:PHE:H	7	0.69
(1,58)	1:A:38:PHE:H	1:A:37:THR:H	7	0.69

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,57)	1:A:37:THR:H	1:A:38:PHE:H	7	0.69
(1,56)	1:A:37:THR:H	1:A:36:PHE:H	7	0.69
(1,54)	1:A:36:PHE:H	1:A:37:THR:H	7	0.69
(1,53)	1:A:36:PHE:H	1:A:35:VAL:H	8	0.69
(1,52)	1:A:35:VAL:H	1:A:36:PHE:H	8	0.69
(1,45)	1:A:31:PHE:H	1:A:30:ALA:H	14	0.69
(1,45)	1:A:31:PHE:H	1:A:30:ALA:H	17	0.69
(1,43)	1:A:30:ALA:H	1:A:31:PHE:H	14	0.69
(1,43)	1:A:30:ALA:H	1:A:31:PHE:H	17	0.69
(1,4)	1:A:7:SER:H	1:A:8:ARG:H	7	0.69
(1,4)	1:A:7:SER:H	1:A:8:ARG:H	8	0.69
(1,4)	1:A:7:SER:H	1:A:8:ARG:H	9	0.69
(1,35)	1:A:25:ALA:H	1:A:24:ALA:H	8	0.69
(1,35)	1:A:25:ALA:H	1:A:24:ALA:H	13	0.69
(1,34)	1:A:24:ALA:H	1:A:23:TYR:H	12	0.69
(1,34)	1:A:24:ALA:H	1:A:23:TYR:H	14	0.69
(1,34)	1:A:24:ALA:H	1:A:23:TYR:H	17	0.69
(1,33)	1:A:24:ALA:H	1:A:25:ALA:H	8	0.69
(1,33)	1:A:24:ALA:H	1:A:25:ALA:H	13	0.69
(1,32)	1:A:23:TYR:H	1:A:24:ALA:H	12	0.69
(1,32)	1:A:23:TYR:H	1:A:24:ALA:H	14	0.69
(1,32)	1:A:23:TYR:H	1:A:24:ALA:H	17	0.69
(1,31)	1:A:23:TYR:H	1:A:22:GLU:H	10	0.69
(1,30)	1:A:22:GLU:H	1:A:23:TYR:H	10	0.69
(1,25)	1:A:14:ALA:H	1:A:15:ALA:H	17	0.69
(1,16)	1:A:15:ALA:H	1:A:14:ALA:H	17	0.69
(1,138)	1:A:95:THR:H	1:A:94:GLU:H	8	0.69
(1,138)	1:A:95:THR:H	1:A:94:GLU:H	14	0.69
(1,137)	1:A:94:GLU:H	1:A:95:THR:H	8	0.69
(1,137)	1:A:94:GLU:H	1:A:95:THR:H	14	0.69
(1,136)	1:A:94:GLU:H	1:A:93:LEU:H	17	0.69
(1,136)	1:A:94:GLU:H	1:A:93:LEU:H	20	0.69
(1,135)	1:A:93:LEU:H	1:A:94:GLU:H	17	0.69
(1,135)	1:A:93:LEU:H	1:A:94:GLU:H	20	0.69
(1,132)	1:A:91:LEU:H	1:A:90:TRP:H	11	0.69
(1,132)	1:A:91:LEU:H	1:A:90:TRP:H	19	0.69
(1,13)	1:A:13:VAL:H	1:A:12:ALA:H	15	0.69
(1,129)	1:A:90:TRP:H	1:A:91:LEU:H	11	0.69
(1,129)	1:A:90:TRP:H	1:A:91:LEU:H	19	0.69
(1,128)	1:A:90:TRP:H	1:A:89:LEU:H	2	0.69
(1,128)	1:A:90:TRP:H	1:A:89:LEU:H	7	0.69
(1,128)	1:A:90:TRP:H	1:A:89:LEU:H	9	0.69

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,128)	1:A:90:TRP:H	1:A:89:LEU:H	14	0.69
(1,127)	1:A:89:LEU:H	1:A:90:TRP:H	2	0.69
(1,127)	1:A:89:LEU:H	1:A:90:TRP:H	7	0.69
(1,127)	1:A:89:LEU:H	1:A:90:TRP:H	9	0.69
(1,127)	1:A:89:LEU:H	1:A:90:TRP:H	14	0.69
(1,126)	1:A:89:LEU:H	1:A:88:ASN:H	3	0.69
(1,125)	1:A:88:ASN:H	1:A:87:ASN:H	7	0.69
(1,125)	1:A:88:ASN:H	1:A:87:ASN:H	13	0.69
(1,124)	1:A:88:ASN:H	1:A:89:LEU:H	3	0.69
(1,123)	1:A:87:ASN:H	1:A:88:ASN:H	7	0.69
(1,123)	1:A:87:ASN:H	1:A:88:ASN:H	13	0.69
(1,119)	1:A:84:GLU:H	1:A:85:LYS:H	14	0.69
(1,119)	1:A:84:GLU:H	1:A:85:LYS:H	17	0.69
(1,119)	1:A:84:GLU:H	1:A:85:LYS:H	19	0.69
(1,108)	1:A:76:TYR:H	1:A:77:GLY:H	13	0.69
(1,107)	1:A:77:GLY:H	1:A:76:TYR:H	13	0.69
(1,101)	1:A:70:ALA:H	1:A:69:VAL:H	10	0.69
(1,101)	1:A:70:ALA:H	1:A:69:VAL:H	12	0.69
(1,100)	1:A:69:VAL:H	1:A:70:ALA:H	10	0.69
(1,100)	1:A:69:VAL:H	1:A:70:ALA:H	12	0.69
(1,89)	1:A:64:LEU:H	1:A:63:SER:H	19	0.68
(1,88)	1:A:63:SER:H	1:A:64:LEU:H	19	0.68
(1,79)	1:A:52:ILE:H	1:A:51:PHE:H	7	0.68
(1,79)	1:A:52:ILE:H	1:A:51:PHE:H	18	0.68
(1,76)	1:A:51:PHE:H	1:A:52:ILE:H	7	0.68
(1,76)	1:A:51:PHE:H	1:A:52:ILE:H	18	0.68
(1,75)	1:A:50:MET:H	1:A:49:GLN:H	8	0.68
(1,74)	1:A:49:GLN:H	1:A:50:MET:H	8	0.68
(1,73)	1:A:49:GLN:H	1:A:48:LEU:H	5	0.68
(1,72)	1:A:47:GLY:H	1:A:46:PHE:H	3	0.68
(1,72)	1:A:47:GLY:H	1:A:46:PHE:H	4	0.68
(1,72)	1:A:47:GLY:H	1:A:46:PHE:H	18	0.68
(1,71)	1:A:46:PHE:H	1:A:47:GLY:H	3	0.68
(1,71)	1:A:46:PHE:H	1:A:47:GLY:H	4	0.68
(1,71)	1:A:46:PHE:H	1:A:47:GLY:H	18	0.68
(1,60)	1:A:38:PHE:H	1:A:39:VAL:H	1	0.68
(1,6)	1:A:8:ARG:H	1:A:7:SER:H	19	0.68
(1,59)	1:A:39:VAL:H	1:A:38:PHE:H	1	0.68
(1,53)	1:A:36:PHE:H	1:A:35:VAL:H	18	0.68
(1,52)	1:A:35:VAL:H	1:A:36:PHE:H	18	0.68
(1,51)	1:A:35:VAL:H	1:A:34:GLY:H	13	0.68
(1,46)	1:A:31:PHE:H	1:A:32:MET:H	11	0.68

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,44)	1:A:32:MET:H	1:A:31:PHE:H	11	0.68
(1,4)	1:A:7:SER:H	1:A:8:ARG:H	19	0.68
(1,36)	1:A:25:ALA:H	1:A:26:CYS:H	5	0.68
(1,35)	1:A:25:ALA:H	1:A:24:ALA:H	6	0.68
(1,34)	1:A:24:ALA:H	1:A:23:TYR:H	1	0.68
(1,33)	1:A:24:ALA:H	1:A:25:ALA:H	6	0.68
(1,32)	1:A:23:TYR:H	1:A:24:ALA:H	1	0.68
(1,25)	1:A:14:ALA:H	1:A:15:ALA:H	16	0.68
(1,16)	1:A:15:ALA:H	1:A:14:ALA:H	16	0.68
(1,151)	1:A:97:GLN:H	1:A:98:LEU:H	9	0.68
(1,141)	1:A:95:THR:H	1:A:96:GLY:H	14	0.68
(1,139)	1:A:96:GLY:H	1:A:95:THR:H	14	0.68
(1,132)	1:A:91:LEU:H	1:A:90:TRP:H	12	0.68
(1,131)	1:A:92:PHE:H	1:A:91:LEU:H	6	0.68
(1,130)	1:A:91:LEU:H	1:A:92:PHE:H	6	0.68
(1,129)	1:A:90:TRP:H	1:A:91:LEU:H	12	0.68
(1,128)	1:A:90:TRP:H	1:A:89:LEU:H	12	0.68
(1,127)	1:A:89:LEU:H	1:A:90:TRP:H	12	0.68
(1,126)	1:A:89:LEU:H	1:A:88:ASN:H	11	0.68
(1,126)	1:A:89:LEU:H	1:A:88:ASN:H	15	0.68
(1,124)	1:A:88:ASN:H	1:A:89:LEU:H	11	0.68
(1,124)	1:A:88:ASN:H	1:A:89:LEU:H	15	0.68
(1,122)	1:A:87:ASN:H	1:A:86:CYS:H	8	0.68
(1,121)	1:A:86:CYS:H	1:A:87:ASN:H	8	0.68
(1,117)	1:A:84:GLU:H	1:A:83:SER:H	5	0.68
(1,103)	1:A:71:GLY:H	1:A:72:SER:H	20	0.68
(4,60)	1:A:49:GLN:CB	1:A:33:LYS:H	15	0.67
(4,60)	1:A:49:GLN:CB	1:A:33:LYS:H	18	0.67
(4,130)	1:A:56:PHE:CB	1:A:41:GLY:H	20	0.67
(1,91)	1:A:65:LEU:H	1:A:64:LEU:H	10	0.67
(1,90)	1:A:64:LEU:H	1:A:65:LEU:H	10	0.67
(1,9)	1:A:9:VAL:H	1:A:10:ASP:H	4	0.67
(1,9)	1:A:9:VAL:H	1:A:10:ASP:H	12	0.67
(1,89)	1:A:64:LEU:H	1:A:63:SER:H	3	0.67
(1,88)	1:A:63:SER:H	1:A:64:LEU:H	3	0.67
(1,83)	1:A:55:LYS:H	1:A:54:ARG:H	8	0.67
(1,83)	1:A:55:LYS:H	1:A:54:ARG:H	13	0.67
(1,82)	1:A:54:ARG:H	1:A:55:LYS:H	8	0.67
(1,82)	1:A:54:ARG:H	1:A:55:LYS:H	13	0.67
(1,8)	1:A:9:VAL:H	1:A:8:ARG:H	6	0.67
(1,8)	1:A:9:VAL:H	1:A:8:ARG:H	15	0.67
(1,73)	1:A:49:GLN:H	1:A:48:LEU:H	1	0.67

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,72)	1:A:47:GLY:H	1:A:46:PHE:H	9	0.67
(1,72)	1:A:47:GLY:H	1:A:46:PHE:H	15	0.67
(1,71)	1:A:46:PHE:H	1:A:47:GLY:H	9	0.67
(1,71)	1:A:46:PHE:H	1:A:47:GLY:H	15	0.67
(1,7)	1:A:8:ARG:H	1:A:9:VAL:H	6	0.67
(1,7)	1:A:8:ARG:H	1:A:9:VAL:H	15	0.67
(1,66)	1:A:44:MET:H	1:A:43:GLY:H	3	0.67
(1,64)	1:A:43:GLY:H	1:A:44:MET:H	3	0.67
(1,62)	1:A:40:THR:H	1:A:39:VAL:H	17	0.67
(1,61)	1:A:39:VAL:H	1:A:40:THR:H	17	0.67
(1,6)	1:A:8:ARG:H	1:A:7:SER:H	4	0.67
(1,56)	1:A:37:THR:H	1:A:36:PHE:H	3	0.67
(1,56)	1:A:37:THR:H	1:A:36:PHE:H	10	0.67
(1,54)	1:A:36:PHE:H	1:A:37:THR:H	3	0.67
(1,54)	1:A:36:PHE:H	1:A:37:THR:H	10	0.67
(1,5)	1:A:6:LEU:H	1:A:7:SER:H	4	0.67
(1,46)	1:A:31:PHE:H	1:A:32:MET:H	19	0.67
(1,44)	1:A:32:MET:H	1:A:31:PHE:H	19	0.67
(1,42)	1:A:29:HIS:H	1:A:28:SER:H	6	0.67
(1,42)	1:A:29:HIS:H	1:A:28:SER:H	15	0.67
(1,42)	1:A:29:HIS:H	1:A:28:SER:H	19	0.67
(1,41)	1:A:28:SER:H	1:A:29:HIS:H	6	0.67
(1,41)	1:A:28:SER:H	1:A:29:HIS:H	15	0.67
(1,41)	1:A:28:SER:H	1:A:29:HIS:H	19	0.67
(1,40)	1:A:27:GLN:H	1:A:28:SER:H	1	0.67
(1,4)	1:A:7:SER:H	1:A:8:ARG:H	4	0.67
(1,39)	1:A:28:SER:H	1:A:27:GLN:H	1	0.67
(1,36)	1:A:25:ALA:H	1:A:26:CYS:H	10	0.67
(1,31)	1:A:23:TYR:H	1:A:22:GLU:H	11	0.67
(1,30)	1:A:22:GLU:H	1:A:23:TYR:H	11	0.67
(1,3)	1:A:7:SER:H	1:A:6:LEU:H	4	0.67
(1,29)	1:A:22:GLU:H	1:A:21:GLY:H	6	0.67
(1,28)	1:A:21:GLY:H	1:A:22:GLU:H	6	0.67
(1,25)	1:A:14:ALA:H	1:A:15:ALA:H	8	0.67
(1,24)	1:A:21:GLY:H	1:A:22:GLU:H	6	0.67
(1,16)	1:A:15:ALA:H	1:A:14:ALA:H	8	0.67
(1,138)	1:A:95:THR:H	1:A:94:GLU:H	19	0.67
(1,137)	1:A:94:GLU:H	1:A:95:THR:H	19	0.67
(1,136)	1:A:94:GLU:H	1:A:93:LEU:H	9	0.67
(1,135)	1:A:93:LEU:H	1:A:94:GLU:H	9	0.67
(1,132)	1:A:91:LEU:H	1:A:90:TRP:H	7	0.67
(1,132)	1:A:91:LEU:H	1:A:90:TRP:H	16	0.67

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,129)	1:A:90:TRP:H	1:A:91:LEU:H	7	0.67
(1,129)	1:A:90:TRP:H	1:A:91:LEU:H	16	0.67
(1,126)	1:A:89:LEU:H	1:A:88:ASN:H	14	0.67
(1,125)	1:A:88:ASN:H	1:A:87:ASN:H	12	0.67
(1,124)	1:A:88:ASN:H	1:A:89:LEU:H	14	0.67
(1,123)	1:A:87:ASN:H	1:A:88:ASN:H	12	0.67
(1,122)	1:A:87:ASN:H	1:A:86:CYS:H	6	0.67
(1,122)	1:A:87:ASN:H	1:A:86:CYS:H	11	0.67
(1,122)	1:A:87:ASN:H	1:A:86:CYS:H	13	0.67
(1,121)	1:A:86:CYS:H	1:A:87:ASN:H	6	0.67
(1,121)	1:A:86:CYS:H	1:A:87:ASN:H	11	0.67
(1,121)	1:A:86:CYS:H	1:A:87:ASN:H	13	0.67
(1,119)	1:A:84:GLU:H	1:A:85:LYS:H	2	0.67
(1,117)	1:A:84:GLU:H	1:A:83:SER:H	11	0.67
(1,117)	1:A:84:GLU:H	1:A:83:SER:H	20	0.67
(4,5)	1:A:26:CYS:CB	1:A:43:GLY:H	1	0.66
(1,91)	1:A:65:LEU:H	1:A:64:LEU:H	19	0.66
(1,90)	1:A:64:LEU:H	1:A:65:LEU:H	19	0.66
(1,9)	1:A:9:VAL:H	1:A:10:ASP:H	6	0.66
(1,89)	1:A:64:LEU:H	1:A:63:SER:H	8	0.66
(1,88)	1:A:63:SER:H	1:A:64:LEU:H	8	0.66
(1,83)	1:A:55:LYS:H	1:A:54:ARG:H	2	0.66
(1,83)	1:A:55:LYS:H	1:A:54:ARG:H	19	0.66
(1,82)	1:A:54:ARG:H	1:A:55:LYS:H	2	0.66
(1,82)	1:A:54:ARG:H	1:A:55:LYS:H	19	0.66
(1,79)	1:A:52:ILE:H	1:A:51:PHE:H	3	0.66
(1,76)	1:A:51:PHE:H	1:A:52:ILE:H	3	0.66
(1,73)	1:A:49:GLN:H	1:A:48:LEU:H	8	0.66
(1,6)	1:A:8:ARG:H	1:A:7:SER:H	12	0.66
(1,53)	1:A:36:PHE:H	1:A:35:VAL:H	14	0.66
(1,52)	1:A:35:VAL:H	1:A:36:PHE:H	14	0.66
(1,46)	1:A:31:PHE:H	1:A:32:MET:H	18	0.66
(1,44)	1:A:32:MET:H	1:A:31:PHE:H	18	0.66
(1,40)	1:A:27:GLN:H	1:A:28:SER:H	16	0.66
(1,40)	1:A:27:GLN:H	1:A:28:SER:H	18	0.66
(1,40)	1:A:27:GLN:H	1:A:28:SER:H	19	0.66
(1,4)	1:A:7:SER:H	1:A:8:ARG:H	12	0.66
(1,39)	1:A:28:SER:H	1:A:27:GLN:H	16	0.66
(1,39)	1:A:28:SER:H	1:A:27:GLN:H	18	0.66
(1,39)	1:A:28:SER:H	1:A:27:GLN:H	19	0.66
(1,36)	1:A:25:ALA:H	1:A:26:CYS:H	8	0.66
(1,35)	1:A:25:ALA:H	1:A:24:ALA:H	3	0.66

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,33)	1:A:24:ALA:H	1:A:25:ALA:H	3	0.66
(1,31)	1:A:23:TYR:H	1:A:22:GLU:H	2	0.66
(1,31)	1:A:23:TYR:H	1:A:22:GLU:H	4	0.66
(1,30)	1:A:22:GLU:H	1:A:23:TYR:H	2	0.66
(1,30)	1:A:22:GLU:H	1:A:23:TYR:H	4	0.66
(1,27)	1:A:21:GLY:H	1:A:20:LEU:H	5	0.66
(1,26)	1:A:20:LEU:H	1:A:21:GLY:H	5	0.66
(1,25)	1:A:14:ALA:H	1:A:15:ALA:H	3	0.66
(1,25)	1:A:14:ALA:H	1:A:15:ALA:H	4	0.66
(1,23)	1:A:21:GLY:H	1:A:20:LEU:H	5	0.66
(1,22)	1:A:20:LEU:H	1:A:21:GLY:H	5	0.66
(1,16)	1:A:15:ALA:H	1:A:14:ALA:H	3	0.66
(1,16)	1:A:15:ALA:H	1:A:14:ALA:H	4	0.66
(1,15)	1:A:13:VAL:H	1:A:14:ALA:H	6	0.66
(1,14)	1:A:14:ALA:H	1:A:13:VAL:H	6	0.66
(1,138)	1:A:95:THR:H	1:A:94:GLU:H	18	0.66
(1,137)	1:A:94:GLU:H	1:A:95:THR:H	18	0.66
(1,132)	1:A:91:LEU:H	1:A:90:TRP:H	14	0.66
(1,131)	1:A:92:PHE:H	1:A:91:LEU:H	9	0.66
(1,131)	1:A:92:PHE:H	1:A:91:LEU:H	10	0.66
(1,130)	1:A:91:LEU:H	1:A:92:PHE:H	9	0.66
(1,130)	1:A:91:LEU:H	1:A:92:PHE:H	10	0.66
(1,13)	1:A:13:VAL:H	1:A:12:ALA:H	9	0.66
(1,129)	1:A:90:TRP:H	1:A:91:LEU:H	14	0.66
(1,125)	1:A:88:ASN:H	1:A:87:ASN:H	5	0.66
(1,125)	1:A:88:ASN:H	1:A:87:ASN:H	17	0.66
(1,123)	1:A:87:ASN:H	1:A:88:ASN:H	5	0.66
(1,123)	1:A:87:ASN:H	1:A:88:ASN:H	17	0.66
(1,12)	1:A:11:ASP:H	1:A:12:ALA:H	1	0.66
(1,12)	1:A:11:ASP:H	1:A:12:ALA:H	6	0.66
(1,119)	1:A:84:GLU:H	1:A:85:LYS:H	16	0.66
(1,117)	1:A:84:GLU:H	1:A:83:SER:H	12	0.66
(1,117)	1:A:84:GLU:H	1:A:83:SER:H	19	0.66
(1,115)	1:A:82:GLU:H	1:A:83:SER:H	18	0.66
(1,114)	1:A:83:SER:H	1:A:82:GLU:H	18	0.66
(1,11)	1:A:12:ALA:H	1:A:11:ASP:H	1	0.66
(1,11)	1:A:12:ALA:H	1:A:11:ASP:H	6	0.66
(1,105)	1:A:73:VAL:H	1:A:72:SER:H	5	0.66
(1,105)	1:A:73:VAL:H	1:A:72:SER:H	10	0.66
(1,105)	1:A:73:VAL:H	1:A:72:SER:H	11	0.66
(1,105)	1:A:73:VAL:H	1:A:72:SER:H	12	0.66
(1,105)	1:A:73:VAL:H	1:A:72:SER:H	14	0.66

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,103)	1:A:71:GLY:H	1:A:72:SER:H	14	0.66
(4,60)	1:A:49:GLN:CB	1:A:33:LYS:H	20	0.65
(1,93)	1:A:66:VAL:H	1:A:65:LEU:H	19	0.65
(1,92)	1:A:65:LEU:H	1:A:66:VAL:H	19	0.65
(1,9)	1:A:9:VAL:H	1:A:10:ASP:H	3	0.65
(1,89)	1:A:64:LEU:H	1:A:63:SER:H	6	0.65
(1,88)	1:A:63:SER:H	1:A:64:LEU:H	6	0.65
(1,8)	1:A:9:VAL:H	1:A:8:ARG:H	2	0.65
(1,78)	1:A:52:ILE:H	1:A:53:GLN:H	19	0.65
(1,77)	1:A:53:GLN:H	1:A:52:ILE:H	19	0.65
(1,73)	1:A:49:GLN:H	1:A:48:LEU:H	4	0.65
(1,72)	1:A:47:GLY:H	1:A:46:PHE:H	1	0.65
(1,72)	1:A:47:GLY:H	1:A:46:PHE:H	20	0.65
(1,71)	1:A:46:PHE:H	1:A:47:GLY:H	1	0.65
(1,71)	1:A:46:PHE:H	1:A:47:GLY:H	20	0.65
(1,7)	1:A:8:ARG:H	1:A:9:VAL:H	2	0.65
(1,67)	1:A:42:THR:H	1:A:43:GLY:H	12	0.65
(1,63)	1:A:43:GLY:H	1:A:42:THR:H	12	0.65
(1,62)	1:A:40:THR:H	1:A:39:VAL:H	7	0.65
(1,62)	1:A:40:THR:H	1:A:39:VAL:H	18	0.65
(1,61)	1:A:39:VAL:H	1:A:40:THR:H	7	0.65
(1,61)	1:A:39:VAL:H	1:A:40:THR:H	18	0.65
(1,60)	1:A:38:PHE:H	1:A:39:VAL:H	20	0.65
(1,59)	1:A:39:VAL:H	1:A:38:PHE:H	20	0.65
(1,58)	1:A:38:PHE:H	1:A:37:THR:H	14	0.65
(1,57)	1:A:37:THR:H	1:A:38:PHE:H	14	0.65
(1,53)	1:A:36:PHE:H	1:A:35:VAL:H	2	0.65
(1,53)	1:A:36:PHE:H	1:A:35:VAL:H	7	0.65
(1,53)	1:A:36:PHE:H	1:A:35:VAL:H	16	0.65
(1,52)	1:A:35:VAL:H	1:A:36:PHE:H	2	0.65
(1,52)	1:A:35:VAL:H	1:A:36:PHE:H	7	0.65
(1,52)	1:A:35:VAL:H	1:A:36:PHE:H	16	0.65
(1,50)	1:A:34:GLY:H	1:A:33:LYS:H	1	0.65
(1,50)	1:A:34:GLY:H	1:A:33:LYS:H	4	0.65
(1,50)	1:A:34:GLY:H	1:A:33:LYS:H	17	0.65
(1,50)	1:A:34:GLY:H	1:A:33:LYS:H	19	0.65
(1,49)	1:A:33:LYS:H	1:A:32:MET:H	8	0.65
(1,48)	1:A:33:LYS:H	1:A:34:GLY:H	1	0.65
(1,48)	1:A:33:LYS:H	1:A:34:GLY:H	4	0.65
(1,48)	1:A:33:LYS:H	1:A:34:GLY:H	17	0.65
(1,48)	1:A:33:LYS:H	1:A:34:GLY:H	19	0.65
(1,47)	1:A:32:MET:H	1:A:33:LYS:H	8	0.65

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,42)	1:A:29:HIS:H	1:A:28:SER:H	7	0.65
(1,42)	1:A:29:HIS:H	1:A:28:SER:H	11	0.65
(1,42)	1:A:29:HIS:H	1:A:28:SER:H	13	0.65
(1,41)	1:A:28:SER:H	1:A:29:HIS:H	7	0.65
(1,41)	1:A:28:SER:H	1:A:29:HIS:H	11	0.65
(1,41)	1:A:28:SER:H	1:A:29:HIS:H	13	0.65
(1,36)	1:A:25:ALA:H	1:A:26:CYS:H	17	0.65
(1,34)	1:A:24:ALA:H	1:A:23:TYR:H	11	0.65
(1,34)	1:A:24:ALA:H	1:A:23:TYR:H	16	0.65
(1,32)	1:A:23:TYR:H	1:A:24:ALA:H	11	0.65
(1,32)	1:A:23:TYR:H	1:A:24:ALA:H	16	0.65
(1,31)	1:A:23:TYR:H	1:A:22:GLU:H	8	0.65
(1,30)	1:A:22:GLU:H	1:A:23:TYR:H	8	0.65
(1,29)	1:A:22:GLU:H	1:A:21:GLY:H	2	0.65
(1,28)	1:A:21:GLY:H	1:A:22:GLU:H	2	0.65
(1,24)	1:A:21:GLY:H	1:A:22:GLU:H	2	0.65
(1,15)	1:A:13:VAL:H	1:A:14:ALA:H	1	0.65
(1,14)	1:A:14:ALA:H	1:A:13:VAL:H	1	0.65
(1,132)	1:A:91:LEU:H	1:A:90:TRP:H	9	0.65
(1,132)	1:A:91:LEU:H	1:A:90:TRP:H	13	0.65
(1,131)	1:A:92:PHE:H	1:A:91:LEU:H	2	0.65
(1,130)	1:A:91:LEU:H	1:A:92:PHE:H	2	0.65
(1,129)	1:A:90:TRP:H	1:A:91:LEU:H	9	0.65
(1,129)	1:A:90:TRP:H	1:A:91:LEU:H	13	0.65
(1,126)	1:A:89:LEU:H	1:A:88:ASN:H	2	0.65
(1,125)	1:A:88:ASN:H	1:A:87:ASN:H	6	0.65
(1,125)	1:A:88:ASN:H	1:A:87:ASN:H	18	0.65
(1,124)	1:A:88:ASN:H	1:A:89:LEU:H	2	0.65
(1,123)	1:A:87:ASN:H	1:A:88:ASN:H	6	0.65
(1,123)	1:A:87:ASN:H	1:A:88:ASN:H	18	0.65
(1,120)	1:A:86:CYS:H	1:A:85:LYS:H	20	0.65
(1,12)	1:A:11:ASP:H	1:A:12:ALA:H	8	0.65
(1,12)	1:A:11:ASP:H	1:A:12:ALA:H	19	0.65
(1,118)	1:A:85:LYS:H	1:A:86:CYS:H	20	0.65
(1,11)	1:A:12:ALA:H	1:A:11:ASP:H	8	0.65
(1,11)	1:A:12:ALA:H	1:A:11:ASP:H	19	0.65
(1,105)	1:A:73:VAL:H	1:A:72:SER:H	3	0.65
(1,105)	1:A:73:VAL:H	1:A:72:SER:H	7	0.65
(1,105)	1:A:73:VAL:H	1:A:72:SER:H	19	0.65
(4,203)	1:A:86:CYS:CB	1:A:31:PHE:H	3	0.64
(4,129)	1:A:56:PHE:CB	1:A:40:THR:H	7	0.64
(1,93)	1:A:66:VAL:H	1:A:65:LEU:H	10	0.64

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,92)	1:A:65:LEU:H	1:A:66:VAL:H	10	0.64
(1,89)	1:A:64:LEU:H	1:A:63:SER:H	11	0.64
(1,88)	1:A:63:SER:H	1:A:64:LEU:H	11	0.64
(1,81)	1:A:54:ARG:H	1:A:53:GLN:H	2	0.64
(1,80)	1:A:53:GLN:H	1:A:54:ARG:H	2	0.64
(1,8)	1:A:9:VAL:H	1:A:8:ARG:H	3	0.64
(1,79)	1:A:52:ILE:H	1:A:51:PHE:H	19	0.64
(1,76)	1:A:51:PHE:H	1:A:52:ILE:H	19	0.64
(1,73)	1:A:49:GLN:H	1:A:48:LEU:H	11	0.64
(1,73)	1:A:49:GLN:H	1:A:48:LEU:H	16	0.64
(1,73)	1:A:49:GLN:H	1:A:48:LEU:H	19	0.64
(1,7)	1:A:8:ARG:H	1:A:9:VAL:H	3	0.64
(1,60)	1:A:38:PHE:H	1:A:39:VAL:H	2	0.64
(1,6)	1:A:8:ARG:H	1:A:7:SER:H	5	0.64
(1,6)	1:A:8:ARG:H	1:A:7:SER:H	13	0.64
(1,6)	1:A:8:ARG:H	1:A:7:SER:H	17	0.64
(1,59)	1:A:39:VAL:H	1:A:38:PHE:H	2	0.64
(1,56)	1:A:37:THR:H	1:A:36:PHE:H	11	0.64
(1,54)	1:A:36:PHE:H	1:A:37:THR:H	11	0.64
(1,53)	1:A:36:PHE:H	1:A:35:VAL:H	20	0.64
(1,52)	1:A:35:VAL:H	1:A:36:PHE:H	20	0.64
(1,5)	1:A:6:LEU:H	1:A:7:SER:H	14	0.64
(1,46)	1:A:31:PHE:H	1:A:32:MET:H	14	0.64
(1,44)	1:A:32:MET:H	1:A:31:PHE:H	14	0.64
(1,42)	1:A:29:HIS:H	1:A:28:SER:H	17	0.64
(1,41)	1:A:28:SER:H	1:A:29:HIS:H	17	0.64
(1,40)	1:A:27:GLN:H	1:A:28:SER:H	13	0.64
(1,4)	1:A:7:SER:H	1:A:8:ARG:H	5	0.64
(1,4)	1:A:7:SER:H	1:A:8:ARG:H	13	0.64
(1,4)	1:A:7:SER:H	1:A:8:ARG:H	17	0.64
(1,39)	1:A:28:SER:H	1:A:27:GLN:H	13	0.64
(1,34)	1:A:24:ALA:H	1:A:23:TYR:H	18	0.64
(1,32)	1:A:23:TYR:H	1:A:24:ALA:H	18	0.64
(1,31)	1:A:23:TYR:H	1:A:22:GLU:H	13	0.64
(1,30)	1:A:22:GLU:H	1:A:23:TYR:H	13	0.64
(1,3)	1:A:7:SER:H	1:A:6:LEU:H	14	0.64
(1,29)	1:A:22:GLU:H	1:A:21:GLY:H	8	0.64
(1,28)	1:A:21:GLY:H	1:A:22:GLU:H	8	0.64
(1,27)	1:A:21:GLY:H	1:A:20:LEU:H	2	0.64
(1,26)	1:A:20:LEU:H	1:A:21:GLY:H	2	0.64
(1,25)	1:A:14:ALA:H	1:A:15:ALA:H	9	0.64
(1,24)	1:A:21:GLY:H	1:A:22:GLU:H	8	0.64

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,23)	1:A:21:GLY:H	1:A:20:LEU:H	2	0.64
(1,22)	1:A:20:LEU:H	1:A:21:GLY:H	2	0.64
(1,16)	1:A:15:ALA:H	1:A:14:ALA:H	9	0.64
(1,138)	1:A:95:THR:H	1:A:94:GLU:H	9	0.64
(1,137)	1:A:94:GLU:H	1:A:95:THR:H	9	0.64
(1,136)	1:A:94:GLU:H	1:A:93:LEU:H	11	0.64
(1,135)	1:A:93:LEU:H	1:A:94:GLU:H	11	0.64
(1,132)	1:A:91:LEU:H	1:A:90:TRP:H	5	0.64
(1,131)	1:A:92:PHE:H	1:A:91:LEU:H	5	0.64
(1,130)	1:A:91:LEU:H	1:A:92:PHE:H	5	0.64
(1,13)	1:A:13:VAL:H	1:A:12:ALA:H	6	0.64
(1,129)	1:A:90:TRP:H	1:A:91:LEU:H	5	0.64
(1,128)	1:A:90:TRP:H	1:A:89:LEU:H	8	0.64
(1,127)	1:A:89:LEU:H	1:A:90:TRP:H	8	0.64
(1,126)	1:A:89:LEU:H	1:A:88:ASN:H	1	0.64
(1,126)	1:A:89:LEU:H	1:A:88:ASN:H	18	0.64
(1,125)	1:A:88:ASN:H	1:A:87:ASN:H	8	0.64
(1,124)	1:A:88:ASN:H	1:A:89:LEU:H	1	0.64
(1,124)	1:A:88:ASN:H	1:A:89:LEU:H	18	0.64
(1,123)	1:A:87:ASN:H	1:A:88:ASN:H	8	0.64
(1,122)	1:A:87:ASN:H	1:A:86:CYS:H	16	0.64
(1,121)	1:A:86:CYS:H	1:A:87:ASN:H	16	0.64
(1,119)	1:A:84:GLU:H	1:A:85:LYS:H	20	0.64
(1,117)	1:A:84:GLU:H	1:A:83:SER:H	3	0.64
(1,116)	1:A:82:GLU:H	1:A:81:VAL:H	17	0.64
(1,113)	1:A:81:VAL:H	1:A:82:GLU:H	17	0.64
(1,110)	1:A:79:THR:H	1:A:78:VAL:H	3	0.64
(1,109)	1:A:78:VAL:H	1:A:79:THR:H	3	0.64
(1,106)	1:A:78:VAL:H	1:A:79:THR:H	3	0.64
(1,105)	1:A:73:VAL:H	1:A:72:SER:H	1	0.64
(1,105)	1:A:73:VAL:H	1:A:72:SER:H	9	0.64
(1,105)	1:A:73:VAL:H	1:A:72:SER:H	13	0.64
(1,105)	1:A:73:VAL:H	1:A:72:SER:H	15	0.64
(1,105)	1:A:73:VAL:H	1:A:72:SER:H	17	0.64
(1,10)	1:A:11:ASP:H	1:A:10:ASP:H	12	0.64
(4,66)	1:A:49:GLN:CB	1:A:67:ALA:H	2	0.63
(1,91)	1:A:65:LEU:H	1:A:64:LEU:H	13	0.63
(1,90)	1:A:64:LEU:H	1:A:65:LEU:H	13	0.63
(1,89)	1:A:64:LEU:H	1:A:63:SER:H	5	0.63
(1,88)	1:A:63:SER:H	1:A:64:LEU:H	5	0.63
(1,83)	1:A:55:LYS:H	1:A:54:ARG:H	4	0.63
(1,83)	1:A:55:LYS:H	1:A:54:ARG:H	15	0.63

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,83)	1:A:55:LYS:H	1:A:54:ARG:H	17	0.63
(1,82)	1:A:54:ARG:H	1:A:55:LYS:H	4	0.63
(1,82)	1:A:54:ARG:H	1:A:55:LYS:H	15	0.63
(1,82)	1:A:54:ARG:H	1:A:55:LYS:H	17	0.63
(1,8)	1:A:9:VAL:H	1:A:8:ARG:H	14	0.63
(1,8)	1:A:9:VAL:H	1:A:8:ARG:H	20	0.63
(1,79)	1:A:52:ILE:H	1:A:51:PHE:H	8	0.63
(1,76)	1:A:51:PHE:H	1:A:52:ILE:H	8	0.63
(1,72)	1:A:47:GLY:H	1:A:46:PHE:H	5	0.63
(1,72)	1:A:47:GLY:H	1:A:46:PHE:H	6	0.63
(1,71)	1:A:46:PHE:H	1:A:47:GLY:H	5	0.63
(1,71)	1:A:46:PHE:H	1:A:47:GLY:H	6	0.63
(1,70)	1:A:46:PHE:H	1:A:45:ALA:H	7	0.63
(1,7)	1:A:8:ARG:H	1:A:9:VAL:H	14	0.63
(1,7)	1:A:8:ARG:H	1:A:9:VAL:H	20	0.63
(1,69)	1:A:45:ALA:H	1:A:46:PHE:H	7	0.63
(1,60)	1:A:38:PHE:H	1:A:39:VAL:H	15	0.63
(1,60)	1:A:38:PHE:H	1:A:39:VAL:H	17	0.63
(1,6)	1:A:8:ARG:H	1:A:7:SER:H	3	0.63
(1,59)	1:A:39:VAL:H	1:A:38:PHE:H	15	0.63
(1,59)	1:A:39:VAL:H	1:A:38:PHE:H	17	0.63
(1,58)	1:A:38:PHE:H	1:A:37:THR:H	6	0.63
(1,58)	1:A:38:PHE:H	1:A:37:THR:H	10	0.63
(1,57)	1:A:37:THR:H	1:A:38:PHE:H	6	0.63
(1,57)	1:A:37:THR:H	1:A:38:PHE:H	10	0.63
(1,56)	1:A:37:THR:H	1:A:36:PHE:H	1	0.63
(1,54)	1:A:36:PHE:H	1:A:37:THR:H	1	0.63
(1,53)	1:A:36:PHE:H	1:A:35:VAL:H	15	0.63
(1,52)	1:A:35:VAL:H	1:A:36:PHE:H	15	0.63
(1,50)	1:A:34:GLY:H	1:A:33:LYS:H	10	0.63
(1,5)	1:A:6:LEU:H	1:A:7:SER:H	11	0.63
(1,49)	1:A:33:LYS:H	1:A:32:MET:H	13	0.63
(1,49)	1:A:33:LYS:H	1:A:32:MET:H	14	0.63
(1,48)	1:A:33:LYS:H	1:A:34:GLY:H	10	0.63
(1,47)	1:A:32:MET:H	1:A:33:LYS:H	13	0.63
(1,47)	1:A:32:MET:H	1:A:33:LYS:H	14	0.63
(1,45)	1:A:31:PHE:H	1:A:30:ALA:H	3	0.63
(1,45)	1:A:31:PHE:H	1:A:30:ALA:H	4	0.63
(1,43)	1:A:30:ALA:H	1:A:31:PHE:H	3	0.63
(1,43)	1:A:30:ALA:H	1:A:31:PHE:H	4	0.63
(1,40)	1:A:27:GLN:H	1:A:28:SER:H	15	0.63
(1,4)	1:A:7:SER:H	1:A:8:ARG:H	3	0.63

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,39)	1:A:28:SER:H	1:A:27:GLN:H	15	0.63
(1,36)	1:A:25:ALA:H	1:A:26:CYS:H	1	0.63
(1,36)	1:A:25:ALA:H	1:A:26:CYS:H	16	0.63
(1,36)	1:A:25:ALA:H	1:A:26:CYS:H	20	0.63
(1,34)	1:A:24:ALA:H	1:A:23:TYR:H	4	0.63
(1,32)	1:A:23:TYR:H	1:A:24:ALA:H	4	0.63
(1,31)	1:A:23:TYR:H	1:A:22:GLU:H	9	0.63
(1,30)	1:A:22:GLU:H	1:A:23:TYR:H	9	0.63
(1,3)	1:A:7:SER:H	1:A:6:LEU:H	11	0.63
(1,25)	1:A:14:ALA:H	1:A:15:ALA:H	2	0.63
(1,25)	1:A:14:ALA:H	1:A:15:ALA:H	19	0.63
(1,16)	1:A:15:ALA:H	1:A:14:ALA:H	2	0.63
(1,16)	1:A:15:ALA:H	1:A:14:ALA:H	19	0.63
(1,138)	1:A:95:THR:H	1:A:94:GLU:H	10	0.63
(1,137)	1:A:94:GLU:H	1:A:95:THR:H	10	0.63
(1,131)	1:A:92:PHE:H	1:A:91:LEU:H	13	0.63
(1,130)	1:A:91:LEU:H	1:A:92:PHE:H	13	0.63
(1,126)	1:A:89:LEU:H	1:A:88:ASN:H	9	0.63
(1,124)	1:A:88:ASN:H	1:A:89:LEU:H	9	0.63
(1,120)	1:A:86:CYS:H	1:A:85:LYS:H	19	0.63
(1,119)	1:A:84:GLU:H	1:A:85:LYS:H	1	0.63
(1,118)	1:A:85:LYS:H	1:A:86:CYS:H	19	0.63
(1,117)	1:A:84:GLU:H	1:A:83:SER:H	6	0.63
(1,117)	1:A:84:GLU:H	1:A:83:SER:H	15	0.63
(1,115)	1:A:82:GLU:H	1:A:83:SER:H	9	0.63
(1,114)	1:A:83:SER:H	1:A:82:GLU:H	9	0.63
(1,105)	1:A:73:VAL:H	1:A:72:SER:H	4	0.63
(1,105)	1:A:73:VAL:H	1:A:72:SER:H	6	0.63
(1,105)	1:A:73:VAL:H	1:A:72:SER:H	16	0.63
(1,103)	1:A:71:GLY:H	1:A:72:SER:H	9	0.63
(4,5)	1:A:26:CYS:CB	1:A:43:GLY:H	14	0.62
(4,204)	1:A:86:CYS:CB	1:A:32:MET:H	19	0.62
(1,93)	1:A:66:VAL:H	1:A:65:LEU:H	6	0.62
(1,92)	1:A:65:LEU:H	1:A:66:VAL:H	6	0.62
(1,9)	1:A:9:VAL:H	1:A:10:ASP:H	13	0.62
(1,89)	1:A:64:LEU:H	1:A:63:SER:H	9	0.62
(1,89)	1:A:64:LEU:H	1:A:63:SER:H	10	0.62
(1,88)	1:A:63:SER:H	1:A:64:LEU:H	9	0.62
(1,88)	1:A:63:SER:H	1:A:64:LEU:H	10	0.62
(1,83)	1:A:55:LYS:H	1:A:54:ARG:H	10	0.62
(1,83)	1:A:55:LYS:H	1:A:54:ARG:H	12	0.62
(1,83)	1:A:55:LYS:H	1:A:54:ARG:H	14	0.62

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,83)	1:A:55:LYS:H	1:A:54:ARG:H	16	0.62
(1,83)	1:A:55:LYS:H	1:A:54:ARG:H	18	0.62
(1,83)	1:A:55:LYS:H	1:A:54:ARG:H	20	0.62
(1,82)	1:A:54:ARG:H	1:A:55:LYS:H	10	0.62
(1,82)	1:A:54:ARG:H	1:A:55:LYS:H	12	0.62
(1,82)	1:A:54:ARG:H	1:A:55:LYS:H	14	0.62
(1,82)	1:A:54:ARG:H	1:A:55:LYS:H	16	0.62
(1,82)	1:A:54:ARG:H	1:A:55:LYS:H	18	0.62
(1,82)	1:A:54:ARG:H	1:A:55:LYS:H	20	0.62
(1,73)	1:A:49:GLN:H	1:A:48:LEU:H	18	0.62
(1,66)	1:A:44:MET:H	1:A:43:GLY:H	17	0.62
(1,64)	1:A:43:GLY:H	1:A:44:MET:H	17	0.62
(1,62)	1:A:40:THR:H	1:A:39:VAL:H	10	0.62
(1,61)	1:A:39:VAL:H	1:A:40:THR:H	10	0.62
(1,6)	1:A:8:ARG:H	1:A:7:SER:H	11	0.62
(1,58)	1:A:38:PHE:H	1:A:37:THR:H	20	0.62
(1,57)	1:A:37:THR:H	1:A:38:PHE:H	20	0.62
(1,56)	1:A:37:THR:H	1:A:36:PHE:H	17	0.62
(1,54)	1:A:36:PHE:H	1:A:37:THR:H	17	0.62
(1,5)	1:A:6:LEU:H	1:A:7:SER:H	12	0.62
(1,5)	1:A:6:LEU:H	1:A:7:SER:H	20	0.62
(1,49)	1:A:33:LYS:H	1:A:32:MET:H	1	0.62
(1,47)	1:A:32:MET:H	1:A:33:LYS:H	1	0.62
(1,42)	1:A:29:HIS:H	1:A:28:SER:H	9	0.62
(1,42)	1:A:29:HIS:H	1:A:28:SER:H	10	0.62
(1,41)	1:A:28:SER:H	1:A:29:HIS:H	9	0.62
(1,41)	1:A:28:SER:H	1:A:29:HIS:H	10	0.62
(1,4)	1:A:7:SER:H	1:A:8:ARG:H	11	0.62
(1,36)	1:A:25:ALA:H	1:A:26:CYS:H	13	0.62
(1,36)	1:A:25:ALA:H	1:A:26:CYS:H	15	0.62
(1,34)	1:A:24:ALA:H	1:A:23:TYR:H	2	0.62
(1,32)	1:A:23:TYR:H	1:A:24:ALA:H	2	0.62
(1,31)	1:A:23:TYR:H	1:A:22:GLU:H	6	0.62
(1,30)	1:A:22:GLU:H	1:A:23:TYR:H	6	0.62
(1,3)	1:A:7:SER:H	1:A:6:LEU:H	12	0.62
(1,3)	1:A:7:SER:H	1:A:6:LEU:H	20	0.62
(1,25)	1:A:14:ALA:H	1:A:15:ALA:H	20	0.62
(1,16)	1:A:15:ALA:H	1:A:14:ALA:H	20	0.62
(1,151)	1:A:97:GLN:H	1:A:98:LEU:H	3	0.62
(1,136)	1:A:94:GLU:H	1:A:93:LEU:H	16	0.62
(1,135)	1:A:93:LEU:H	1:A:94:GLU:H	16	0.62
(1,134)	1:A:93:LEU:H	1:A:92:PHE:H	17	0.62

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,133)	1:A:92:PHE:H	1:A:93:LEU:H	17	0.62
(1,132)	1:A:91:LEU:H	1:A:90:TRP:H	4	0.62
(1,132)	1:A:91:LEU:H	1:A:90:TRP:H	10	0.62
(1,132)	1:A:91:LEU:H	1:A:90:TRP:H	15	0.62
(1,129)	1:A:90:TRP:H	1:A:91:LEU:H	4	0.62
(1,129)	1:A:90:TRP:H	1:A:91:LEU:H	10	0.62
(1,129)	1:A:90:TRP:H	1:A:91:LEU:H	15	0.62
(1,128)	1:A:90:TRP:H	1:A:89:LEU:H	6	0.62
(1,128)	1:A:90:TRP:H	1:A:89:LEU:H	17	0.62
(1,127)	1:A:89:LEU:H	1:A:90:TRP:H	6	0.62
(1,127)	1:A:89:LEU:H	1:A:90:TRP:H	17	0.62
(1,117)	1:A:84:GLU:H	1:A:83:SER:H	13	0.62
(1,116)	1:A:82:GLU:H	1:A:81:VAL:H	4	0.62
(1,116)	1:A:82:GLU:H	1:A:81:VAL:H	9	0.62
(1,113)	1:A:81:VAL:H	1:A:82:GLU:H	4	0.62
(1,113)	1:A:81:VAL:H	1:A:82:GLU:H	9	0.62
(1,105)	1:A:73:VAL:H	1:A:72:SER:H	2	0.62
(1,105)	1:A:73:VAL:H	1:A:72:SER:H	18	0.62
(1,105)	1:A:73:VAL:H	1:A:72:SER:H	20	0.62
(1,103)	1:A:71:GLY:H	1:A:72:SER:H	15	0.62
(1,10)	1:A:11:ASP:H	1:A:10:ASP:H	8	0.62
(1,10)	1:A:11:ASP:H	1:A:10:ASP:H	14	0.62
(1,93)	1:A:66:VAL:H	1:A:65:LEU:H	11	0.61
(1,93)	1:A:66:VAL:H	1:A:65:LEU:H	14	0.61
(1,93)	1:A:66:VAL:H	1:A:65:LEU:H	16	0.61
(1,92)	1:A:65:LEU:H	1:A:66:VAL:H	11	0.61
(1,92)	1:A:65:LEU:H	1:A:66:VAL:H	14	0.61
(1,92)	1:A:65:LEU:H	1:A:66:VAL:H	16	0.61
(1,9)	1:A:9:VAL:H	1:A:10:ASP:H	1	0.61
(1,89)	1:A:64:LEU:H	1:A:63:SER:H	2	0.61
(1,89)	1:A:64:LEU:H	1:A:63:SER:H	12	0.61
(1,88)	1:A:63:SER:H	1:A:64:LEU:H	2	0.61
(1,88)	1:A:63:SER:H	1:A:64:LEU:H	12	0.61
(1,87)	1:A:63:SER:H	1:A:62:TRP:H	19	0.61
(1,86)	1:A:62:TRP:H	1:A:63:SER:H	19	0.61
(1,83)	1:A:55:LYS:H	1:A:54:ARG:H	1	0.61
(1,83)	1:A:55:LYS:H	1:A:54:ARG:H	3	0.61
(1,83)	1:A:55:LYS:H	1:A:54:ARG:H	5	0.61
(1,83)	1:A:55:LYS:H	1:A:54:ARG:H	6	0.61
(1,83)	1:A:55:LYS:H	1:A:54:ARG:H	9	0.61
(1,82)	1:A:54:ARG:H	1:A:55:LYS:H	1	0.61
(1,82)	1:A:54:ARG:H	1:A:55:LYS:H	3	0.61

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,82)	1:A:54:ARG:H	1:A:55:LYS:H	5	0.61
(1,82)	1:A:54:ARG:H	1:A:55:LYS:H	6	0.61
(1,82)	1:A:54:ARG:H	1:A:55:LYS:H	9	0.61
(1,81)	1:A:54:ARG:H	1:A:53:GLN:H	10	0.61
(1,80)	1:A:53:GLN:H	1:A:54:ARG:H	10	0.61
(1,79)	1:A:52:ILE:H	1:A:51:PHE:H	13	0.61
(1,76)	1:A:51:PHE:H	1:A:52:ILE:H	13	0.61
(1,75)	1:A:50:MET:H	1:A:49:GLN:H	16	0.61
(1,74)	1:A:49:GLN:H	1:A:50:MET:H	16	0.61
(1,6)	1:A:8:ARG:H	1:A:7:SER:H	6	0.61
(1,53)	1:A:36:PHE:H	1:A:35:VAL:H	9	0.61
(1,53)	1:A:36:PHE:H	1:A:35:VAL:H	12	0.61
(1,53)	1:A:36:PHE:H	1:A:35:VAL:H	19	0.61
(1,52)	1:A:35:VAL:H	1:A:36:PHE:H	9	0.61
(1,52)	1:A:35:VAL:H	1:A:36:PHE:H	12	0.61
(1,52)	1:A:35:VAL:H	1:A:36:PHE:H	19	0.61
(1,5)	1:A:6:LEU:H	1:A:7:SER:H	19	0.61
(1,49)	1:A:33:LYS:H	1:A:32:MET:H	10	0.61
(1,47)	1:A:32:MET:H	1:A:33:LYS:H	10	0.61
(1,42)	1:A:29:HIS:H	1:A:28:SER:H	16	0.61
(1,41)	1:A:28:SER:H	1:A:29:HIS:H	16	0.61
(1,4)	1:A:7:SER:H	1:A:8:ARG:H	6	0.61
(1,34)	1:A:24:ALA:H	1:A:23:TYR:H	13	0.61
(1,32)	1:A:23:TYR:H	1:A:24:ALA:H	13	0.61
(1,31)	1:A:23:TYR:H	1:A:22:GLU:H	20	0.61
(1,30)	1:A:22:GLU:H	1:A:23:TYR:H	20	0.61
(1,3)	1:A:7:SER:H	1:A:6:LEU:H	19	0.61
(1,150)	1:A:36:PHE:H	1:A:34:GLY:H	9	0.61
(1,142)	1:A:97:GLN:H	1:A:96:GLY:H	14	0.61
(1,140)	1:A:96:GLY:H	1:A:97:GLN:H	14	0.61
(1,131)	1:A:92:PHE:H	1:A:91:LEU:H	3	0.61
(1,130)	1:A:91:LEU:H	1:A:92:PHE:H	3	0.61
(1,13)	1:A:13:VAL:H	1:A:12:ALA:H	2	0.61
(1,128)	1:A:90:TRP:H	1:A:89:LEU:H	11	0.61
(1,128)	1:A:90:TRP:H	1:A:89:LEU:H	13	0.61
(1,127)	1:A:89:LEU:H	1:A:90:TRP:H	11	0.61
(1,127)	1:A:89:LEU:H	1:A:90:TRP:H	13	0.61
(1,125)	1:A:88:ASN:H	1:A:87:ASN:H	2	0.61
(1,123)	1:A:87:ASN:H	1:A:88:ASN:H	2	0.61
(1,122)	1:A:87:ASN:H	1:A:86:CYS:H	1	0.61
(1,121)	1:A:86:CYS:H	1:A:87:ASN:H	1	0.61
(1,120)	1:A:86:CYS:H	1:A:85:LYS:H	10	0.61

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,118)	1:A:85:LYS:H	1:A:86:CYS:H	10	0.61
(1,103)	1:A:71:GLY:H	1:A:72:SER:H	18	0.61
(1,102)	1:A:71:GLY:H	1:A:70:ALA:H	10	0.61
(1,10)	1:A:11:ASP:H	1:A:10:ASP:H	4	0.61
(1,10)	1:A:11:ASP:H	1:A:10:ASP:H	6	0.61
(1,10)	1:A:11:ASP:H	1:A:10:ASP:H	16	0.61
(4,201)	1:A:86:CYS:CB	1:A:27:GLN:H	1	0.6
(1,99)	1:A:69:VAL:H	1:A:68:VAL:H	10	0.6
(1,96)	1:A:68:VAL:H	1:A:69:VAL:H	10	0.6
(1,93)	1:A:66:VAL:H	1:A:65:LEU:H	12	0.6
(1,93)	1:A:66:VAL:H	1:A:65:LEU:H	13	0.6
(1,92)	1:A:65:LEU:H	1:A:66:VAL:H	12	0.6
(1,92)	1:A:65:LEU:H	1:A:66:VAL:H	13	0.6
(1,87)	1:A:63:SER:H	1:A:62:TRP:H	16	0.6
(1,86)	1:A:62:TRP:H	1:A:63:SER:H	16	0.6
(1,85)	1:A:56:PHE:H	1:A:55:LYS:H	16	0.6
(1,84)	1:A:55:LYS:H	1:A:56:PHE:H	16	0.6
(1,83)	1:A:55:LYS:H	1:A:54:ARG:H	11	0.6
(1,82)	1:A:54:ARG:H	1:A:55:LYS:H	11	0.6
(1,75)	1:A:50:MET:H	1:A:49:GLN:H	14	0.6
(1,74)	1:A:49:GLN:H	1:A:50:MET:H	14	0.6
(1,67)	1:A:42:THR:H	1:A:43:GLY:H	11	0.6
(1,63)	1:A:43:GLY:H	1:A:42:THR:H	11	0.6
(1,62)	1:A:40:THR:H	1:A:39:VAL:H	19	0.6
(1,61)	1:A:39:VAL:H	1:A:40:THR:H	19	0.6
(1,58)	1:A:38:PHE:H	1:A:37:THR:H	5	0.6
(1,58)	1:A:38:PHE:H	1:A:37:THR:H	17	0.6
(1,57)	1:A:37:THR:H	1:A:38:PHE:H	5	0.6
(1,57)	1:A:37:THR:H	1:A:38:PHE:H	17	0.6
(1,53)	1:A:36:PHE:H	1:A:35:VAL:H	1	0.6
(1,53)	1:A:36:PHE:H	1:A:35:VAL:H	4	0.6
(1,53)	1:A:36:PHE:H	1:A:35:VAL:H	11	0.6
(1,53)	1:A:36:PHE:H	1:A:35:VAL:H	17	0.6
(1,52)	1:A:35:VAL:H	1:A:36:PHE:H	1	0.6
(1,52)	1:A:35:VAL:H	1:A:36:PHE:H	4	0.6
(1,52)	1:A:35:VAL:H	1:A:36:PHE:H	11	0.6
(1,52)	1:A:35:VAL:H	1:A:36:PHE:H	17	0.6
(1,50)	1:A:34:GLY:H	1:A:33:LYS:H	11	0.6
(1,50)	1:A:34:GLY:H	1:A:33:LYS:H	18	0.6
(1,50)	1:A:34:GLY:H	1:A:33:LYS:H	20	0.6
(1,48)	1:A:33:LYS:H	1:A:34:GLY:H	11	0.6
(1,48)	1:A:33:LYS:H	1:A:34:GLY:H	18	0.6

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,48)	1:A:33:LYS:H	1:A:34:GLY:H	20	0.6
(1,46)	1:A:31:PHE:H	1:A:32:MET:H	3	0.6
(1,44)	1:A:32:MET:H	1:A:31:PHE:H	3	0.6
(1,42)	1:A:29:HIS:H	1:A:28:SER:H	4	0.6
(1,41)	1:A:28:SER:H	1:A:29:HIS:H	4	0.6
(1,40)	1:A:27:GLN:H	1:A:28:SER:H	6	0.6
(1,39)	1:A:28:SER:H	1:A:27:GLN:H	6	0.6
(1,36)	1:A:25:ALA:H	1:A:26:CYS:H	2	0.6
(1,36)	1:A:25:ALA:H	1:A:26:CYS:H	4	0.6
(1,34)	1:A:24:ALA:H	1:A:23:TYR:H	9	0.6
(1,32)	1:A:23:TYR:H	1:A:24:ALA:H	9	0.6
(1,31)	1:A:23:TYR:H	1:A:22:GLU:H	18	0.6
(1,30)	1:A:22:GLU:H	1:A:23:TYR:H	18	0.6
(1,25)	1:A:14:ALA:H	1:A:15:ALA:H	6	0.6
(1,25)	1:A:14:ALA:H	1:A:15:ALA:H	10	0.6
(1,17)	1:A:15:ALA:H	1:A:16:LYS:H	7	0.6
(1,16)	1:A:15:ALA:H	1:A:14:ALA:H	6	0.6
(1,16)	1:A:15:ALA:H	1:A:14:ALA:H	10	0.6
(1,132)	1:A:91:LEU:H	1:A:90:TRP:H	18	0.6
(1,129)	1:A:90:TRP:H	1:A:91:LEU:H	18	0.6
(1,128)	1:A:90:TRP:H	1:A:89:LEU:H	15	0.6
(1,128)	1:A:90:TRP:H	1:A:89:LEU:H	18	0.6
(1,127)	1:A:89:LEU:H	1:A:90:TRP:H	15	0.6
(1,127)	1:A:89:LEU:H	1:A:90:TRP:H	18	0.6
(1,125)	1:A:88:ASN:H	1:A:87:ASN:H	1	0.6
(1,125)	1:A:88:ASN:H	1:A:87:ASN:H	3	0.6
(1,123)	1:A:87:ASN:H	1:A:88:ASN:H	1	0.6
(1,123)	1:A:87:ASN:H	1:A:88:ASN:H	3	0.6
(1,122)	1:A:87:ASN:H	1:A:86:CYS:H	5	0.6
(1,122)	1:A:87:ASN:H	1:A:86:CYS:H	7	0.6
(1,121)	1:A:86:CYS:H	1:A:87:ASN:H	5	0.6
(1,121)	1:A:86:CYS:H	1:A:87:ASN:H	7	0.6
(1,120)	1:A:86:CYS:H	1:A:85:LYS:H	4	0.6
(1,119)	1:A:84:GLU:H	1:A:85:LYS:H	10	0.6
(1,118)	1:A:85:LYS:H	1:A:86:CYS:H	4	0.6
(1,117)	1:A:84:GLU:H	1:A:83:SER:H	16	0.6
(1,116)	1:A:82:GLU:H	1:A:81:VAL:H	20	0.6
(1,115)	1:A:82:GLU:H	1:A:83:SER:H	5	0.6
(1,115)	1:A:82:GLU:H	1:A:83:SER:H	17	0.6
(1,114)	1:A:83:SER:H	1:A:82:GLU:H	5	0.6
(1,114)	1:A:83:SER:H	1:A:82:GLU:H	17	0.6
(1,113)	1:A:81:VAL:H	1:A:82:GLU:H	20	0.6

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,110)	1:A:79:THR:H	1:A:78:VAL:H	1	0.6
(1,109)	1:A:78:VAL:H	1:A:79:THR:H	1	0.6
(1,106)	1:A:78:VAL:H	1:A:79:THR:H	1	0.6
(1,103)	1:A:71:GLY:H	1:A:72:SER:H	6	0.6
(1,103)	1:A:71:GLY:H	1:A:72:SER:H	7	0.6
(1,103)	1:A:71:GLY:H	1:A:72:SER:H	16	0.6
(1,102)	1:A:71:GLY:H	1:A:70:ALA:H	4	0.6
(1,10)	1:A:11:ASP:H	1:A:10:ASP:H	1	0.6
(1,10)	1:A:11:ASP:H	1:A:10:ASP:H	3	0.6
(1,10)	1:A:11:ASP:H	1:A:10:ASP:H	17	0.6
(4,60)	1:A:49:GLN:CB	1:A:33:LYS:H	1	0.59
(4,199)	1:A:86:CYS:CB	1:A:24:ALA:H	5	0.59
(1,93)	1:A:66:VAL:H	1:A:65:LEU:H	2	0.59
(1,93)	1:A:66:VAL:H	1:A:65:LEU:H	3	0.59
(1,93)	1:A:66:VAL:H	1:A:65:LEU:H	5	0.59
(1,93)	1:A:66:VAL:H	1:A:65:LEU:H	8	0.59
(1,93)	1:A:66:VAL:H	1:A:65:LEU:H	15	0.59
(1,92)	1:A:65:LEU:H	1:A:66:VAL:H	2	0.59
(1,92)	1:A:65:LEU:H	1:A:66:VAL:H	3	0.59
(1,92)	1:A:65:LEU:H	1:A:66:VAL:H	5	0.59
(1,92)	1:A:65:LEU:H	1:A:66:VAL:H	8	0.59
(1,92)	1:A:65:LEU:H	1:A:66:VAL:H	15	0.59
(1,9)	1:A:9:VAL:H	1:A:10:ASP:H	14	0.59
(1,89)	1:A:64:LEU:H	1:A:63:SER:H	7	0.59
(1,88)	1:A:63:SER:H	1:A:64:LEU:H	7	0.59
(1,87)	1:A:63:SER:H	1:A:62:TRP:H	3	0.59
(1,87)	1:A:63:SER:H	1:A:62:TRP:H	6	0.59
(1,87)	1:A:63:SER:H	1:A:62:TRP:H	15	0.59
(1,86)	1:A:62:TRP:H	1:A:63:SER:H	3	0.59
(1,86)	1:A:62:TRP:H	1:A:63:SER:H	6	0.59
(1,86)	1:A:62:TRP:H	1:A:63:SER:H	15	0.59
(1,85)	1:A:56:PHE:H	1:A:55:LYS:H	5	0.59
(1,84)	1:A:55:LYS:H	1:A:56:PHE:H	5	0.59
(1,75)	1:A:50:MET:H	1:A:49:GLN:H	18	0.59
(1,75)	1:A:50:MET:H	1:A:49:GLN:H	19	0.59
(1,74)	1:A:49:GLN:H	1:A:50:MET:H	18	0.59
(1,74)	1:A:49:GLN:H	1:A:50:MET:H	19	0.59
(1,62)	1:A:40:THR:H	1:A:39:VAL:H	5	0.59
(1,62)	1:A:40:THR:H	1:A:39:VAL:H	14	0.59
(1,61)	1:A:39:VAL:H	1:A:40:THR:H	5	0.59
(1,61)	1:A:39:VAL:H	1:A:40:THR:H	14	0.59
(1,6)	1:A:8:ARG:H	1:A:7:SER:H	20	0.59

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,58)	1:A:38:PHE:H	1:A:37:THR:H	2	0.59
(1,58)	1:A:38:PHE:H	1:A:37:THR:H	11	0.59
(1,58)	1:A:38:PHE:H	1:A:37:THR:H	16	0.59
(1,58)	1:A:38:PHE:H	1:A:37:THR:H	18	0.59
(1,57)	1:A:37:THR:H	1:A:38:PHE:H	2	0.59
(1,57)	1:A:37:THR:H	1:A:38:PHE:H	11	0.59
(1,57)	1:A:37:THR:H	1:A:38:PHE:H	16	0.59
(1,57)	1:A:37:THR:H	1:A:38:PHE:H	18	0.59
(1,50)	1:A:34:GLY:H	1:A:33:LYS:H	3	0.59
(1,49)	1:A:33:LYS:H	1:A:32:MET:H	3	0.59
(1,48)	1:A:33:LYS:H	1:A:34:GLY:H	3	0.59
(1,47)	1:A:32:MET:H	1:A:33:LYS:H	3	0.59
(1,46)	1:A:31:PHE:H	1:A:32:MET:H	6	0.59
(1,44)	1:A:32:MET:H	1:A:31:PHE:H	6	0.59
(1,42)	1:A:29:HIS:H	1:A:28:SER:H	1	0.59
(1,41)	1:A:28:SER:H	1:A:29:HIS:H	1	0.59
(1,40)	1:A:27:GLN:H	1:A:28:SER:H	14	0.59
(1,4)	1:A:7:SER:H	1:A:8:ARG:H	20	0.59
(1,39)	1:A:28:SER:H	1:A:27:GLN:H	14	0.59
(1,34)	1:A:24:ALA:H	1:A:23:TYR:H	6	0.59
(1,34)	1:A:24:ALA:H	1:A:23:TYR:H	19	0.59
(1,32)	1:A:23:TYR:H	1:A:24:ALA:H	6	0.59
(1,32)	1:A:23:TYR:H	1:A:24:ALA:H	19	0.59
(1,150)	1:A:36:PHE:H	1:A:34:GLY:H	8	0.59
(1,15)	1:A:13:VAL:H	1:A:14:ALA:H	7	0.59
(1,15)	1:A:13:VAL:H	1:A:14:ALA:H	16	0.59
(1,15)	1:A:13:VAL:H	1:A:14:ALA:H	17	0.59
(1,14)	1:A:14:ALA:H	1:A:13:VAL:H	7	0.59
(1,14)	1:A:14:ALA:H	1:A:13:VAL:H	16	0.59
(1,14)	1:A:14:ALA:H	1:A:13:VAL:H	17	0.59
(1,138)	1:A:95:THR:H	1:A:94:GLU:H	6	0.59
(1,137)	1:A:94:GLU:H	1:A:95:THR:H	6	0.59
(1,132)	1:A:91:LEU:H	1:A:90:TRP:H	2	0.59
(1,131)	1:A:92:PHE:H	1:A:91:LEU:H	1	0.59
(1,131)	1:A:92:PHE:H	1:A:91:LEU:H	16	0.59
(1,130)	1:A:91:LEU:H	1:A:92:PHE:H	1	0.59
(1,130)	1:A:91:LEU:H	1:A:92:PHE:H	16	0.59
(1,129)	1:A:90:TRP:H	1:A:91:LEU:H	2	0.59
(1,125)	1:A:88:ASN:H	1:A:87:ASN:H	14	0.59
(1,123)	1:A:87:ASN:H	1:A:88:ASN:H	14	0.59
(1,120)	1:A:86:CYS:H	1:A:85:LYS:H	5	0.59
(1,120)	1:A:86:CYS:H	1:A:85:LYS:H	15	0.59

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,118)	1:A:85:LYS:H	1:A:86:CYS:H	5	0.59
(1,118)	1:A:85:LYS:H	1:A:86:CYS:H	15	0.59
(1,116)	1:A:82:GLU:H	1:A:81:VAL:H	18	0.59
(1,115)	1:A:82:GLU:H	1:A:83:SER:H	3	0.59
(1,115)	1:A:82:GLU:H	1:A:83:SER:H	6	0.59
(1,115)	1:A:82:GLU:H	1:A:83:SER:H	8	0.59
(1,115)	1:A:82:GLU:H	1:A:83:SER:H	15	0.59
(1,114)	1:A:83:SER:H	1:A:82:GLU:H	3	0.59
(1,114)	1:A:83:SER:H	1:A:82:GLU:H	6	0.59
(1,114)	1:A:83:SER:H	1:A:82:GLU:H	8	0.59
(1,114)	1:A:83:SER:H	1:A:82:GLU:H	15	0.59
(1,113)	1:A:81:VAL:H	1:A:82:GLU:H	18	0.59
(1,112)	1:A:80:ARG:H	1:A:81:VAL:H	3	0.59
(1,112)	1:A:80:ARG:H	1:A:81:VAL:H	6	0.59
(1,112)	1:A:80:ARG:H	1:A:81:VAL:H	11	0.59
(1,103)	1:A:71:GLY:H	1:A:72:SER:H	11	0.59
(1,103)	1:A:71:GLY:H	1:A:72:SER:H	12	0.59
(1,103)	1:A:71:GLY:H	1:A:72:SER:H	13	0.59
(1,103)	1:A:71:GLY:H	1:A:72:SER:H	17	0.59
(1,10)	1:A:11:ASP:H	1:A:10:ASP:H	10	0.59
(1,10)	1:A:11:ASP:H	1:A:10:ASP:H	13	0.59
(1,93)	1:A:66:VAL:H	1:A:65:LEU:H	7	0.58
(1,93)	1:A:66:VAL:H	1:A:65:LEU:H	18	0.58
(1,92)	1:A:65:LEU:H	1:A:66:VAL:H	7	0.58
(1,92)	1:A:65:LEU:H	1:A:66:VAL:H	18	0.58
(1,89)	1:A:64:LEU:H	1:A:63:SER:H	4	0.58
(1,88)	1:A:63:SER:H	1:A:64:LEU:H	4	0.58
(1,75)	1:A:50:MET:H	1:A:49:GLN:H	7	0.58
(1,74)	1:A:49:GLN:H	1:A:50:MET:H	7	0.58
(1,6)	1:A:8:ARG:H	1:A:7:SER:H	14	0.58
(1,58)	1:A:38:PHE:H	1:A:37:THR:H	8	0.58
(1,57)	1:A:37:THR:H	1:A:38:PHE:H	8	0.58
(1,53)	1:A:36:PHE:H	1:A:35:VAL:H	10	0.58
(1,52)	1:A:35:VAL:H	1:A:36:PHE:H	10	0.58
(1,50)	1:A:34:GLY:H	1:A:33:LYS:H	2	0.58
(1,50)	1:A:34:GLY:H	1:A:33:LYS:H	8	0.58
(1,50)	1:A:34:GLY:H	1:A:33:LYS:H	15	0.58
(1,48)	1:A:33:LYS:H	1:A:34:GLY:H	2	0.58
(1,48)	1:A:33:LYS:H	1:A:34:GLY:H	8	0.58
(1,48)	1:A:33:LYS:H	1:A:34:GLY:H	15	0.58
(1,46)	1:A:31:PHE:H	1:A:32:MET:H	17	0.58
(1,44)	1:A:32:MET:H	1:A:31:PHE:H	17	0.58

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,42)	1:A:29:HIS:H	1:A:28:SER:H	3	0.58
(1,41)	1:A:28:SER:H	1:A:29:HIS:H	3	0.58
(1,4)	1:A:7:SER:H	1:A:8:ARG:H	14	0.58
(1,38)	1:A:26:CYS:H	1:A:27:GLN:H	9	0.58
(1,38)	1:A:26:CYS:H	1:A:27:GLN:H	14	0.58
(1,37)	1:A:27:GLN:H	1:A:26:CYS:H	9	0.58
(1,37)	1:A:27:GLN:H	1:A:26:CYS:H	14	0.58
(1,35)	1:A:25:ALA:H	1:A:24:ALA:H	17	0.58
(1,34)	1:A:24:ALA:H	1:A:23:TYR:H	20	0.58
(1,33)	1:A:24:ALA:H	1:A:25:ALA:H	17	0.58
(1,32)	1:A:23:TYR:H	1:A:24:ALA:H	20	0.58
(1,21)	1:A:20:LEU:H	1:A:19:GLY:H	20	0.58
(1,20)	1:A:19:GLY:H	1:A:20:LEU:H	20	0.58
(1,2)	1:A:5:GLY:H	1:A:4:LEU:H	6	0.58
(1,17)	1:A:15:ALA:H	1:A:16:LYS:H	8	0.58
(1,15)	1:A:13:VAL:H	1:A:14:ALA:H	9	0.58
(1,15)	1:A:13:VAL:H	1:A:14:ALA:H	10	0.58
(1,14)	1:A:14:ALA:H	1:A:13:VAL:H	9	0.58
(1,14)	1:A:14:ALA:H	1:A:13:VAL:H	10	0.58
(1,136)	1:A:94:GLU:H	1:A:93:LEU:H	4	0.58
(1,135)	1:A:93:LEU:H	1:A:94:GLU:H	4	0.58
(1,132)	1:A:91:LEU:H	1:A:90:TRP:H	1	0.58
(1,129)	1:A:90:TRP:H	1:A:91:LEU:H	1	0.58
(1,126)	1:A:89:LEU:H	1:A:88:ASN:H	17	0.58
(1,124)	1:A:88:ASN:H	1:A:89:LEU:H	17	0.58
(1,122)	1:A:87:ASN:H	1:A:86:CYS:H	3	0.58
(1,122)	1:A:87:ASN:H	1:A:86:CYS:H	15	0.58
(1,122)	1:A:87:ASN:H	1:A:86:CYS:H	19	0.58
(1,121)	1:A:86:CYS:H	1:A:87:ASN:H	3	0.58
(1,121)	1:A:86:CYS:H	1:A:87:ASN:H	15	0.58
(1,121)	1:A:86:CYS:H	1:A:87:ASN:H	19	0.58
(1,120)	1:A:86:CYS:H	1:A:85:LYS:H	13	0.58
(1,120)	1:A:86:CYS:H	1:A:85:LYS:H	16	0.58
(1,118)	1:A:85:LYS:H	1:A:86:CYS:H	13	0.58
(1,118)	1:A:85:LYS:H	1:A:86:CYS:H	16	0.58
(1,117)	1:A:84:GLU:H	1:A:83:SER:H	8	0.58
(1,115)	1:A:82:GLU:H	1:A:83:SER:H	13	0.58
(1,114)	1:A:83:SER:H	1:A:82:GLU:H	13	0.58
(1,112)	1:A:80:ARG:H	1:A:81:VAL:H	8	0.58
(1,110)	1:A:79:THR:H	1:A:78:VAL:H	2	0.58
(1,110)	1:A:79:THR:H	1:A:78:VAL:H	11	0.58
(1,109)	1:A:78:VAL:H	1:A:79:THR:H	2	0.58

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,109)	1:A:78:VAL:H	1:A:79:THR:H	11	0.58
(1,106)	1:A:78:VAL:H	1:A:79:THR:H	2	0.58
(1,106)	1:A:78:VAL:H	1:A:79:THR:H	11	0.58
(1,103)	1:A:71:GLY:H	1:A:72:SER:H	1	0.58
(1,103)	1:A:71:GLY:H	1:A:72:SER:H	4	0.58
(1,10)	1:A:11:ASP:H	1:A:10:ASP:H	18	0.58
(1,10)	1:A:11:ASP:H	1:A:10:ASP:H	19	0.58
(1,1)	1:A:4:LEU:H	1:A:5:GLY:H	6	0.58
(4,40)	1:A:26:CYS:CB	1:A:103:SER:H	18	0.57
(1,99)	1:A:69:VAL:H	1:A:68:VAL:H	16	0.57
(1,96)	1:A:68:VAL:H	1:A:69:VAL:H	16	0.57
(1,93)	1:A:66:VAL:H	1:A:65:LEU:H	1	0.57
(1,93)	1:A:66:VAL:H	1:A:65:LEU:H	17	0.57
(1,93)	1:A:66:VAL:H	1:A:65:LEU:H	20	0.57
(1,92)	1:A:65:LEU:H	1:A:66:VAL:H	1	0.57
(1,92)	1:A:65:LEU:H	1:A:66:VAL:H	17	0.57
(1,92)	1:A:65:LEU:H	1:A:66:VAL:H	20	0.57
(1,91)	1:A:65:LEU:H	1:A:64:LEU:H	17	0.57
(1,90)	1:A:64:LEU:H	1:A:65:LEU:H	17	0.57
(1,9)	1:A:9:VAL:H	1:A:10:ASP:H	7	0.57
(1,9)	1:A:9:VAL:H	1:A:10:ASP:H	9	0.57
(1,9)	1:A:9:VAL:H	1:A:10:ASP:H	18	0.57
(1,9)	1:A:9:VAL:H	1:A:10:ASP:H	19	0.57
(1,89)	1:A:64:LEU:H	1:A:63:SER:H	18	0.57
(1,88)	1:A:63:SER:H	1:A:64:LEU:H	18	0.57
(1,85)	1:A:56:PHE:H	1:A:55:LYS:H	6	0.57
(1,85)	1:A:56:PHE:H	1:A:55:LYS:H	14	0.57
(1,84)	1:A:55:LYS:H	1:A:56:PHE:H	6	0.57
(1,84)	1:A:55:LYS:H	1:A:56:PHE:H	14	0.57
(1,81)	1:A:54:ARG:H	1:A:53:GLN:H	8	0.57
(1,80)	1:A:53:GLN:H	1:A:54:ARG:H	8	0.57
(1,78)	1:A:52:ILE:H	1:A:53:GLN:H	14	0.57
(1,77)	1:A:53:GLN:H	1:A:52:ILE:H	14	0.57
(1,75)	1:A:50:MET:H	1:A:49:GLN:H	4	0.57
(1,74)	1:A:49:GLN:H	1:A:50:MET:H	4	0.57
(1,62)	1:A:40:THR:H	1:A:39:VAL:H	11	0.57
(1,61)	1:A:39:VAL:H	1:A:40:THR:H	11	0.57
(1,60)	1:A:38:PHE:H	1:A:39:VAL:H	3	0.57
(1,6)	1:A:8:ARG:H	1:A:7:SER:H	2	0.57
(1,59)	1:A:39:VAL:H	1:A:38:PHE:H	3	0.57
(1,58)	1:A:38:PHE:H	1:A:37:THR:H	4	0.57
(1,57)	1:A:37:THR:H	1:A:38:PHE:H	4	0.57

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,42)	1:A:29:HIS:H	1:A:28:SER:H	18	0.57
(1,41)	1:A:28:SER:H	1:A:29:HIS:H	18	0.57
(1,4)	1:A:7:SER:H	1:A:8:ARG:H	2	0.57
(1,38)	1:A:26:CYS:H	1:A:27:GLN:H	2	0.57
(1,37)	1:A:27:GLN:H	1:A:26:CYS:H	2	0.57
(1,36)	1:A:25:ALA:H	1:A:26:CYS:H	19	0.57
(1,35)	1:A:25:ALA:H	1:A:24:ALA:H	11	0.57
(1,33)	1:A:24:ALA:H	1:A:25:ALA:H	11	0.57
(1,27)	1:A:21:GLY:H	1:A:20:LEU:H	11	0.57
(1,26)	1:A:20:LEU:H	1:A:21:GLY:H	11	0.57
(1,23)	1:A:21:GLY:H	1:A:20:LEU:H	11	0.57
(1,22)	1:A:20:LEU:H	1:A:21:GLY:H	11	0.57
(1,17)	1:A:15:ALA:H	1:A:16:LYS:H	5	0.57
(1,17)	1:A:15:ALA:H	1:A:16:LYS:H	15	0.57
(1,122)	1:A:87:ASN:H	1:A:86:CYS:H	10	0.57
(1,121)	1:A:86:CYS:H	1:A:87:ASN:H	10	0.57
(1,117)	1:A:84:GLU:H	1:A:83:SER:H	2	0.57
(1,117)	1:A:84:GLU:H	1:A:83:SER:H	7	0.57
(1,116)	1:A:82:GLU:H	1:A:81:VAL:H	5	0.57
(1,116)	1:A:82:GLU:H	1:A:81:VAL:H	15	0.57
(1,116)	1:A:82:GLU:H	1:A:81:VAL:H	19	0.57
(1,113)	1:A:81:VAL:H	1:A:82:GLU:H	5	0.57
(1,113)	1:A:81:VAL:H	1:A:82:GLU:H	15	0.57
(1,113)	1:A:81:VAL:H	1:A:82:GLU:H	19	0.57
(1,112)	1:A:80:ARG:H	1:A:81:VAL:H	7	0.57
(1,112)	1:A:80:ARG:H	1:A:81:VAL:H	9	0.57
(1,112)	1:A:80:ARG:H	1:A:81:VAL:H	15	0.57
(1,111)	1:A:80:ARG:H	1:A:79:THR:H	19	0.57
(1,104)	1:A:80:ARG:H	1:A:79:THR:H	19	0.57
(1,103)	1:A:71:GLY:H	1:A:72:SER:H	2	0.57
(1,103)	1:A:71:GLY:H	1:A:72:SER:H	3	0.57
(1,103)	1:A:71:GLY:H	1:A:72:SER:H	19	0.57
(1,10)	1:A:11:ASP:H	1:A:10:ASP:H	5	0.57
(4,60)	1:A:49:GLN:CB	1:A:33:LYS:H	11	0.56
(4,203)	1:A:86:CYS:CB	1:A:31:PHE:H	16	0.56
(1,99)	1:A:69:VAL:H	1:A:68:VAL:H	4	0.56
(1,96)	1:A:68:VAL:H	1:A:69:VAL:H	4	0.56
(1,91)	1:A:65:LEU:H	1:A:64:LEU:H	6	0.56
(1,90)	1:A:64:LEU:H	1:A:65:LEU:H	6	0.56
(1,89)	1:A:64:LEU:H	1:A:63:SER:H	20	0.56
(1,88)	1:A:63:SER:H	1:A:64:LEU:H	20	0.56
(1,85)	1:A:56:PHE:H	1:A:55:LYS:H	1	0.56

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,85)	1:A:56:PHE:H	1:A:55:LYS:H	3	0.56
(1,85)	1:A:56:PHE:H	1:A:55:LYS:H	17	0.56
(1,85)	1:A:56:PHE:H	1:A:55:LYS:H	19	0.56
(1,84)	1:A:55:LYS:H	1:A:56:PHE:H	1	0.56
(1,84)	1:A:55:LYS:H	1:A:56:PHE:H	3	0.56
(1,84)	1:A:55:LYS:H	1:A:56:PHE:H	17	0.56
(1,84)	1:A:55:LYS:H	1:A:56:PHE:H	19	0.56
(1,81)	1:A:54:ARG:H	1:A:53:GLN:H	17	0.56
(1,80)	1:A:53:GLN:H	1:A:54:ARG:H	17	0.56
(1,8)	1:A:9:VAL:H	1:A:8:ARG:H	19	0.56
(1,78)	1:A:52:ILE:H	1:A:53:GLN:H	15	0.56
(1,77)	1:A:53:GLN:H	1:A:52:ILE:H	15	0.56
(1,7)	1:A:8:ARG:H	1:A:9:VAL:H	19	0.56
(1,58)	1:A:38:PHE:H	1:A:37:THR:H	1	0.56
(1,58)	1:A:38:PHE:H	1:A:37:THR:H	12	0.56
(1,57)	1:A:37:THR:H	1:A:38:PHE:H	1	0.56
(1,57)	1:A:37:THR:H	1:A:38:PHE:H	12	0.56
(1,53)	1:A:36:PHE:H	1:A:35:VAL:H	5	0.56
(1,52)	1:A:35:VAL:H	1:A:36:PHE:H	5	0.56
(1,50)	1:A:34:GLY:H	1:A:33:LYS:H	14	0.56
(1,48)	1:A:33:LYS:H	1:A:34:GLY:H	14	0.56
(1,38)	1:A:26:CYS:H	1:A:27:GLN:H	3	0.56
(1,38)	1:A:26:CYS:H	1:A:27:GLN:H	6	0.56
(1,38)	1:A:26:CYS:H	1:A:27:GLN:H	12	0.56
(1,37)	1:A:27:GLN:H	1:A:26:CYS:H	3	0.56
(1,37)	1:A:27:GLN:H	1:A:26:CYS:H	6	0.56
(1,37)	1:A:27:GLN:H	1:A:26:CYS:H	12	0.56
(1,35)	1:A:25:ALA:H	1:A:24:ALA:H	16	0.56
(1,35)	1:A:25:ALA:H	1:A:24:ALA:H	19	0.56
(1,33)	1:A:24:ALA:H	1:A:25:ALA:H	16	0.56
(1,33)	1:A:24:ALA:H	1:A:25:ALA:H	19	0.56
(1,17)	1:A:15:ALA:H	1:A:16:LYS:H	1	0.56
(1,17)	1:A:15:ALA:H	1:A:16:LYS:H	13	0.56
(1,17)	1:A:15:ALA:H	1:A:16:LYS:H	19	0.56
(1,15)	1:A:13:VAL:H	1:A:14:ALA:H	13	0.56
(1,15)	1:A:13:VAL:H	1:A:14:ALA:H	15	0.56
(1,14)	1:A:14:ALA:H	1:A:13:VAL:H	13	0.56
(1,14)	1:A:14:ALA:H	1:A:13:VAL:H	15	0.56
(1,138)	1:A:95:THR:H	1:A:94:GLU:H	13	0.56
(1,138)	1:A:95:THR:H	1:A:94:GLU:H	17	0.56
(1,137)	1:A:94:GLU:H	1:A:95:THR:H	13	0.56
(1,137)	1:A:94:GLU:H	1:A:95:THR:H	17	0.56

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,128)	1:A:90:TRP:H	1:A:89:LEU:H	3	0.56
(1,127)	1:A:89:LEU:H	1:A:90:TRP:H	3	0.56
(1,126)	1:A:89:LEU:H	1:A:88:ASN:H	20	0.56
(1,124)	1:A:88:ASN:H	1:A:89:LEU:H	20	0.56
(1,122)	1:A:87:ASN:H	1:A:86:CYS:H	9	0.56
(1,121)	1:A:86:CYS:H	1:A:87:ASN:H	9	0.56
(1,120)	1:A:86:CYS:H	1:A:85:LYS:H	17	0.56
(1,118)	1:A:85:LYS:H	1:A:86:CYS:H	17	0.56
(1,112)	1:A:80:ARG:H	1:A:81:VAL:H	17	0.56
(1,112)	1:A:80:ARG:H	1:A:81:VAL:H	19	0.56
(1,110)	1:A:79:THR:H	1:A:78:VAL:H	6	0.56
(1,110)	1:A:79:THR:H	1:A:78:VAL:H	7	0.56
(1,110)	1:A:79:THR:H	1:A:78:VAL:H	9	0.56
(1,110)	1:A:79:THR:H	1:A:78:VAL:H	17	0.56
(1,110)	1:A:79:THR:H	1:A:78:VAL:H	19	0.56
(1,109)	1:A:78:VAL:H	1:A:79:THR:H	6	0.56
(1,109)	1:A:78:VAL:H	1:A:79:THR:H	7	0.56
(1,109)	1:A:78:VAL:H	1:A:79:THR:H	9	0.56
(1,109)	1:A:78:VAL:H	1:A:79:THR:H	17	0.56
(1,109)	1:A:78:VAL:H	1:A:79:THR:H	19	0.56
(1,106)	1:A:78:VAL:H	1:A:79:THR:H	6	0.56
(1,106)	1:A:78:VAL:H	1:A:79:THR:H	7	0.56
(1,106)	1:A:78:VAL:H	1:A:79:THR:H	9	0.56
(1,106)	1:A:78:VAL:H	1:A:79:THR:H	17	0.56
(1,106)	1:A:78:VAL:H	1:A:79:THR:H	19	0.56
(1,103)	1:A:71:GLY:H	1:A:72:SER:H	10	0.56
(1,102)	1:A:71:GLY:H	1:A:70:ALA:H	5	0.56
(1,10)	1:A:11:ASP:H	1:A:10:ASP:H	11	0.56
(1,10)	1:A:11:ASP:H	1:A:10:ASP:H	15	0.56
(4,203)	1:A:86:CYS:CB	1:A:31:PHE:H	6	0.55
(1,99)	1:A:69:VAL:H	1:A:68:VAL:H	2	0.55
(1,99)	1:A:69:VAL:H	1:A:68:VAL:H	5	0.55
(1,99)	1:A:69:VAL:H	1:A:68:VAL:H	11	0.55
(1,99)	1:A:69:VAL:H	1:A:68:VAL:H	13	0.55
(1,99)	1:A:69:VAL:H	1:A:68:VAL:H	19	0.55
(1,96)	1:A:68:VAL:H	1:A:69:VAL:H	2	0.55
(1,96)	1:A:68:VAL:H	1:A:69:VAL:H	5	0.55
(1,96)	1:A:68:VAL:H	1:A:69:VAL:H	11	0.55
(1,96)	1:A:68:VAL:H	1:A:69:VAL:H	13	0.55
(1,96)	1:A:68:VAL:H	1:A:69:VAL:H	19	0.55
(1,93)	1:A:66:VAL:H	1:A:65:LEU:H	4	0.55
(1,93)	1:A:66:VAL:H	1:A:65:LEU:H	9	0.55

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,92)	1:A:65:LEU:H	1:A:66:VAL:H	4	0.55
(1,92)	1:A:65:LEU:H	1:A:66:VAL:H	9	0.55
(1,91)	1:A:65:LEU:H	1:A:64:LEU:H	2	0.55
(1,91)	1:A:65:LEU:H	1:A:64:LEU:H	3	0.55
(1,90)	1:A:64:LEU:H	1:A:65:LEU:H	2	0.55
(1,90)	1:A:64:LEU:H	1:A:65:LEU:H	3	0.55
(1,9)	1:A:9:VAL:H	1:A:10:ASP:H	16	0.55
(1,81)	1:A:54:ARG:H	1:A:53:GLN:H	6	0.55
(1,81)	1:A:54:ARG:H	1:A:53:GLN:H	13	0.55
(1,80)	1:A:53:GLN:H	1:A:54:ARG:H	6	0.55
(1,80)	1:A:53:GLN:H	1:A:54:ARG:H	13	0.55
(1,78)	1:A:52:ILE:H	1:A:53:GLN:H	7	0.55
(1,78)	1:A:52:ILE:H	1:A:53:GLN:H	10	0.55
(1,78)	1:A:52:ILE:H	1:A:53:GLN:H	13	0.55
(1,77)	1:A:53:GLN:H	1:A:52:ILE:H	7	0.55
(1,77)	1:A:53:GLN:H	1:A:52:ILE:H	10	0.55
(1,77)	1:A:53:GLN:H	1:A:52:ILE:H	13	0.55
(1,66)	1:A:44:MET:H	1:A:43:GLY:H	5	0.55
(1,64)	1:A:43:GLY:H	1:A:44:MET:H	5	0.55
(1,62)	1:A:40:THR:H	1:A:39:VAL:H	8	0.55
(1,62)	1:A:40:THR:H	1:A:39:VAL:H	12	0.55
(1,61)	1:A:39:VAL:H	1:A:40:THR:H	8	0.55
(1,61)	1:A:39:VAL:H	1:A:40:THR:H	12	0.55
(1,6)	1:A:8:ARG:H	1:A:7:SER:H	16	0.55
(1,58)	1:A:38:PHE:H	1:A:37:THR:H	3	0.55
(1,58)	1:A:38:PHE:H	1:A:37:THR:H	13	0.55
(1,58)	1:A:38:PHE:H	1:A:37:THR:H	19	0.55
(1,57)	1:A:37:THR:H	1:A:38:PHE:H	3	0.55
(1,57)	1:A:37:THR:H	1:A:38:PHE:H	13	0.55
(1,57)	1:A:37:THR:H	1:A:38:PHE:H	19	0.55
(1,53)	1:A:36:PHE:H	1:A:35:VAL:H	3	0.55
(1,52)	1:A:35:VAL:H	1:A:36:PHE:H	3	0.55
(1,50)	1:A:34:GLY:H	1:A:33:LYS:H	5	0.55
(1,50)	1:A:34:GLY:H	1:A:33:LYS:H	13	0.55
(1,5)	1:A:6:LEU:H	1:A:7:SER:H	1	0.55
(1,5)	1:A:6:LEU:H	1:A:7:SER:H	10	0.55
(1,48)	1:A:33:LYS:H	1:A:34:GLY:H	5	0.55
(1,48)	1:A:33:LYS:H	1:A:34:GLY:H	13	0.55
(1,40)	1:A:27:GLN:H	1:A:28:SER:H	17	0.55
(1,4)	1:A:7:SER:H	1:A:8:ARG:H	16	0.55
(1,39)	1:A:28:SER:H	1:A:27:GLN:H	17	0.55
(1,38)	1:A:26:CYS:H	1:A:27:GLN:H	11	0.55

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,38)	1:A:26:CYS:H	1:A:27:GLN:H	13	0.55
(1,38)	1:A:26:CYS:H	1:A:27:GLN:H	16	0.55
(1,38)	1:A:26:CYS:H	1:A:27:GLN:H	19	0.55
(1,37)	1:A:27:GLN:H	1:A:26:CYS:H	11	0.55
(1,37)	1:A:27:GLN:H	1:A:26:CYS:H	13	0.55
(1,37)	1:A:27:GLN:H	1:A:26:CYS:H	16	0.55
(1,37)	1:A:27:GLN:H	1:A:26:CYS:H	19	0.55
(1,36)	1:A:25:ALA:H	1:A:26:CYS:H	11	0.55
(1,36)	1:A:25:ALA:H	1:A:26:CYS:H	18	0.55
(1,3)	1:A:7:SER:H	1:A:6:LEU:H	1	0.55
(1,3)	1:A:7:SER:H	1:A:6:LEU:H	10	0.55
(1,29)	1:A:22:GLU:H	1:A:21:GLY:H	19	0.55
(1,28)	1:A:21:GLY:H	1:A:22:GLU:H	19	0.55
(1,24)	1:A:21:GLY:H	1:A:22:GLU:H	19	0.55
(1,17)	1:A:15:ALA:H	1:A:16:LYS:H	12	0.55
(1,150)	1:A:36:PHE:H	1:A:34:GLY:H	1	0.55
(1,122)	1:A:87:ASN:H	1:A:86:CYS:H	18	0.55
(1,121)	1:A:86:CYS:H	1:A:87:ASN:H	18	0.55
(1,120)	1:A:86:CYS:H	1:A:85:LYS:H	7	0.55
(1,118)	1:A:85:LYS:H	1:A:86:CYS:H	7	0.55
(1,117)	1:A:84:GLU:H	1:A:83:SER:H	14	0.55
(1,116)	1:A:82:GLU:H	1:A:81:VAL:H	6	0.55
(1,116)	1:A:82:GLU:H	1:A:81:VAL:H	12	0.55
(1,115)	1:A:82:GLU:H	1:A:83:SER:H	4	0.55
(1,115)	1:A:82:GLU:H	1:A:83:SER:H	12	0.55
(1,114)	1:A:83:SER:H	1:A:82:GLU:H	4	0.55
(1,114)	1:A:83:SER:H	1:A:82:GLU:H	12	0.55
(1,113)	1:A:81:VAL:H	1:A:82:GLU:H	6	0.55
(1,113)	1:A:81:VAL:H	1:A:82:GLU:H	12	0.55
(1,112)	1:A:80:ARG:H	1:A:81:VAL:H	1	0.55
(1,112)	1:A:80:ARG:H	1:A:81:VAL:H	14	0.55
(1,110)	1:A:79:THR:H	1:A:78:VAL:H	8	0.55
(1,110)	1:A:79:THR:H	1:A:78:VAL:H	14	0.55
(1,110)	1:A:79:THR:H	1:A:78:VAL:H	15	0.55
(1,109)	1:A:78:VAL:H	1:A:79:THR:H	8	0.55
(1,109)	1:A:78:VAL:H	1:A:79:THR:H	14	0.55
(1,109)	1:A:78:VAL:H	1:A:79:THR:H	15	0.55
(1,106)	1:A:78:VAL:H	1:A:79:THR:H	8	0.55
(1,106)	1:A:78:VAL:H	1:A:79:THR:H	14	0.55
(1,106)	1:A:78:VAL:H	1:A:79:THR:H	15	0.55
(1,103)	1:A:71:GLY:H	1:A:72:SER:H	5	0.55
(1,102)	1:A:71:GLY:H	1:A:70:ALA:H	2	0.55

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,102)	1:A:71:GLY:H	1:A:70:ALA:H	3	0.55
(1,102)	1:A:71:GLY:H	1:A:70:ALA:H	12	0.55
(1,102)	1:A:71:GLY:H	1:A:70:ALA:H	19	0.55
(1,10)	1:A:11:ASP:H	1:A:10:ASP:H	7	0.55
(1,99)	1:A:69:VAL:H	1:A:68:VAL:H	1	0.54
(1,99)	1:A:69:VAL:H	1:A:68:VAL:H	3	0.54
(1,99)	1:A:69:VAL:H	1:A:68:VAL:H	17	0.54
(1,96)	1:A:68:VAL:H	1:A:69:VAL:H	1	0.54
(1,96)	1:A:68:VAL:H	1:A:69:VAL:H	3	0.54
(1,96)	1:A:68:VAL:H	1:A:69:VAL:H	17	0.54
(1,9)	1:A:9:VAL:H	1:A:10:ASP:H	17	0.54
(1,87)	1:A:63:SER:H	1:A:62:TRP:H	5	0.54
(1,86)	1:A:62:TRP:H	1:A:63:SER:H	5	0.54
(1,78)	1:A:52:ILE:H	1:A:53:GLN:H	8	0.54
(1,77)	1:A:53:GLN:H	1:A:52:ILE:H	8	0.54
(1,66)	1:A:44:MET:H	1:A:43:GLY:H	13	0.54
(1,66)	1:A:44:MET:H	1:A:43:GLY:H	20	0.54
(1,64)	1:A:43:GLY:H	1:A:44:MET:H	13	0.54
(1,64)	1:A:43:GLY:H	1:A:44:MET:H	20	0.54
(1,6)	1:A:8:ARG:H	1:A:7:SER:H	15	0.54
(1,4)	1:A:7:SER:H	1:A:8:ARG:H	15	0.54
(1,38)	1:A:26:CYS:H	1:A:27:GLN:H	5	0.54
(1,38)	1:A:26:CYS:H	1:A:27:GLN:H	17	0.54
(1,37)	1:A:27:GLN:H	1:A:26:CYS:H	5	0.54
(1,37)	1:A:27:GLN:H	1:A:26:CYS:H	17	0.54
(1,27)	1:A:21:GLY:H	1:A:20:LEU:H	12	0.54
(1,26)	1:A:20:LEU:H	1:A:21:GLY:H	12	0.54
(1,23)	1:A:21:GLY:H	1:A:20:LEU:H	12	0.54
(1,22)	1:A:20:LEU:H	1:A:21:GLY:H	12	0.54
(1,17)	1:A:15:ALA:H	1:A:16:LYS:H	9	0.54
(1,15)	1:A:13:VAL:H	1:A:14:ALA:H	5	0.54
(1,15)	1:A:13:VAL:H	1:A:14:ALA:H	11	0.54
(1,141)	1:A:95:THR:H	1:A:96:GLY:H	19	0.54
(1,14)	1:A:14:ALA:H	1:A:13:VAL:H	5	0.54
(1,14)	1:A:14:ALA:H	1:A:13:VAL:H	11	0.54
(1,139)	1:A:96:GLY:H	1:A:95:THR:H	19	0.54
(1,120)	1:A:86:CYS:H	1:A:85:LYS:H	9	0.54
(1,120)	1:A:86:CYS:H	1:A:85:LYS:H	11	0.54
(1,118)	1:A:85:LYS:H	1:A:86:CYS:H	9	0.54
(1,118)	1:A:85:LYS:H	1:A:86:CYS:H	11	0.54
(1,116)	1:A:82:GLU:H	1:A:81:VAL:H	13	0.54
(1,113)	1:A:81:VAL:H	1:A:82:GLU:H	13	0.54

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,112)	1:A:80:ARG:H	1:A:81:VAL:H	2	0.54
(1,112)	1:A:80:ARG:H	1:A:81:VAL:H	12	0.54
(1,112)	1:A:80:ARG:H	1:A:81:VAL:H	18	0.54
(1,111)	1:A:80:ARG:H	1:A:79:THR:H	20	0.54
(1,104)	1:A:80:ARG:H	1:A:79:THR:H	20	0.54
(1,102)	1:A:71:GLY:H	1:A:70:ALA:H	13	0.54
(1,10)	1:A:11:ASP:H	1:A:10:ASP:H	9	0.54
(4,5)	1:A:26:CYS:CB	1:A:43:GLY:H	6	0.53
(4,42)	1:A:26:CYS:CB	1:A:105:ASP:H	3	0.53
(4,200)	1:A:86:CYS:CB	1:A:26:CYS:H	8	0.53
(1,99)	1:A:69:VAL:H	1:A:68:VAL:H	7	0.53
(1,99)	1:A:69:VAL:H	1:A:68:VAL:H	8	0.53
(1,99)	1:A:69:VAL:H	1:A:68:VAL:H	9	0.53
(1,99)	1:A:69:VAL:H	1:A:68:VAL:H	14	0.53
(1,99)	1:A:69:VAL:H	1:A:68:VAL:H	15	0.53
(1,99)	1:A:69:VAL:H	1:A:68:VAL:H	18	0.53
(1,99)	1:A:69:VAL:H	1:A:68:VAL:H	20	0.53
(1,96)	1:A:68:VAL:H	1:A:69:VAL:H	7	0.53
(1,96)	1:A:68:VAL:H	1:A:69:VAL:H	8	0.53
(1,96)	1:A:68:VAL:H	1:A:69:VAL:H	9	0.53
(1,96)	1:A:68:VAL:H	1:A:69:VAL:H	14	0.53
(1,96)	1:A:68:VAL:H	1:A:69:VAL:H	15	0.53
(1,96)	1:A:68:VAL:H	1:A:69:VAL:H	18	0.53
(1,96)	1:A:68:VAL:H	1:A:69:VAL:H	20	0.53
(1,91)	1:A:65:LEU:H	1:A:64:LEU:H	4	0.53
(1,90)	1:A:64:LEU:H	1:A:65:LEU:H	4	0.53
(1,9)	1:A:9:VAL:H	1:A:10:ASP:H	10	0.53
(1,89)	1:A:64:LEU:H	1:A:63:SER:H	15	0.53
(1,88)	1:A:63:SER:H	1:A:64:LEU:H	15	0.53
(1,81)	1:A:54:ARG:H	1:A:53:GLN:H	7	0.53
(1,80)	1:A:53:GLN:H	1:A:54:ARG:H	7	0.53
(1,8)	1:A:9:VAL:H	1:A:8:ARG:H	1	0.53
(1,7)	1:A:8:ARG:H	1:A:9:VAL:H	1	0.53
(1,66)	1:A:44:MET:H	1:A:43:GLY:H	4	0.53
(1,66)	1:A:44:MET:H	1:A:43:GLY:H	6	0.53
(1,66)	1:A:44:MET:H	1:A:43:GLY:H	8	0.53
(1,66)	1:A:44:MET:H	1:A:43:GLY:H	10	0.53
(1,66)	1:A:44:MET:H	1:A:43:GLY:H	12	0.53
(1,66)	1:A:44:MET:H	1:A:43:GLY:H	14	0.53
(1,64)	1:A:43:GLY:H	1:A:44:MET:H	4	0.53
(1,64)	1:A:43:GLY:H	1:A:44:MET:H	6	0.53
(1,64)	1:A:43:GLY:H	1:A:44:MET:H	8	0.53

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,64)	1:A:43:GLY:H	1:A:44:MET:H	10	0.53
(1,64)	1:A:43:GLY:H	1:A:44:MET:H	12	0.53
(1,64)	1:A:43:GLY:H	1:A:44:MET:H	14	0.53
(1,42)	1:A:29:HIS:H	1:A:28:SER:H	2	0.53
(1,41)	1:A:28:SER:H	1:A:29:HIS:H	2	0.53
(1,40)	1:A:27:GLN:H	1:A:28:SER:H	2	0.53
(1,40)	1:A:27:GLN:H	1:A:28:SER:H	9	0.53
(1,39)	1:A:28:SER:H	1:A:27:GLN:H	2	0.53
(1,39)	1:A:28:SER:H	1:A:27:GLN:H	9	0.53
(1,38)	1:A:26:CYS:H	1:A:27:GLN:H	1	0.53
(1,38)	1:A:26:CYS:H	1:A:27:GLN:H	4	0.53
(1,38)	1:A:26:CYS:H	1:A:27:GLN:H	20	0.53
(1,37)	1:A:27:GLN:H	1:A:26:CYS:H	1	0.53
(1,37)	1:A:27:GLN:H	1:A:26:CYS:H	4	0.53
(1,37)	1:A:27:GLN:H	1:A:26:CYS:H	20	0.53
(1,17)	1:A:15:ALA:H	1:A:16:LYS:H	3	0.53
(1,17)	1:A:15:ALA:H	1:A:16:LYS:H	20	0.53
(1,150)	1:A:36:PHE:H	1:A:34:GLY:H	16	0.53
(1,138)	1:A:95:THR:H	1:A:94:GLU:H	1	0.53
(1,138)	1:A:95:THR:H	1:A:94:GLU:H	11	0.53
(1,137)	1:A:94:GLU:H	1:A:95:THR:H	1	0.53
(1,137)	1:A:94:GLU:H	1:A:95:THR:H	11	0.53
(1,134)	1:A:93:LEU:H	1:A:92:PHE:H	10	0.53
(1,134)	1:A:93:LEU:H	1:A:92:PHE:H	20	0.53
(1,133)	1:A:92:PHE:H	1:A:93:LEU:H	10	0.53
(1,133)	1:A:92:PHE:H	1:A:93:LEU:H	20	0.53
(1,122)	1:A:87:ASN:H	1:A:86:CYS:H	4	0.53
(1,121)	1:A:86:CYS:H	1:A:87:ASN:H	4	0.53
(1,12)	1:A:11:ASP:H	1:A:12:ALA:H	14	0.53
(1,117)	1:A:84:GLU:H	1:A:83:SER:H	10	0.53
(1,116)	1:A:82:GLU:H	1:A:81:VAL:H	7	0.53
(1,113)	1:A:81:VAL:H	1:A:82:GLU:H	7	0.53
(1,112)	1:A:80:ARG:H	1:A:81:VAL:H	5	0.53
(1,112)	1:A:80:ARG:H	1:A:81:VAL:H	13	0.53
(1,112)	1:A:80:ARG:H	1:A:81:VAL:H	16	0.53
(1,111)	1:A:80:ARG:H	1:A:79:THR:H	4	0.53
(1,111)	1:A:80:ARG:H	1:A:79:THR:H	14	0.53
(1,111)	1:A:80:ARG:H	1:A:79:THR:H	17	0.53
(1,11)	1:A:12:ALA:H	1:A:11:ASP:H	14	0.53
(1,104)	1:A:80:ARG:H	1:A:79:THR:H	4	0.53
(1,104)	1:A:80:ARG:H	1:A:79:THR:H	14	0.53
(1,104)	1:A:80:ARG:H	1:A:79:THR:H	17	0.53

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,102)	1:A:71:GLY:H	1:A:70:ALA:H	1	0.53
(1,102)	1:A:71:GLY:H	1:A:70:ALA:H	7	0.53
(1,102)	1:A:71:GLY:H	1:A:70:ALA:H	11	0.53
(1,102)	1:A:71:GLY:H	1:A:70:ALA:H	16	0.53
(1,102)	1:A:71:GLY:H	1:A:70:ALA:H	17	0.53
(1,10)	1:A:11:ASP:H	1:A:10:ASP:H	20	0.53
(4,204)	1:A:86:CYS:CB	1:A:32:MET:H	2	0.52
(1,89)	1:A:64:LEU:H	1:A:63:SER:H	1	0.52
(1,89)	1:A:64:LEU:H	1:A:63:SER:H	14	0.52
(1,88)	1:A:63:SER:H	1:A:64:LEU:H	1	0.52
(1,88)	1:A:63:SER:H	1:A:64:LEU:H	14	0.52
(1,87)	1:A:63:SER:H	1:A:62:TRP:H	7	0.52
(1,86)	1:A:62:TRP:H	1:A:63:SER:H	7	0.52
(1,78)	1:A:52:ILE:H	1:A:53:GLN:H	11	0.52
(1,78)	1:A:52:ILE:H	1:A:53:GLN:H	20	0.52
(1,77)	1:A:53:GLN:H	1:A:52:ILE:H	11	0.52
(1,77)	1:A:53:GLN:H	1:A:52:ILE:H	20	0.52
(1,66)	1:A:44:MET:H	1:A:43:GLY:H	1	0.52
(1,66)	1:A:44:MET:H	1:A:43:GLY:H	7	0.52
(1,66)	1:A:44:MET:H	1:A:43:GLY:H	11	0.52
(1,66)	1:A:44:MET:H	1:A:43:GLY:H	16	0.52
(1,66)	1:A:44:MET:H	1:A:43:GLY:H	19	0.52
(1,64)	1:A:43:GLY:H	1:A:44:MET:H	1	0.52
(1,64)	1:A:43:GLY:H	1:A:44:MET:H	7	0.52
(1,64)	1:A:43:GLY:H	1:A:44:MET:H	11	0.52
(1,64)	1:A:43:GLY:H	1:A:44:MET:H	16	0.52
(1,64)	1:A:43:GLY:H	1:A:44:MET:H	19	0.52
(1,58)	1:A:38:PHE:H	1:A:37:THR:H	15	0.52
(1,57)	1:A:37:THR:H	1:A:38:PHE:H	15	0.52
(1,46)	1:A:31:PHE:H	1:A:32:MET:H	4	0.52
(1,44)	1:A:32:MET:H	1:A:31:PHE:H	4	0.52
(1,40)	1:A:27:GLN:H	1:A:28:SER:H	3	0.52
(1,39)	1:A:28:SER:H	1:A:27:GLN:H	3	0.52
(1,38)	1:A:26:CYS:H	1:A:27:GLN:H	10	0.52
(1,37)	1:A:27:GLN:H	1:A:26:CYS:H	10	0.52
(1,35)	1:A:25:ALA:H	1:A:24:ALA:H	4	0.52
(1,33)	1:A:24:ALA:H	1:A:25:ALA:H	4	0.52
(1,27)	1:A:21:GLY:H	1:A:20:LEU:H	20	0.52
(1,26)	1:A:20:LEU:H	1:A:21:GLY:H	20	0.52
(1,23)	1:A:21:GLY:H	1:A:20:LEU:H	20	0.52
(1,22)	1:A:20:LEU:H	1:A:21:GLY:H	20	0.52
(1,17)	1:A:15:ALA:H	1:A:16:LYS:H	4	0.52

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,150)	1:A:36:PHE:H	1:A:34:GLY:H	18	0.52
(1,15)	1:A:13:VAL:H	1:A:14:ALA:H	18	0.52
(1,14)	1:A:14:ALA:H	1:A:13:VAL:H	18	0.52
(1,138)	1:A:95:THR:H	1:A:94:GLU:H	2	0.52
(1,137)	1:A:94:GLU:H	1:A:95:THR:H	2	0.52
(1,136)	1:A:94:GLU:H	1:A:93:LEU:H	1	0.52
(1,135)	1:A:93:LEU:H	1:A:94:GLU:H	1	0.52
(1,132)	1:A:91:LEU:H	1:A:90:TRP:H	17	0.52
(1,132)	1:A:91:LEU:H	1:A:90:TRP:H	20	0.52
(1,129)	1:A:90:TRP:H	1:A:91:LEU:H	17	0.52
(1,129)	1:A:90:TRP:H	1:A:91:LEU:H	20	0.52
(1,122)	1:A:87:ASN:H	1:A:86:CYS:H	12	0.52
(1,121)	1:A:86:CYS:H	1:A:87:ASN:H	12	0.52
(1,120)	1:A:86:CYS:H	1:A:85:LYS:H	1	0.52
(1,118)	1:A:85:LYS:H	1:A:86:CYS:H	1	0.52
(1,116)	1:A:82:GLU:H	1:A:81:VAL:H	8	0.52
(1,116)	1:A:82:GLU:H	1:A:81:VAL:H	16	0.52
(1,115)	1:A:82:GLU:H	1:A:83:SER:H	7	0.52
(1,115)	1:A:82:GLU:H	1:A:83:SER:H	11	0.52
(1,114)	1:A:83:SER:H	1:A:82:GLU:H	7	0.52
(1,114)	1:A:83:SER:H	1:A:82:GLU:H	11	0.52
(1,113)	1:A:81:VAL:H	1:A:82:GLU:H	8	0.52
(1,113)	1:A:81:VAL:H	1:A:82:GLU:H	16	0.52
(1,112)	1:A:80:ARG:H	1:A:81:VAL:H	4	0.52
(1,112)	1:A:80:ARG:H	1:A:81:VAL:H	10	0.52
(1,111)	1:A:80:ARG:H	1:A:79:THR:H	9	0.52
(1,110)	1:A:79:THR:H	1:A:78:VAL:H	4	0.52
(1,110)	1:A:79:THR:H	1:A:78:VAL:H	10	0.52
(1,110)	1:A:79:THR:H	1:A:78:VAL:H	18	0.52
(1,109)	1:A:78:VAL:H	1:A:79:THR:H	4	0.52
(1,109)	1:A:78:VAL:H	1:A:79:THR:H	10	0.52
(1,109)	1:A:78:VAL:H	1:A:79:THR:H	18	0.52
(1,106)	1:A:78:VAL:H	1:A:79:THR:H	4	0.52
(1,106)	1:A:78:VAL:H	1:A:79:THR:H	10	0.52
(1,106)	1:A:78:VAL:H	1:A:79:THR:H	18	0.52
(1,104)	1:A:80:ARG:H	1:A:79:THR:H	9	0.52
(1,102)	1:A:71:GLY:H	1:A:70:ALA:H	9	0.52
(1,102)	1:A:71:GLY:H	1:A:70:ALA:H	18	0.52
(4,199)	1:A:86:CYS:CB	1:A:24:ALA:H	16	0.51
(1,99)	1:A:69:VAL:H	1:A:68:VAL:H	6	0.51
(1,99)	1:A:69:VAL:H	1:A:68:VAL:H	12	0.51
(1,96)	1:A:68:VAL:H	1:A:69:VAL:H	6	0.51

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,96)	1:A:68:VAL:H	1:A:69:VAL:H	12	0.51
(1,9)	1:A:9:VAL:H	1:A:10:ASP:H	11	0.51
(1,9)	1:A:9:VAL:H	1:A:10:ASP:H	20	0.51
(1,87)	1:A:63:SER:H	1:A:62:TRP:H	2	0.51
(1,87)	1:A:63:SER:H	1:A:62:TRP:H	4	0.51
(1,86)	1:A:62:TRP:H	1:A:63:SER:H	2	0.51
(1,86)	1:A:62:TRP:H	1:A:63:SER:H	4	0.51
(1,81)	1:A:54:ARG:H	1:A:53:GLN:H	15	0.51
(1,80)	1:A:53:GLN:H	1:A:54:ARG:H	15	0.51
(1,78)	1:A:52:ILE:H	1:A:53:GLN:H	2	0.51
(1,77)	1:A:53:GLN:H	1:A:52:ILE:H	2	0.51
(1,66)	1:A:44:MET:H	1:A:43:GLY:H	15	0.51
(1,66)	1:A:44:MET:H	1:A:43:GLY:H	18	0.51
(1,64)	1:A:43:GLY:H	1:A:44:MET:H	15	0.51
(1,64)	1:A:43:GLY:H	1:A:44:MET:H	18	0.51
(1,60)	1:A:38:PHE:H	1:A:39:VAL:H	9	0.51
(1,60)	1:A:38:PHE:H	1:A:39:VAL:H	11	0.51
(1,59)	1:A:39:VAL:H	1:A:38:PHE:H	9	0.51
(1,59)	1:A:39:VAL:H	1:A:38:PHE:H	11	0.51
(1,53)	1:A:36:PHE:H	1:A:35:VAL:H	13	0.51
(1,52)	1:A:35:VAL:H	1:A:36:PHE:H	13	0.51
(1,5)	1:A:6:LEU:H	1:A:7:SER:H	2	0.51
(1,5)	1:A:6:LEU:H	1:A:7:SER:H	3	0.51
(1,38)	1:A:26:CYS:H	1:A:27:GLN:H	8	0.51
(1,37)	1:A:27:GLN:H	1:A:26:CYS:H	8	0.51
(1,3)	1:A:7:SER:H	1:A:6:LEU:H	2	0.51
(1,3)	1:A:7:SER:H	1:A:6:LEU:H	3	0.51
(1,120)	1:A:86:CYS:H	1:A:85:LYS:H	12	0.51
(1,12)	1:A:11:ASP:H	1:A:12:ALA:H	17	0.51
(1,118)	1:A:85:LYS:H	1:A:86:CYS:H	12	0.51
(1,116)	1:A:82:GLU:H	1:A:81:VAL:H	14	0.51
(1,113)	1:A:81:VAL:H	1:A:82:GLU:H	14	0.51
(1,111)	1:A:80:ARG:H	1:A:79:THR:H	3	0.51
(1,110)	1:A:79:THR:H	1:A:78:VAL:H	13	0.51
(1,11)	1:A:12:ALA:H	1:A:11:ASP:H	17	0.51
(1,109)	1:A:78:VAL:H	1:A:79:THR:H	13	0.51
(1,106)	1:A:78:VAL:H	1:A:79:THR:H	13	0.51
(1,104)	1:A:80:ARG:H	1:A:79:THR:H	3	0.51
(1,102)	1:A:71:GLY:H	1:A:70:ALA:H	15	0.51
(1,102)	1:A:71:GLY:H	1:A:70:ALA:H	20	0.51
(4,60)	1:A:49:GLN:CB	1:A:33:LYS:H	19	0.5
(4,42)	1:A:26:CYS:CB	1:A:105:ASP:H	18	0.5

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,130)	1:A:56:PHE:CB	1:A:41:GLY:H	12	0.5
(1,98)	1:A:68:VAL:H	1:A:67:ALA:H	16	0.5
(1,94)	1:A:67:ALA:H	1:A:68:VAL:H	16	0.5
(1,91)	1:A:65:LEU:H	1:A:64:LEU:H	16	0.5
(1,90)	1:A:64:LEU:H	1:A:65:LEU:H	16	0.5
(1,9)	1:A:9:VAL:H	1:A:10:ASP:H	5	0.5
(1,87)	1:A:63:SER:H	1:A:62:TRP:H	12	0.5
(1,87)	1:A:63:SER:H	1:A:62:TRP:H	14	0.5
(1,86)	1:A:62:TRP:H	1:A:63:SER:H	12	0.5
(1,86)	1:A:62:TRP:H	1:A:63:SER:H	14	0.5
(1,81)	1:A:54:ARG:H	1:A:53:GLN:H	20	0.5
(1,80)	1:A:53:GLN:H	1:A:54:ARG:H	20	0.5
(1,2)	1:A:5:GLY:H	1:A:4:LEU:H	11	0.5
(1,17)	1:A:15:ALA:H	1:A:16:LYS:H	10	0.5
(1,17)	1:A:15:ALA:H	1:A:16:LYS:H	14	0.5
(1,15)	1:A:13:VAL:H	1:A:14:ALA:H	14	0.5
(1,14)	1:A:14:ALA:H	1:A:13:VAL:H	14	0.5
(1,138)	1:A:95:THR:H	1:A:94:GLU:H	16	0.5
(1,137)	1:A:94:GLU:H	1:A:95:THR:H	16	0.5
(1,134)	1:A:93:LEU:H	1:A:92:PHE:H	16	0.5
(1,133)	1:A:92:PHE:H	1:A:93:LEU:H	16	0.5
(1,132)	1:A:91:LEU:H	1:A:90:TRP:H	3	0.5
(1,129)	1:A:90:TRP:H	1:A:91:LEU:H	3	0.5
(1,122)	1:A:87:ASN:H	1:A:86:CYS:H	20	0.5
(1,121)	1:A:86:CYS:H	1:A:87:ASN:H	20	0.5
(1,120)	1:A:86:CYS:H	1:A:85:LYS:H	14	0.5
(1,120)	1:A:86:CYS:H	1:A:85:LYS:H	18	0.5
(1,12)	1:A:11:ASP:H	1:A:12:ALA:H	16	0.5
(1,118)	1:A:85:LYS:H	1:A:86:CYS:H	14	0.5
(1,118)	1:A:85:LYS:H	1:A:86:CYS:H	18	0.5
(1,116)	1:A:82:GLU:H	1:A:81:VAL:H	3	0.5
(1,116)	1:A:82:GLU:H	1:A:81:VAL:H	10	0.5
(1,113)	1:A:81:VAL:H	1:A:82:GLU:H	3	0.5
(1,113)	1:A:81:VAL:H	1:A:82:GLU:H	10	0.5
(1,111)	1:A:80:ARG:H	1:A:79:THR:H	16	0.5
(1,110)	1:A:79:THR:H	1:A:78:VAL:H	5	0.5
(1,110)	1:A:79:THR:H	1:A:78:VAL:H	20	0.5
(1,11)	1:A:12:ALA:H	1:A:11:ASP:H	16	0.5
(1,109)	1:A:78:VAL:H	1:A:79:THR:H	5	0.5
(1,109)	1:A:78:VAL:H	1:A:79:THR:H	20	0.5
(1,106)	1:A:78:VAL:H	1:A:79:THR:H	5	0.5
(1,106)	1:A:78:VAL:H	1:A:79:THR:H	20	0.5

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,104)	1:A:80:ARG:H	1:A:79:THR:H	16	0.5
(1,102)	1:A:71:GLY:H	1:A:70:ALA:H	6	0.5
(1,102)	1:A:71:GLY:H	1:A:70:ALA:H	8	0.5
(1,102)	1:A:71:GLY:H	1:A:70:ALA:H	14	0.5
(1,1)	1:A:4:LEU:H	1:A:5:GLY:H	11	0.5
(1,87)	1:A:63:SER:H	1:A:62:TRP:H	17	0.49
(1,86)	1:A:62:TRP:H	1:A:63:SER:H	17	0.49
(1,81)	1:A:54:ARG:H	1:A:53:GLN:H	11	0.49
(1,81)	1:A:54:ARG:H	1:A:53:GLN:H	12	0.49
(1,80)	1:A:53:GLN:H	1:A:54:ARG:H	11	0.49
(1,80)	1:A:53:GLN:H	1:A:54:ARG:H	12	0.49
(1,35)	1:A:25:ALA:H	1:A:24:ALA:H	18	0.49
(1,33)	1:A:24:ALA:H	1:A:25:ALA:H	18	0.49
(1,17)	1:A:15:ALA:H	1:A:16:LYS:H	11	0.49
(1,15)	1:A:13:VAL:H	1:A:14:ALA:H	2	0.49
(1,142)	1:A:97:GLN:H	1:A:96:GLY:H	15	0.49
(1,142)	1:A:97:GLN:H	1:A:96:GLY:H	19	0.49
(1,140)	1:A:96:GLY:H	1:A:97:GLN:H	15	0.49
(1,140)	1:A:96:GLY:H	1:A:97:GLN:H	19	0.49
(1,14)	1:A:14:ALA:H	1:A:13:VAL:H	2	0.49
(1,136)	1:A:94:GLU:H	1:A:93:LEU:H	6	0.49
(1,136)	1:A:94:GLU:H	1:A:93:LEU:H	13	0.49
(1,135)	1:A:93:LEU:H	1:A:94:GLU:H	6	0.49
(1,135)	1:A:93:LEU:H	1:A:94:GLU:H	13	0.49
(1,122)	1:A:87:ASN:H	1:A:86:CYS:H	17	0.49
(1,121)	1:A:86:CYS:H	1:A:87:ASN:H	17	0.49
(1,12)	1:A:11:ASP:H	1:A:12:ALA:H	7	0.49
(1,115)	1:A:82:GLU:H	1:A:83:SER:H	2	0.49
(1,115)	1:A:82:GLU:H	1:A:83:SER:H	14	0.49
(1,114)	1:A:83:SER:H	1:A:82:GLU:H	2	0.49
(1,114)	1:A:83:SER:H	1:A:82:GLU:H	14	0.49
(1,112)	1:A:80:ARG:H	1:A:81:VAL:H	20	0.49
(1,111)	1:A:80:ARG:H	1:A:79:THR:H	1	0.49
(1,111)	1:A:80:ARG:H	1:A:79:THR:H	10	0.49
(1,111)	1:A:80:ARG:H	1:A:79:THR:H	12	0.49
(1,111)	1:A:80:ARG:H	1:A:79:THR:H	13	0.49
(1,11)	1:A:12:ALA:H	1:A:11:ASP:H	7	0.49
(1,104)	1:A:80:ARG:H	1:A:79:THR:H	1	0.49
(1,104)	1:A:80:ARG:H	1:A:79:THR:H	10	0.49
(1,104)	1:A:80:ARG:H	1:A:79:THR:H	12	0.49
(1,104)	1:A:80:ARG:H	1:A:79:THR:H	13	0.49
(1,10)	1:A:11:ASP:H	1:A:10:ASP:H	2	0.49

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,98)	1:A:68:VAL:H	1:A:67:ALA:H	6	0.48
(1,97)	1:A:66:VAL:H	1:A:67:ALA:H	4	0.48
(1,97)	1:A:66:VAL:H	1:A:67:ALA:H	6	0.48
(1,97)	1:A:66:VAL:H	1:A:67:ALA:H	10	0.48
(1,97)	1:A:66:VAL:H	1:A:67:ALA:H	13	0.48
(1,97)	1:A:66:VAL:H	1:A:67:ALA:H	19	0.48
(1,95)	1:A:67:ALA:H	1:A:66:VAL:H	4	0.48
(1,95)	1:A:67:ALA:H	1:A:66:VAL:H	6	0.48
(1,95)	1:A:67:ALA:H	1:A:66:VAL:H	10	0.48
(1,95)	1:A:67:ALA:H	1:A:66:VAL:H	13	0.48
(1,95)	1:A:67:ALA:H	1:A:66:VAL:H	19	0.48
(1,94)	1:A:67:ALA:H	1:A:68:VAL:H	6	0.48
(1,9)	1:A:9:VAL:H	1:A:10:ASP:H	15	0.48
(1,87)	1:A:63:SER:H	1:A:62:TRP:H	9	0.48
(1,86)	1:A:62:TRP:H	1:A:63:SER:H	9	0.48
(1,81)	1:A:54:ARG:H	1:A:53:GLN:H	1	0.48
(1,80)	1:A:53:GLN:H	1:A:54:ARG:H	1	0.48
(1,62)	1:A:40:THR:H	1:A:39:VAL:H	3	0.48
(1,61)	1:A:39:VAL:H	1:A:40:THR:H	3	0.48
(1,38)	1:A:26:CYS:H	1:A:27:GLN:H	15	0.48
(1,38)	1:A:26:CYS:H	1:A:27:GLN:H	18	0.48
(1,37)	1:A:27:GLN:H	1:A:26:CYS:H	15	0.48
(1,37)	1:A:27:GLN:H	1:A:26:CYS:H	18	0.48
(1,27)	1:A:21:GLY:H	1:A:20:LEU:H	13	0.48
(1,26)	1:A:20:LEU:H	1:A:21:GLY:H	13	0.48
(1,23)	1:A:21:GLY:H	1:A:20:LEU:H	13	0.48
(1,22)	1:A:20:LEU:H	1:A:21:GLY:H	13	0.48
(1,21)	1:A:20:LEU:H	1:A:19:GLY:H	19	0.48
(1,20)	1:A:19:GLY:H	1:A:20:LEU:H	19	0.48
(1,2)	1:A:5:GLY:H	1:A:4:LEU:H	19	0.48
(1,17)	1:A:15:ALA:H	1:A:16:LYS:H	18	0.48
(1,134)	1:A:93:LEU:H	1:A:92:PHE:H	2	0.48
(1,134)	1:A:93:LEU:H	1:A:92:PHE:H	9	0.48
(1,133)	1:A:92:PHE:H	1:A:93:LEU:H	2	0.48
(1,133)	1:A:92:PHE:H	1:A:93:LEU:H	9	0.48
(1,12)	1:A:11:ASP:H	1:A:12:ALA:H	5	0.48
(1,12)	1:A:11:ASP:H	1:A:12:ALA:H	13	0.48
(1,117)	1:A:84:GLU:H	1:A:83:SER:H	1	0.48
(1,115)	1:A:82:GLU:H	1:A:83:SER:H	19	0.48
(1,114)	1:A:83:SER:H	1:A:82:GLU:H	19	0.48
(1,111)	1:A:80:ARG:H	1:A:79:THR:H	5	0.48
(1,111)	1:A:80:ARG:H	1:A:79:THR:H	6	0.48

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,111)	1:A:80:ARG:H	1:A:79:THR:H	11	0.48
(1,111)	1:A:80:ARG:H	1:A:79:THR:H	18	0.48
(1,11)	1:A:12:ALA:H	1:A:11:ASP:H	5	0.48
(1,11)	1:A:12:ALA:H	1:A:11:ASP:H	13	0.48
(1,104)	1:A:80:ARG:H	1:A:79:THR:H	5	0.48
(1,104)	1:A:80:ARG:H	1:A:79:THR:H	6	0.48
(1,104)	1:A:80:ARG:H	1:A:79:THR:H	11	0.48
(1,104)	1:A:80:ARG:H	1:A:79:THR:H	18	0.48
(1,1)	1:A:4:LEU:H	1:A:5:GLY:H	19	0.48
(1,97)	1:A:66:VAL:H	1:A:67:ALA:H	1	0.47
(1,97)	1:A:66:VAL:H	1:A:67:ALA:H	2	0.47
(1,97)	1:A:66:VAL:H	1:A:67:ALA:H	3	0.47
(1,97)	1:A:66:VAL:H	1:A:67:ALA:H	5	0.47
(1,97)	1:A:66:VAL:H	1:A:67:ALA:H	7	0.47
(1,97)	1:A:66:VAL:H	1:A:67:ALA:H	9	0.47
(1,97)	1:A:66:VAL:H	1:A:67:ALA:H	11	0.47
(1,97)	1:A:66:VAL:H	1:A:67:ALA:H	12	0.47
(1,97)	1:A:66:VAL:H	1:A:67:ALA:H	15	0.47
(1,97)	1:A:66:VAL:H	1:A:67:ALA:H	17	0.47
(1,97)	1:A:66:VAL:H	1:A:67:ALA:H	18	0.47
(1,97)	1:A:66:VAL:H	1:A:67:ALA:H	20	0.47
(1,95)	1:A:67:ALA:H	1:A:66:VAL:H	1	0.47
(1,95)	1:A:67:ALA:H	1:A:66:VAL:H	2	0.47
(1,95)	1:A:67:ALA:H	1:A:66:VAL:H	3	0.47
(1,95)	1:A:67:ALA:H	1:A:66:VAL:H	5	0.47
(1,95)	1:A:67:ALA:H	1:A:66:VAL:H	7	0.47
(1,95)	1:A:67:ALA:H	1:A:66:VAL:H	9	0.47
(1,95)	1:A:67:ALA:H	1:A:66:VAL:H	11	0.47
(1,95)	1:A:67:ALA:H	1:A:66:VAL:H	12	0.47
(1,95)	1:A:67:ALA:H	1:A:66:VAL:H	15	0.47
(1,95)	1:A:67:ALA:H	1:A:66:VAL:H	17	0.47
(1,95)	1:A:67:ALA:H	1:A:66:VAL:H	18	0.47
(1,95)	1:A:67:ALA:H	1:A:66:VAL:H	20	0.47
(1,91)	1:A:65:LEU:H	1:A:64:LEU:H	8	0.47
(1,91)	1:A:65:LEU:H	1:A:64:LEU:H	11	0.47
(1,90)	1:A:64:LEU:H	1:A:65:LEU:H	8	0.47
(1,90)	1:A:64:LEU:H	1:A:65:LEU:H	11	0.47
(1,87)	1:A:63:SER:H	1:A:62:TRP:H	20	0.47
(1,86)	1:A:62:TRP:H	1:A:63:SER:H	20	0.47
(1,85)	1:A:56:PHE:H	1:A:55:LYS:H	12	0.47
(1,84)	1:A:55:LYS:H	1:A:56:PHE:H	12	0.47
(1,78)	1:A:52:ILE:H	1:A:53:GLN:H	17	0.47

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,78)	1:A:52:ILE:H	1:A:53:GLN:H	18	0.47
(1,77)	1:A:53:GLN:H	1:A:52:ILE:H	17	0.47
(1,77)	1:A:53:GLN:H	1:A:52:ILE:H	18	0.47
(1,5)	1:A:6:LEU:H	1:A:7:SER:H	5	0.47
(1,3)	1:A:7:SER:H	1:A:6:LEU:H	5	0.47
(1,17)	1:A:15:ALA:H	1:A:16:LYS:H	6	0.47
(1,17)	1:A:15:ALA:H	1:A:16:LYS:H	17	0.47
(1,150)	1:A:36:PHE:H	1:A:34:GLY:H	20	0.47
(1,142)	1:A:97:GLN:H	1:A:96:GLY:H	9	0.47
(1,140)	1:A:96:GLY:H	1:A:97:GLN:H	9	0.47
(1,122)	1:A:87:ASN:H	1:A:86:CYS:H	14	0.47
(1,121)	1:A:86:CYS:H	1:A:87:ASN:H	14	0.47
(1,120)	1:A:86:CYS:H	1:A:85:LYS:H	8	0.47
(1,118)	1:A:85:LYS:H	1:A:86:CYS:H	8	0.47
(1,115)	1:A:82:GLU:H	1:A:83:SER:H	1	0.47
(1,115)	1:A:82:GLU:H	1:A:83:SER:H	16	0.47
(1,114)	1:A:83:SER:H	1:A:82:GLU:H	1	0.47
(1,114)	1:A:83:SER:H	1:A:82:GLU:H	16	0.47
(1,111)	1:A:80:ARG:H	1:A:79:THR:H	7	0.47
(1,111)	1:A:80:ARG:H	1:A:79:THR:H	8	0.47
(1,111)	1:A:80:ARG:H	1:A:79:THR:H	15	0.47
(1,104)	1:A:80:ARG:H	1:A:79:THR:H	7	0.47
(1,104)	1:A:80:ARG:H	1:A:79:THR:H	8	0.47
(1,104)	1:A:80:ARG:H	1:A:79:THR:H	15	0.47
(4,60)	1:A:49:GLN:CB	1:A:33:LYS:H	16	0.46
(4,130)	1:A:56:PHE:CB	1:A:41:GLY:H	11	0.46
(1,98)	1:A:68:VAL:H	1:A:67:ALA:H	13	0.46
(1,98)	1:A:68:VAL:H	1:A:67:ALA:H	14	0.46
(1,97)	1:A:66:VAL:H	1:A:67:ALA:H	8	0.46
(1,97)	1:A:66:VAL:H	1:A:67:ALA:H	14	0.46
(1,97)	1:A:66:VAL:H	1:A:67:ALA:H	16	0.46
(1,95)	1:A:67:ALA:H	1:A:66:VAL:H	8	0.46
(1,95)	1:A:67:ALA:H	1:A:66:VAL:H	14	0.46
(1,95)	1:A:67:ALA:H	1:A:66:VAL:H	16	0.46
(1,94)	1:A:67:ALA:H	1:A:68:VAL:H	13	0.46
(1,94)	1:A:67:ALA:H	1:A:68:VAL:H	14	0.46
(1,91)	1:A:65:LEU:H	1:A:64:LEU:H	5	0.46
(1,91)	1:A:65:LEU:H	1:A:64:LEU:H	14	0.46
(1,91)	1:A:65:LEU:H	1:A:64:LEU:H	15	0.46
(1,90)	1:A:64:LEU:H	1:A:65:LEU:H	5	0.46
(1,90)	1:A:64:LEU:H	1:A:65:LEU:H	14	0.46
(1,90)	1:A:64:LEU:H	1:A:65:LEU:H	15	0.46

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,81)	1:A:54:ARG:H	1:A:53:GLN:H	19	0.46
(1,80)	1:A:53:GLN:H	1:A:54:ARG:H	19	0.46
(1,78)	1:A:52:ILE:H	1:A:53:GLN:H	6	0.46
(1,77)	1:A:53:GLN:H	1:A:52:ILE:H	6	0.46
(1,62)	1:A:40:THR:H	1:A:39:VAL:H	13	0.46
(1,62)	1:A:40:THR:H	1:A:39:VAL:H	15	0.46
(1,61)	1:A:39:VAL:H	1:A:40:THR:H	13	0.46
(1,61)	1:A:39:VAL:H	1:A:40:THR:H	15	0.46
(1,38)	1:A:26:CYS:H	1:A:27:GLN:H	7	0.46
(1,37)	1:A:27:GLN:H	1:A:26:CYS:H	7	0.46
(1,27)	1:A:21:GLY:H	1:A:20:LEU:H	1	0.46
(1,26)	1:A:20:LEU:H	1:A:21:GLY:H	1	0.46
(1,23)	1:A:21:GLY:H	1:A:20:LEU:H	1	0.46
(1,22)	1:A:20:LEU:H	1:A:21:GLY:H	1	0.46
(1,21)	1:A:20:LEU:H	1:A:19:GLY:H	1	0.46
(1,20)	1:A:19:GLY:H	1:A:20:LEU:H	1	0.46
(1,17)	1:A:15:ALA:H	1:A:16:LYS:H	16	0.46
(1,122)	1:A:87:ASN:H	1:A:86:CYS:H	2	0.46
(1,121)	1:A:86:CYS:H	1:A:87:ASN:H	2	0.46
(1,12)	1:A:11:ASP:H	1:A:12:ALA:H	18	0.46
(1,115)	1:A:82:GLU:H	1:A:83:SER:H	20	0.46
(1,114)	1:A:83:SER:H	1:A:82:GLU:H	20	0.46
(1,111)	1:A:80:ARG:H	1:A:79:THR:H	2	0.46
(1,11)	1:A:12:ALA:H	1:A:11:ASP:H	18	0.46
(1,104)	1:A:80:ARG:H	1:A:79:THR:H	2	0.46
(1,98)	1:A:68:VAL:H	1:A:67:ALA:H	1	0.45
(1,98)	1:A:68:VAL:H	1:A:67:ALA:H	2	0.45
(1,98)	1:A:68:VAL:H	1:A:67:ALA:H	4	0.45
(1,98)	1:A:68:VAL:H	1:A:67:ALA:H	7	0.45
(1,98)	1:A:68:VAL:H	1:A:67:ALA:H	8	0.45
(1,98)	1:A:68:VAL:H	1:A:67:ALA:H	9	0.45
(1,98)	1:A:68:VAL:H	1:A:67:ALA:H	11	0.45
(1,98)	1:A:68:VAL:H	1:A:67:ALA:H	15	0.45
(1,98)	1:A:68:VAL:H	1:A:67:ALA:H	17	0.45
(1,98)	1:A:68:VAL:H	1:A:67:ALA:H	18	0.45
(1,98)	1:A:68:VAL:H	1:A:67:ALA:H	19	0.45
(1,98)	1:A:68:VAL:H	1:A:67:ALA:H	20	0.45
(1,94)	1:A:67:ALA:H	1:A:68:VAL:H	1	0.45
(1,94)	1:A:67:ALA:H	1:A:68:VAL:H	2	0.45
(1,94)	1:A:67:ALA:H	1:A:68:VAL:H	4	0.45
(1,94)	1:A:67:ALA:H	1:A:68:VAL:H	7	0.45
(1,94)	1:A:67:ALA:H	1:A:68:VAL:H	8	0.45

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,94)	1:A:67:ALA:H	1:A:68:VAL:H	9	0.45
(1,94)	1:A:67:ALA:H	1:A:68:VAL:H	11	0.45
(1,94)	1:A:67:ALA:H	1:A:68:VAL:H	15	0.45
(1,94)	1:A:67:ALA:H	1:A:68:VAL:H	17	0.45
(1,94)	1:A:67:ALA:H	1:A:68:VAL:H	18	0.45
(1,94)	1:A:67:ALA:H	1:A:68:VAL:H	19	0.45
(1,94)	1:A:67:ALA:H	1:A:68:VAL:H	20	0.45
(1,91)	1:A:65:LEU:H	1:A:64:LEU:H	1	0.45
(1,91)	1:A:65:LEU:H	1:A:64:LEU:H	7	0.45
(1,90)	1:A:64:LEU:H	1:A:65:LEU:H	1	0.45
(1,90)	1:A:64:LEU:H	1:A:65:LEU:H	7	0.45
(1,81)	1:A:54:ARG:H	1:A:53:GLN:H	9	0.45
(1,80)	1:A:53:GLN:H	1:A:54:ARG:H	9	0.45
(1,78)	1:A:52:ILE:H	1:A:53:GLN:H	3	0.45
(1,78)	1:A:52:ILE:H	1:A:53:GLN:H	4	0.45
(1,78)	1:A:52:ILE:H	1:A:53:GLN:H	12	0.45
(1,77)	1:A:53:GLN:H	1:A:52:ILE:H	3	0.45
(1,77)	1:A:53:GLN:H	1:A:52:ILE:H	4	0.45
(1,77)	1:A:53:GLN:H	1:A:52:ILE:H	12	0.45
(1,62)	1:A:40:THR:H	1:A:39:VAL:H	20	0.45
(1,61)	1:A:39:VAL:H	1:A:40:THR:H	20	0.45
(1,150)	1:A:36:PHE:H	1:A:34:GLY:H	7	0.45
(1,128)	1:A:90:TRP:H	1:A:89:LEU:H	1	0.45
(1,127)	1:A:89:LEU:H	1:A:90:TRP:H	1	0.45
(1,120)	1:A:86:CYS:H	1:A:85:LYS:H	3	0.45
(1,12)	1:A:11:ASP:H	1:A:12:ALA:H	15	0.45
(1,118)	1:A:85:LYS:H	1:A:86:CYS:H	3	0.45
(1,110)	1:A:79:THR:H	1:A:78:VAL:H	16	0.45
(1,11)	1:A:12:ALA:H	1:A:11:ASP:H	15	0.45
(1,109)	1:A:78:VAL:H	1:A:79:THR:H	16	0.45
(1,106)	1:A:78:VAL:H	1:A:79:THR:H	16	0.45
(4,129)	1:A:56:PHE:CB	1:A:40:THR:H	1	0.44
(1,98)	1:A:68:VAL:H	1:A:67:ALA:H	3	0.44
(1,98)	1:A:68:VAL:H	1:A:67:ALA:H	5	0.44
(1,98)	1:A:68:VAL:H	1:A:67:ALA:H	10	0.44
(1,98)	1:A:68:VAL:H	1:A:67:ALA:H	12	0.44
(1,94)	1:A:67:ALA:H	1:A:68:VAL:H	3	0.44
(1,94)	1:A:67:ALA:H	1:A:68:VAL:H	5	0.44
(1,94)	1:A:67:ALA:H	1:A:68:VAL:H	10	0.44
(1,94)	1:A:67:ALA:H	1:A:68:VAL:H	12	0.44
(1,91)	1:A:65:LEU:H	1:A:64:LEU:H	9	0.44
(1,91)	1:A:65:LEU:H	1:A:64:LEU:H	12	0.44

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,91)	1:A:65:LEU:H	1:A:64:LEU:H	18	0.44
(1,91)	1:A:65:LEU:H	1:A:64:LEU:H	20	0.44
(1,90)	1:A:64:LEU:H	1:A:65:LEU:H	9	0.44
(1,90)	1:A:64:LEU:H	1:A:65:LEU:H	12	0.44
(1,90)	1:A:64:LEU:H	1:A:65:LEU:H	18	0.44
(1,90)	1:A:64:LEU:H	1:A:65:LEU:H	20	0.44
(1,85)	1:A:56:PHE:H	1:A:55:LYS:H	9	0.44
(1,84)	1:A:55:LYS:H	1:A:56:PHE:H	9	0.44
(1,81)	1:A:54:ARG:H	1:A:53:GLN:H	3	0.44
(1,81)	1:A:54:ARG:H	1:A:53:GLN:H	5	0.44
(1,81)	1:A:54:ARG:H	1:A:53:GLN:H	14	0.44
(1,80)	1:A:53:GLN:H	1:A:54:ARG:H	3	0.44
(1,80)	1:A:53:GLN:H	1:A:54:ARG:H	5	0.44
(1,80)	1:A:53:GLN:H	1:A:54:ARG:H	14	0.44
(1,78)	1:A:52:ILE:H	1:A:53:GLN:H	1	0.44
(1,78)	1:A:52:ILE:H	1:A:53:GLN:H	5	0.44
(1,78)	1:A:52:ILE:H	1:A:53:GLN:H	9	0.44
(1,77)	1:A:53:GLN:H	1:A:52:ILE:H	1	0.44
(1,77)	1:A:53:GLN:H	1:A:52:ILE:H	5	0.44
(1,77)	1:A:53:GLN:H	1:A:52:ILE:H	9	0.44
(1,62)	1:A:40:THR:H	1:A:39:VAL:H	2	0.44
(1,61)	1:A:39:VAL:H	1:A:40:THR:H	2	0.44
(1,5)	1:A:6:LEU:H	1:A:7:SER:H	18	0.44
(1,3)	1:A:7:SER:H	1:A:6:LEU:H	18	0.44
(1,120)	1:A:86:CYS:H	1:A:85:LYS:H	2	0.44
(1,120)	1:A:86:CYS:H	1:A:85:LYS:H	6	0.44
(1,118)	1:A:85:LYS:H	1:A:86:CYS:H	2	0.44
(1,118)	1:A:85:LYS:H	1:A:86:CYS:H	6	0.44
(1,115)	1:A:82:GLU:H	1:A:83:SER:H	10	0.44
(1,114)	1:A:83:SER:H	1:A:82:GLU:H	10	0.44
(4,60)	1:A:49:GLN:CB	1:A:33:LYS:H	12	0.43
(1,9)	1:A:9:VAL:H	1:A:10:ASP:H	2	0.43
(1,85)	1:A:56:PHE:H	1:A:55:LYS:H	15	0.43
(1,84)	1:A:55:LYS:H	1:A:56:PHE:H	15	0.43
(1,78)	1:A:52:ILE:H	1:A:53:GLN:H	16	0.43
(1,77)	1:A:53:GLN:H	1:A:52:ILE:H	16	0.43
(1,2)	1:A:5:GLY:H	1:A:4:LEU:H	2	0.43
(1,17)	1:A:15:ALA:H	1:A:16:LYS:H	2	0.43
(1,150)	1:A:36:PHE:H	1:A:34:GLY:H	2	0.43
(1,150)	1:A:36:PHE:H	1:A:34:GLY:H	12	0.43
(1,145)	1:A:100:LYS:H	1:A:101:ASP:H	5	0.43
(1,143)	1:A:101:ASP:H	1:A:100:LYS:H	5	0.43

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,141)	1:A:95:THR:H	1:A:96:GLY:H	9	0.43
(1,139)	1:A:96:GLY:H	1:A:95:THR:H	9	0.43
(1,12)	1:A:11:ASP:H	1:A:12:ALA:H	11	0.43
(1,116)	1:A:82:GLU:H	1:A:81:VAL:H	1	0.43
(1,116)	1:A:82:GLU:H	1:A:81:VAL:H	11	0.43
(1,113)	1:A:81:VAL:H	1:A:82:GLU:H	1	0.43
(1,113)	1:A:81:VAL:H	1:A:82:GLU:H	11	0.43
(1,110)	1:A:79:THR:H	1:A:78:VAL:H	12	0.43
(1,11)	1:A:12:ALA:H	1:A:11:ASP:H	11	0.43
(1,109)	1:A:78:VAL:H	1:A:79:THR:H	12	0.43
(1,106)	1:A:78:VAL:H	1:A:79:THR:H	12	0.43
(1,1)	1:A:4:LEU:H	1:A:5:GLY:H	2	0.43
(4,130)	1:A:56:PHE:CB	1:A:41:GLY:H	1	0.42
(1,40)	1:A:27:GLN:H	1:A:28:SER:H	4	0.42
(1,39)	1:A:28:SER:H	1:A:27:GLN:H	4	0.42
(1,141)	1:A:95:THR:H	1:A:96:GLY:H	6	0.42
(1,141)	1:A:95:THR:H	1:A:96:GLY:H	11	0.42
(1,139)	1:A:96:GLY:H	1:A:95:THR:H	6	0.42
(1,139)	1:A:96:GLY:H	1:A:95:THR:H	11	0.42
(1,12)	1:A:11:ASP:H	1:A:12:ALA:H	9	0.42
(1,11)	1:A:12:ALA:H	1:A:11:ASP:H	9	0.42
(4,60)	1:A:49:GLN:CB	1:A:33:LYS:H	2	0.41
(1,150)	1:A:36:PHE:H	1:A:34:GLY:H	19	0.41
(1,116)	1:A:82:GLU:H	1:A:81:VAL:H	2	0.41
(1,113)	1:A:81:VAL:H	1:A:82:GLU:H	2	0.41
(4,5)	1:A:26:CYS:CB	1:A:43:GLY:H	18	0.4
(4,39)	1:A:26:CYS:CB	1:A:88:ASN:H	10	0.4
(1,81)	1:A:54:ARG:H	1:A:53:GLN:H	18	0.4
(1,80)	1:A:53:GLN:H	1:A:54:ARG:H	18	0.4
(1,150)	1:A:36:PHE:H	1:A:34:GLY:H	4	0.4
(1,150)	1:A:36:PHE:H	1:A:34:GLY:H	13	0.4
(1,85)	1:A:56:PHE:H	1:A:55:LYS:H	18	0.39
(1,84)	1:A:55:LYS:H	1:A:56:PHE:H	18	0.39
(1,81)	1:A:54:ARG:H	1:A:53:GLN:H	16	0.39
(1,80)	1:A:53:GLN:H	1:A:54:ARG:H	16	0.39
(1,27)	1:A:21:GLY:H	1:A:20:LEU:H	7	0.39
(1,26)	1:A:20:LEU:H	1:A:21:GLY:H	7	0.39
(1,23)	1:A:21:GLY:H	1:A:20:LEU:H	7	0.39
(1,22)	1:A:20:LEU:H	1:A:21:GLY:H	7	0.39
(1,21)	1:A:20:LEU:H	1:A:19:GLY:H	13	0.39
(1,20)	1:A:19:GLY:H	1:A:20:LEU:H	13	0.39
(1,150)	1:A:36:PHE:H	1:A:34:GLY:H	14	0.39

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,142)	1:A:97:GLN:H	1:A:96:GLY:H	17	0.39
(1,140)	1:A:96:GLY:H	1:A:97:GLN:H	17	0.39
(1,85)	1:A:56:PHE:H	1:A:55:LYS:H	20	0.38
(1,84)	1:A:55:LYS:H	1:A:56:PHE:H	20	0.38
(1,150)	1:A:36:PHE:H	1:A:34:GLY:H	11	0.38
(1,145)	1:A:100:LYS:H	1:A:101:ASP:H	17	0.38
(1,143)	1:A:101:ASP:H	1:A:100:LYS:H	17	0.38
(1,138)	1:A:95:THR:H	1:A:94:GLU:H	4	0.38
(1,137)	1:A:94:GLU:H	1:A:95:THR:H	4	0.38
(4,204)	1:A:86:CYS:CB	1:A:32:MET:H	13	0.37
(1,81)	1:A:54:ARG:H	1:A:53:GLN:H	4	0.37
(1,80)	1:A:53:GLN:H	1:A:54:ARG:H	4	0.37
(1,142)	1:A:97:GLN:H	1:A:96:GLY:H	13	0.37
(1,140)	1:A:96:GLY:H	1:A:97:GLN:H	13	0.37
(1,12)	1:A:11:ASP:H	1:A:12:ALA:H	2	0.37
(1,11)	1:A:12:ALA:H	1:A:11:ASP:H	2	0.37
(1,85)	1:A:56:PHE:H	1:A:55:LYS:H	4	0.36
(1,84)	1:A:55:LYS:H	1:A:56:PHE:H	4	0.36
(1,67)	1:A:42:THR:H	1:A:43:GLY:H	10	0.36
(1,63)	1:A:43:GLY:H	1:A:42:THR:H	10	0.36
(1,151)	1:A:97:GLN:H	1:A:98:LEU:H	5	0.36
(1,150)	1:A:36:PHE:H	1:A:34:GLY:H	5	0.36
(1,145)	1:A:100:LYS:H	1:A:101:ASP:H	11	0.36
(1,143)	1:A:101:ASP:H	1:A:100:LYS:H	11	0.36
(4,60)	1:A:49:GLN:CB	1:A:33:LYS:H	13	0.35
(4,200)	1:A:86:CYS:CB	1:A:26:CYS:H	5	0.35
(1,27)	1:A:21:GLY:H	1:A:20:LEU:H	6	0.35
(1,26)	1:A:20:LEU:H	1:A:21:GLY:H	6	0.35
(1,23)	1:A:21:GLY:H	1:A:20:LEU:H	6	0.35
(1,22)	1:A:20:LEU:H	1:A:21:GLY:H	6	0.35
(1,19)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:HIS:H	8	0.35
(1,18)	1:A:17:HIS:H	1:A:16:LYS:H	8	0.35
(1,142)	1:A:97:GLN:H	1:A:96:GLY:H	20	0.35
(1,140)	1:A:96:GLY:H	1:A:97:GLN:H	20	0.35
(4,60)	1:A:49:GLN:CB	1:A:33:LYS:H	7	0.34
(4,204)	1:A:86:CYS:CB	1:A:32:MET:H	16	0.34
(1,19)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:HIS:H	2	0.34
(1,18)	1:A:17:HIS:H	1:A:16:LYS:H	2	0.34
(1,145)	1:A:100:LYS:H	1:A:101:ASP:H	8	0.34
(1,143)	1:A:101:ASP:H	1:A:100:LYS:H	8	0.34
(1,142)	1:A:97:GLN:H	1:A:96:GLY:H	8	0.34
(1,141)	1:A:95:THR:H	1:A:96:GLY:H	10	0.34

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,141)	1:A:95:THR:H	1:A:96:GLY:H	13	0.34
(1,140)	1:A:96:GLY:H	1:A:97:GLN:H	8	0.34
(1,139)	1:A:96:GLY:H	1:A:95:THR:H	10	0.34
(1,139)	1:A:96:GLY:H	1:A:95:THR:H	13	0.34
(4,60)	1:A:49:GLN:CB	1:A:33:LYS:H	5	0.33
(4,5)	1:A:26:CYS:CB	1:A:43:GLY:H	10	0.33
(1,150)	1:A:36:PHE:H	1:A:34:GLY:H	10	0.33
(1,150)	1:A:36:PHE:H	1:A:34:GLY:H	17	0.33
(1,85)	1:A:56:PHE:H	1:A:55:LYS:H	11	0.32
(1,84)	1:A:55:LYS:H	1:A:56:PHE:H	11	0.32
(1,5)	1:A:6:LEU:H	1:A:7:SER:H	8	0.32
(1,5)	1:A:6:LEU:H	1:A:7:SER:H	9	0.32
(1,5)	1:A:6:LEU:H	1:A:7:SER:H	15	0.32
(1,3)	1:A:7:SER:H	1:A:6:LEU:H	8	0.32
(1,3)	1:A:7:SER:H	1:A:6:LEU:H	9	0.32
(1,3)	1:A:7:SER:H	1:A:6:LEU:H	15	0.32
(1,27)	1:A:21:GLY:H	1:A:20:LEU:H	15	0.32
(1,26)	1:A:20:LEU:H	1:A:21:GLY:H	15	0.32
(1,23)	1:A:21:GLY:H	1:A:20:LEU:H	15	0.32
(1,22)	1:A:20:LEU:H	1:A:21:GLY:H	15	0.32
(1,19)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:HIS:H	9	0.32
(1,18)	1:A:17:HIS:H	1:A:16:LYS:H	9	0.32
(1,142)	1:A:97:GLN:H	1:A:96:GLY:H	2	0.32
(1,141)	1:A:95:THR:H	1:A:96:GLY:H	2	0.32
(1,140)	1:A:96:GLY:H	1:A:97:GLN:H	2	0.32
(1,139)	1:A:96:GLY:H	1:A:95:THR:H	2	0.32
(4,60)	1:A:49:GLN:CB	1:A:33:LYS:H	10	0.31
(4,40)	1:A:26:CYS:CB	1:A:103:SER:H	3	0.31
(3,8)	1:A:21:GLY:O	1:A:25:ALA:N	14	0.31
(3,50)	1:A:80:ARG:O	1:A:84:GLU:N	11	0.31
(3,50)	1:A:80:ARG:O	1:A:84:GLU:N	12	0.31
(3,43)	1:A:73:VAL:O	1:A:77:GLY:N	8	0.31
(3,43)	1:A:73:VAL:O	1:A:77:GLY:N	12	0.31
(3,39)	1:A:69:VAL:O	1:A:73:VAL:N	1	0.31
(3,39)	1:A:69:VAL:O	1:A:73:VAL:N	3	0.31
(3,39)	1:A:69:VAL:O	1:A:73:VAL:N	5	0.31
(3,39)	1:A:69:VAL:O	1:A:73:VAL:N	6	0.31
(3,39)	1:A:69:VAL:O	1:A:73:VAL:N	7	0.31
(3,39)	1:A:69:VAL:O	1:A:73:VAL:N	8	0.31
(3,39)	1:A:69:VAL:O	1:A:73:VAL:N	12	0.31
(3,29)	1:A:48:LEU:O	1:A:52:ILE:N	4	0.31
(3,29)	1:A:48:LEU:O	1:A:52:ILE:N	7	0.31

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,29)	1:A:48:LEU:O	1:A:52:ILE:N	14	0.31
(3,29)	1:A:48:LEU:O	1:A:52:ILE:N	16	0.31
(3,26)	1:A:45:ALA:O	1:A:49:GLN:N	5	0.31
(3,26)	1:A:45:ALA:O	1:A:49:GLN:N	14	0.31
(3,26)	1:A:45:ALA:O	1:A:49:GLN:N	15	0.31
(1,67)	1:A:42:THR:H	1:A:43:GLY:H	16	0.31
(1,63)	1:A:43:GLY:H	1:A:42:THR:H	16	0.31
(1,19)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:HIS:H	6	0.31
(1,19)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:HIS:H	13	0.31
(1,18)	1:A:17:HIS:H	1:A:16:LYS:H	6	0.31
(1,18)	1:A:17:HIS:H	1:A:16:LYS:H	13	0.31
(4,61)	1:A:49:GLN:CB	1:A:34:GLY:H	17	0.3
(3,54)	1:A:84:GLU:O	1:A:88:ASN:N	11	0.3
(3,51)	1:A:81:VAL:O	1:A:85:LYS:N	4	0.3
(3,51)	1:A:81:VAL:O	1:A:85:LYS:N	9	0.3
(3,51)	1:A:81:VAL:O	1:A:85:LYS:N	13	0.3
(3,50)	1:A:80:ARG:O	1:A:84:GLU:N	3	0.3
(3,50)	1:A:80:ARG:O	1:A:84:GLU:N	4	0.3
(3,50)	1:A:80:ARG:O	1:A:84:GLU:N	6	0.3
(3,50)	1:A:80:ARG:O	1:A:84:GLU:N	9	0.3
(3,50)	1:A:80:ARG:O	1:A:84:GLU:N	16	0.3
(3,50)	1:A:80:ARG:O	1:A:84:GLU:N	19	0.3
(3,47)	1:A:77:GLY:O	1:A:81:VAL:N	4	0.3
(3,47)	1:A:77:GLY:O	1:A:81:VAL:N	6	0.3
(3,47)	1:A:77:GLY:O	1:A:81:VAL:N	8	0.3
(3,47)	1:A:77:GLY:O	1:A:81:VAL:N	9	0.3
(3,47)	1:A:77:GLY:O	1:A:81:VAL:N	10	0.3
(3,47)	1:A:77:GLY:O	1:A:81:VAL:N	16	0.3
(3,47)	1:A:77:GLY:O	1:A:81:VAL:N	20	0.3
(3,43)	1:A:73:VAL:O	1:A:77:GLY:N	1	0.3
(3,43)	1:A:73:VAL:O	1:A:77:GLY:N	2	0.3
(3,43)	1:A:73:VAL:O	1:A:77:GLY:N	3	0.3
(3,43)	1:A:73:VAL:O	1:A:77:GLY:N	5	0.3
(3,43)	1:A:73:VAL:O	1:A:77:GLY:N	9	0.3
(3,43)	1:A:73:VAL:O	1:A:77:GLY:N	11	0.3
(3,43)	1:A:73:VAL:O	1:A:77:GLY:N	16	0.3
(3,39)	1:A:69:VAL:O	1:A:73:VAL:N	2	0.3
(3,39)	1:A:69:VAL:O	1:A:73:VAL:N	4	0.3
(3,39)	1:A:69:VAL:O	1:A:73:VAL:N	9	0.3
(3,39)	1:A:69:VAL:O	1:A:73:VAL:N	11	0.3
(3,39)	1:A:69:VAL:O	1:A:73:VAL:N	13	0.3
(3,39)	1:A:69:VAL:O	1:A:73:VAL:N	14	0.3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,39)	1:A:69:VAL:O	1:A:73:VAL:N	16	0.3
(3,39)	1:A:69:VAL:O	1:A:73:VAL:N	17	0.3
(3,39)	1:A:69:VAL:O	1:A:73:VAL:N	18	0.3
(3,39)	1:A:69:VAL:O	1:A:73:VAL:N	19	0.3
(3,26)	1:A:45:ALA:O	1:A:49:GLN:N	1	0.3
(3,26)	1:A:45:ALA:O	1:A:49:GLN:N	3	0.3
(3,26)	1:A:45:ALA:O	1:A:49:GLN:N	4	0.3
(3,26)	1:A:45:ALA:O	1:A:49:GLN:N	6	0.3
(3,26)	1:A:45:ALA:O	1:A:49:GLN:N	12	0.3
(3,26)	1:A:45:ALA:O	1:A:49:GLN:N	16	0.3
(3,26)	1:A:45:ALA:O	1:A:49:GLN:N	17	0.3
(3,26)	1:A:45:ALA:O	1:A:49:GLN:N	18	0.3
(3,26)	1:A:45:ALA:O	1:A:49:GLN:N	19	0.3
(3,26)	1:A:45:ALA:O	1:A:49:GLN:N	20	0.3
(3,18)	1:A:31:PHE:O	1:A:35:VAL:N	8	0.3
(3,18)	1:A:31:PHE:O	1:A:35:VAL:N	10	0.3
(3,17)	1:A:30:ALA:O	1:A:34:GLY:N	19	0.3
(3,16)	1:A:29:HIS:O	1:A:33:LYS:N	4	0.3
(3,14)	1:A:27:GLN:O	1:A:31:PHE:N	1	0.3
(3,14)	1:A:27:GLN:O	1:A:31:PHE:N	10	0.3
(3,14)	1:A:27:GLN:O	1:A:31:PHE:N	18	0.3
(1,85)	1:A:56:PHE:H	1:A:55:LYS:H	13	0.3
(1,84)	1:A:55:LYS:H	1:A:56:PHE:H	13	0.3
(1,5)	1:A:6:LEU:H	1:A:7:SER:H	17	0.3
(1,3)	1:A:7:SER:H	1:A:6:LEU:H	17	0.3
(1,27)	1:A:21:GLY:H	1:A:20:LEU:H	16	0.3
(1,26)	1:A:20:LEU:H	1:A:21:GLY:H	16	0.3
(1,23)	1:A:21:GLY:H	1:A:20:LEU:H	16	0.3
(1,22)	1:A:20:LEU:H	1:A:21:GLY:H	16	0.3
(1,19)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:HIS:H	11	0.3
(1,18)	1:A:17:HIS:H	1:A:16:LYS:H	11	0.3
(1,151)	1:A:97:GLN:H	1:A:98:LEU:H	12	0.3
(1,145)	1:A:100:LYS:H	1:A:101:ASP:H	12	0.3
(1,143)	1:A:101:ASP:H	1:A:100:LYS:H	12	0.3
(4,129)	1:A:56:PHE:CB	1:A:40:THR:H	4	0.29
(3,8)	1:A:21:GLY:O	1:A:25:ALA:N	9	0.29
(3,51)	1:A:81:VAL:O	1:A:85:LYS:N	5	0.29
(3,51)	1:A:81:VAL:O	1:A:85:LYS:N	6	0.29
(3,51)	1:A:81:VAL:O	1:A:85:LYS:N	7	0.29
(3,51)	1:A:81:VAL:O	1:A:85:LYS:N	8	0.29
(3,51)	1:A:81:VAL:O	1:A:85:LYS:N	12	0.29
(3,51)	1:A:81:VAL:O	1:A:85:LYS:N	14	0.29

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,50)	1:A:80:ARG:O	1:A:84:GLU:N	5	0.29
(3,47)	1:A:77:GLY:O	1:A:81:VAL:N	5	0.29
(3,47)	1:A:77:GLY:O	1:A:81:VAL:N	7	0.29
(3,47)	1:A:77:GLY:O	1:A:81:VAL:N	11	0.29
(3,47)	1:A:77:GLY:O	1:A:81:VAL:N	12	0.29
(3,47)	1:A:77:GLY:O	1:A:81:VAL:N	13	0.29
(3,43)	1:A:73:VAL:O	1:A:77:GLY:N	6	0.29
(3,43)	1:A:73:VAL:O	1:A:77:GLY:N	7	0.29
(3,43)	1:A:73:VAL:O	1:A:77:GLY:N	10	0.29
(3,43)	1:A:73:VAL:O	1:A:77:GLY:N	13	0.29
(3,4)	1:A:9:VAL:O	1:A:13:VAL:N	3	0.29
(3,39)	1:A:69:VAL:O	1:A:73:VAL:N	10	0.29
(3,29)	1:A:48:LEU:O	1:A:52:ILE:N	18	0.29
(3,26)	1:A:45:ALA:O	1:A:49:GLN:N	2	0.29
(3,25)	1:A:44:MET:O	1:A:48:LEU:N	8	0.29
(3,25)	1:A:44:MET:O	1:A:48:LEU:N	17	0.29
(3,23)	1:A:36:PHE:O	1:A:40:THR:N	9	0.29
(3,18)	1:A:31:PHE:O	1:A:35:VAL:N	5	0.29
(3,18)	1:A:31:PHE:O	1:A:35:VAL:N	7	0.29
(3,18)	1:A:31:PHE:O	1:A:35:VAL:N	20	0.29
(3,17)	1:A:30:ALA:O	1:A:34:GLY:N	9	0.29
(3,14)	1:A:27:GLN:O	1:A:31:PHE:N	2	0.29
(3,14)	1:A:27:GLN:O	1:A:31:PHE:N	5	0.29
(3,14)	1:A:27:GLN:O	1:A:31:PHE:N	7	0.29
(3,14)	1:A:27:GLN:O	1:A:31:PHE:N	11	0.29
(3,14)	1:A:27:GLN:O	1:A:31:PHE:N	19	0.29
(1,85)	1:A:56:PHE:H	1:A:55:LYS:H	7	0.29
(1,84)	1:A:55:LYS:H	1:A:56:PHE:H	7	0.29
(1,19)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:HIS:H	5	0.29
(1,19)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:HIS:H	10	0.29
(1,19)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:HIS:H	14	0.29
(1,19)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:HIS:H	18	0.29
(1,18)	1:A:17:HIS:H	1:A:16:LYS:H	5	0.29
(1,18)	1:A:17:HIS:H	1:A:16:LYS:H	10	0.29
(1,18)	1:A:17:HIS:H	1:A:16:LYS:H	14	0.29
(1,18)	1:A:17:HIS:H	1:A:16:LYS:H	18	0.29
(1,150)	1:A:36:PHE:H	1:A:34:GLY:H	3	0.29
(1,142)	1:A:97:GLN:H	1:A:96:GLY:H	6	0.29
(1,141)	1:A:95:THR:H	1:A:96:GLY:H	16	0.29
(1,140)	1:A:96:GLY:H	1:A:97:GLN:H	6	0.29
(1,139)	1:A:96:GLY:H	1:A:95:THR:H	16	0.29
(4,201)	1:A:86:CYS:CB	1:A:27:GLN:H	14	0.28

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,7)	1:A:20:LEU:O	1:A:24:ALA:N	8	0.28
(3,54)	1:A:84:GLU:O	1:A:88:ASN:N	12	0.28
(3,51)	1:A:81:VAL:O	1:A:85:LYS:N	10	0.28
(3,51)	1:A:81:VAL:O	1:A:85:LYS:N	16	0.28
(3,51)	1:A:81:VAL:O	1:A:85:LYS:N	17	0.28
(3,50)	1:A:80:ARG:O	1:A:84:GLU:N	8	0.28
(3,50)	1:A:80:ARG:O	1:A:84:GLU:N	17	0.28
(3,50)	1:A:80:ARG:O	1:A:84:GLU:N	18	0.28
(3,50)	1:A:80:ARG:O	1:A:84:GLU:N	20	0.28
(3,47)	1:A:77:GLY:O	1:A:81:VAL:N	1	0.28
(3,47)	1:A:77:GLY:O	1:A:81:VAL:N	14	0.28
(3,47)	1:A:77:GLY:O	1:A:81:VAL:N	15	0.28
(3,47)	1:A:77:GLY:O	1:A:81:VAL:N	17	0.28
(3,47)	1:A:77:GLY:O	1:A:81:VAL:N	18	0.28
(3,47)	1:A:77:GLY:O	1:A:81:VAL:N	19	0.28
(3,4)	1:A:9:VAL:O	1:A:13:VAL:N	12	0.28
(3,3)	1:A:8:ARG:O	1:A:12:ALA:N	20	0.28
(3,29)	1:A:48:LEU:O	1:A:52:ILE:N	2	0.28
(3,29)	1:A:48:LEU:O	1:A:52:ILE:N	5	0.28
(3,29)	1:A:48:LEU:O	1:A:52:ILE:N	9	0.28
(3,29)	1:A:48:LEU:O	1:A:52:ILE:N	17	0.28
(3,26)	1:A:45:ALA:O	1:A:49:GLN:N	7	0.28
(3,26)	1:A:45:ALA:O	1:A:49:GLN:N	11	0.28
(3,25)	1:A:44:MET:O	1:A:48:LEU:N	9	0.28
(3,25)	1:A:44:MET:O	1:A:48:LEU:N	13	0.28
(3,23)	1:A:36:PHE:O	1:A:40:THR:N	4	0.28
(3,18)	1:A:31:PHE:O	1:A:35:VAL:N	12	0.28
(3,17)	1:A:30:ALA:O	1:A:34:GLY:N	16	0.28
(3,17)	1:A:30:ALA:O	1:A:34:GLY:N	18	0.28
(3,15)	1:A:28:SER:O	1:A:32:MET:N	20	0.28
(3,14)	1:A:27:GLN:O	1:A:31:PHE:N	8	0.28
(3,14)	1:A:27:GLN:O	1:A:31:PHE:N	15	0.28
(3,13)	1:A:26:CYS:O	1:A:30:ALA:N	4	0.28
(3,12)	1:A:25:ALA:O	1:A:29:HIS:N	14	0.28
(1,2)	1:A:5:GLY:H	1:A:4:LEU:H	12	0.28
(1,19)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:HIS:H	4	0.28
(1,19)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:HIS:H	12	0.28
(1,18)	1:A:17:HIS:H	1:A:16:LYS:H	4	0.28
(1,18)	1:A:17:HIS:H	1:A:16:LYS:H	12	0.28
(1,145)	1:A:100:LYS:H	1:A:101:ASP:H	3	0.28
(1,143)	1:A:101:ASP:H	1:A:100:LYS:H	3	0.28
(1,142)	1:A:97:GLN:H	1:A:96:GLY:H	11	0.28

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,140)	1:A:96:GLY:H	1:A:97:GLN:H	11	0.28
(1,1)	1:A:4:LEU:H	1:A:5:GLY:H	12	0.28
(3,9)	1:A:22:GLU:O	1:A:26:CYS:N	3	0.27
(3,9)	1:A:22:GLU:O	1:A:26:CYS:N	6	0.27
(3,9)	1:A:22:GLU:O	1:A:26:CYS:N	16	0.27
(3,9)	1:A:22:GLU:O	1:A:26:CYS:N	19	0.27
(3,8)	1:A:21:GLY:O	1:A:25:ALA:N	15	0.27
(3,7)	1:A:20:LEU:O	1:A:24:ALA:N	15	0.27
(3,60)	1:A:90:TRP:O	1:A:94:GLU:N	10	0.27
(3,54)	1:A:84:GLU:O	1:A:88:ASN:N	3	0.27
(3,54)	1:A:84:GLU:O	1:A:88:ASN:N	6	0.27
(3,54)	1:A:84:GLU:O	1:A:88:ASN:N	8	0.27
(3,50)	1:A:80:ARG:O	1:A:84:GLU:N	2	0.27
(3,50)	1:A:80:ARG:O	1:A:84:GLU:N	7	0.27
(3,50)	1:A:80:ARG:O	1:A:84:GLU:N	15	0.27
(3,43)	1:A:73:VAL:O	1:A:77:GLY:N	15	0.27
(3,43)	1:A:73:VAL:O	1:A:77:GLY:N	17	0.27
(3,43)	1:A:73:VAL:O	1:A:77:GLY:N	18	0.27
(3,43)	1:A:73:VAL:O	1:A:77:GLY:N	19	0.27
(3,29)	1:A:48:LEU:O	1:A:52:ILE:N	1	0.27
(3,26)	1:A:45:ALA:O	1:A:49:GLN:N	9	0.27
(3,26)	1:A:45:ALA:O	1:A:49:GLN:N	13	0.27
(3,25)	1:A:44:MET:O	1:A:48:LEU:N	3	0.27
(3,25)	1:A:44:MET:O	1:A:48:LEU:N	20	0.27
(3,24)	1:A:43:GLY:O	1:A:47:GLY:N	8	0.27
(3,21)	1:A:34:GLY:O	1:A:38:PHE:N	4	0.27
(3,20)	1:A:33:LYS:O	1:A:37:THR:N	15	0.27
(3,17)	1:A:30:ALA:O	1:A:34:GLY:N	12	0.27
(3,16)	1:A:29:HIS:O	1:A:33:LYS:N	6	0.27
(3,14)	1:A:27:GLN:O	1:A:31:PHE:N	20	0.27
(3,13)	1:A:26:CYS:O	1:A:30:ALA:N	9	0.27
(3,13)	1:A:26:CYS:O	1:A:30:ALA:N	19	0.27
(3,12)	1:A:25:ALA:O	1:A:29:HIS:N	4	0.27
(3,12)	1:A:25:ALA:O	1:A:29:HIS:N	6	0.27
(1,5)	1:A:6:LEU:H	1:A:7:SER:H	16	0.27
(1,3)	1:A:7:SER:H	1:A:6:LEU:H	16	0.27
(1,19)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:HIS:H	7	0.27
(1,19)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:HIS:H	20	0.27
(1,18)	1:A:17:HIS:H	1:A:16:LYS:H	7	0.27
(1,18)	1:A:17:HIS:H	1:A:16:LYS:H	20	0.27
(1,141)	1:A:95:THR:H	1:A:96:GLY:H	4	0.27
(1,139)	1:A:96:GLY:H	1:A:95:THR:H	4	0.27

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,60)	1:A:49:GLN:CB	1:A:33:LYS:H	8	0.26
(4,129)	1:A:56:PHE:CB	1:A:40:THR:H	9	0.26
(3,9)	1:A:22:GLU:O	1:A:26:CYS:N	9	0.26
(3,9)	1:A:22:GLU:O	1:A:26:CYS:N	11	0.26
(3,60)	1:A:90:TRP:O	1:A:94:GLU:N	9	0.26
(3,54)	1:A:84:GLU:O	1:A:88:ASN:N	1	0.26
(3,54)	1:A:84:GLU:O	1:A:88:ASN:N	14	0.26
(3,54)	1:A:84:GLU:O	1:A:88:ASN:N	18	0.26
(3,54)	1:A:84:GLU:O	1:A:88:ASN:N	19	0.26
(3,51)	1:A:81:VAL:O	1:A:85:LYS:N	1	0.26
(3,50)	1:A:80:ARG:O	1:A:84:GLU:N	10	0.26
(3,50)	1:A:80:ARG:O	1:A:84:GLU:N	13	0.26
(3,50)	1:A:80:ARG:O	1:A:84:GLU:N	14	0.26
(3,47)	1:A:77:GLY:O	1:A:81:VAL:N	2	0.26
(3,4)	1:A:9:VAL:O	1:A:13:VAL:N	10	0.26
(3,4)	1:A:9:VAL:O	1:A:13:VAL:N	18	0.26
(3,29)	1:A:48:LEU:O	1:A:52:ILE:N	6	0.26
(3,29)	1:A:48:LEU:O	1:A:52:ILE:N	11	0.26
(3,26)	1:A:45:ALA:O	1:A:49:GLN:N	10	0.26
(3,21)	1:A:34:GLY:O	1:A:38:PHE:N	7	0.26
(3,21)	1:A:34:GLY:O	1:A:38:PHE:N	19	0.26
(3,20)	1:A:33:LYS:O	1:A:37:THR:N	6	0.26
(3,20)	1:A:33:LYS:O	1:A:37:THR:N	9	0.26
(3,19)	1:A:32:MET:O	1:A:36:PHE:N	15	0.26
(3,17)	1:A:30:ALA:O	1:A:34:GLY:N	7	0.26
(3,17)	1:A:30:ALA:O	1:A:34:GLY:N	11	0.26
(3,17)	1:A:30:ALA:O	1:A:34:GLY:N	13	0.26
(3,14)	1:A:27:GLN:O	1:A:31:PHE:N	13	0.26
(3,13)	1:A:26:CYS:O	1:A:30:ALA:N	2	0.26
(3,13)	1:A:26:CYS:O	1:A:30:ALA:N	11	0.26
(3,13)	1:A:26:CYS:O	1:A:30:ALA:N	16	0.26
(3,13)	1:A:26:CYS:O	1:A:30:ALA:N	18	0.26
(3,12)	1:A:25:ALA:O	1:A:29:HIS:N	9	0.26
(3,11)	1:A:24:ALA:O	1:A:28:SER:N	15	0.26
(1,19)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:HIS:H	3	0.26
(1,18)	1:A:17:HIS:H	1:A:16:LYS:H	3	0.26
(1,141)	1:A:95:THR:H	1:A:96:GLY:H	12	0.26
(1,141)	1:A:95:THR:H	1:A:96:GLY:H	17	0.26
(1,139)	1:A:96:GLY:H	1:A:95:THR:H	12	0.26
(1,139)	1:A:96:GLY:H	1:A:95:THR:H	17	0.26
(4,201)	1:A:86:CYS:CB	1:A:27:GLN:H	16	0.25
(3,60)	1:A:90:TRP:O	1:A:94:GLU:N	2	0.25

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,57)	1:A:87:ASN:O	1:A:91:LEU:N	19	0.25
(3,55)	1:A:85:LYS:O	1:A:89:LEU:N	10	0.25
(3,54)	1:A:84:GLU:O	1:A:88:ASN:N	5	0.25
(3,54)	1:A:84:GLU:O	1:A:88:ASN:N	7	0.25
(3,54)	1:A:84:GLU:O	1:A:88:ASN:N	9	0.25
(3,54)	1:A:84:GLU:O	1:A:88:ASN:N	20	0.25
(3,51)	1:A:81:VAL:O	1:A:85:LYS:N	3	0.25
(3,51)	1:A:81:VAL:O	1:A:85:LYS:N	19	0.25
(3,50)	1:A:80:ARG:O	1:A:84:GLU:N	1	0.25
(3,47)	1:A:77:GLY:O	1:A:81:VAL:N	3	0.25
(3,4)	1:A:9:VAL:O	1:A:13:VAL:N	8	0.25
(3,4)	1:A:9:VAL:O	1:A:13:VAL:N	14	0.25
(3,30)	1:A:49:GLN:O	1:A:53:GLN:N	15	0.25
(3,29)	1:A:48:LEU:O	1:A:52:ILE:N	10	0.25
(3,29)	1:A:48:LEU:O	1:A:52:ILE:N	12	0.25
(3,29)	1:A:48:LEU:O	1:A:52:ILE:N	15	0.25
(3,29)	1:A:48:LEU:O	1:A:52:ILE:N	19	0.25
(3,28)	1:A:47:GLY:O	1:A:51:PHE:N	8	0.25
(3,28)	1:A:47:GLY:O	1:A:51:PHE:N	18	0.25
(3,25)	1:A:44:MET:O	1:A:48:LEU:N	2	0.25
(3,25)	1:A:44:MET:O	1:A:48:LEU:N	10	0.25
(3,24)	1:A:43:GLY:O	1:A:47:GLY:N	7	0.25
(3,24)	1:A:43:GLY:O	1:A:47:GLY:N	16	0.25
(3,23)	1:A:36:PHE:O	1:A:40:THR:N	6	0.25
(3,21)	1:A:34:GLY:O	1:A:38:PHE:N	5	0.25
(3,21)	1:A:34:GLY:O	1:A:38:PHE:N	10	0.25
(3,19)	1:A:32:MET:O	1:A:36:PHE:N	6	0.25
(3,18)	1:A:31:PHE:O	1:A:35:VAL:N	1	0.25
(3,17)	1:A:30:ALA:O	1:A:34:GLY:N	1	0.25
(3,17)	1:A:30:ALA:O	1:A:34:GLY:N	2	0.25
(3,17)	1:A:30:ALA:O	1:A:34:GLY:N	6	0.25
(3,17)	1:A:30:ALA:O	1:A:34:GLY:N	8	0.25
(3,17)	1:A:30:ALA:O	1:A:34:GLY:N	10	0.25
(3,16)	1:A:29:HIS:O	1:A:33:LYS:N	14	0.25
(3,15)	1:A:28:SER:O	1:A:32:MET:N	15	0.25
(3,13)	1:A:26:CYS:O	1:A:30:ALA:N	1	0.25
(3,13)	1:A:26:CYS:O	1:A:30:ALA:N	14	0.25
(3,13)	1:A:26:CYS:O	1:A:30:ALA:N	17	0.25
(3,11)	1:A:24:ALA:O	1:A:28:SER:N	20	0.25
(1,67)	1:A:42:THR:H	1:A:43:GLY:H	18	0.25
(1,63)	1:A:43:GLY:H	1:A:42:THR:H	18	0.25
(1,5)	1:A:6:LEU:H	1:A:7:SER:H	13	0.25

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3)	1:A:7:SER:H	1:A:6:LEU:H	13	0.25
(1,151)	1:A:97:GLN:H	1:A:98:LEU:H	6	0.25
(1,142)	1:A:97:GLN:H	1:A:96:GLY:H	5	0.25
(1,142)	1:A:97:GLN:H	1:A:96:GLY:H	18	0.25
(1,140)	1:A:96:GLY:H	1:A:97:GLN:H	5	0.25
(1,140)	1:A:96:GLY:H	1:A:97:GLN:H	18	0.25
(4,5)	1:A:26:CYS:CB	1:A:43:GLY:H	19	0.24
(3,8)	1:A:21:GLY:O	1:A:25:ALA:N	8	0.24
(3,58)	1:A:88:ASN:O	1:A:92:PHE:N	8	0.24
(3,58)	1:A:88:ASN:O	1:A:92:PHE:N	11	0.24
(3,58)	1:A:88:ASN:O	1:A:92:PHE:N	12	0.24
(3,57)	1:A:87:ASN:O	1:A:91:LEU:N	9	0.24
(3,57)	1:A:87:ASN:O	1:A:91:LEU:N	15	0.24
(3,56)	1:A:86:CYS:O	1:A:90:TRP:N	8	0.24
(3,54)	1:A:84:GLU:O	1:A:88:ASN:N	2	0.24
(3,54)	1:A:84:GLU:O	1:A:88:ASN:N	4	0.24
(3,54)	1:A:84:GLU:O	1:A:88:ASN:N	10	0.24
(3,54)	1:A:84:GLU:O	1:A:88:ASN:N	13	0.24
(3,51)	1:A:81:VAL:O	1:A:85:LYS:N	20	0.24
(3,42)	1:A:72:SER:O	1:A:76:TYR:N	10	0.24
(3,4)	1:A:9:VAL:O	1:A:13:VAL:N	13	0.24
(3,39)	1:A:69:VAL:O	1:A:73:VAL:N	15	0.24
(3,30)	1:A:49:GLN:O	1:A:53:GLN:N	19	0.24
(3,3)	1:A:8:ARG:O	1:A:12:ALA:N	10	0.24
(3,29)	1:A:48:LEU:O	1:A:52:ILE:N	3	0.24
(3,29)	1:A:48:LEU:O	1:A:52:ILE:N	20	0.24
(3,28)	1:A:47:GLY:O	1:A:51:PHE:N	10	0.24
(3,25)	1:A:44:MET:O	1:A:48:LEU:N	6	0.24
(3,25)	1:A:44:MET:O	1:A:48:LEU:N	15	0.24
(3,24)	1:A:43:GLY:O	1:A:47:GLY:N	10	0.24
(3,21)	1:A:34:GLY:O	1:A:38:PHE:N	14	0.24
(3,20)	1:A:33:LYS:O	1:A:37:THR:N	7	0.24
(3,20)	1:A:33:LYS:O	1:A:37:THR:N	14	0.24
(3,20)	1:A:33:LYS:O	1:A:37:THR:N	19	0.24
(3,18)	1:A:31:PHE:O	1:A:35:VAL:N	15	0.24
(3,17)	1:A:30:ALA:O	1:A:34:GLY:N	4	0.24
(3,13)	1:A:26:CYS:O	1:A:30:ALA:N	3	0.24
(3,13)	1:A:26:CYS:O	1:A:30:ALA:N	10	0.24
(3,13)	1:A:26:CYS:O	1:A:30:ALA:N	12	0.24
(3,13)	1:A:26:CYS:O	1:A:30:ALA:N	15	0.24
(3,1)	1:A:6:LEU:O	1:A:10:ASP:N	6	0.24
(1,67)	1:A:42:THR:H	1:A:43:GLY:H	19	0.24

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,63)	1:A:43:GLY:H	1:A:42:THR:H	19	0.24
(1,5)	1:A:6:LEU:H	1:A:7:SER:H	6	0.24
(1,3)	1:A:7:SER:H	1:A:6:LEU:H	6	0.24
(1,19)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:HIS:H	1	0.24
(1,18)	1:A:17:HIS:H	1:A:16:LYS:H	1	0.24
(1,141)	1:A:95:THR:H	1:A:96:GLY:H	8	0.24
(1,139)	1:A:96:GLY:H	1:A:95:THR:H	8	0.24
(4,203)	1:A:86:CYS:CB	1:A:31:PHE:H	9	0.23
(3,60)	1:A:90:TRP:O	1:A:94:GLU:N	15	0.23
(3,57)	1:A:87:ASN:O	1:A:91:LEU:N	16	0.23
(3,57)	1:A:87:ASN:O	1:A:91:LEU:N	20	0.23
(3,56)	1:A:86:CYS:O	1:A:90:TRP:N	6	0.23
(3,54)	1:A:84:GLU:O	1:A:88:ASN:N	15	0.23
(3,51)	1:A:81:VAL:O	1:A:85:LYS:N	2	0.23
(3,51)	1:A:81:VAL:O	1:A:85:LYS:N	18	0.23
(3,43)	1:A:73:VAL:O	1:A:77:GLY:N	14	0.23
(3,42)	1:A:72:SER:O	1:A:76:TYR:N	5	0.23
(3,4)	1:A:9:VAL:O	1:A:13:VAL:N	1	0.23
(3,4)	1:A:9:VAL:O	1:A:13:VAL:N	4	0.23
(3,25)	1:A:44:MET:O	1:A:48:LEU:N	5	0.23
(3,23)	1:A:36:PHE:O	1:A:40:THR:N	1	0.23
(3,23)	1:A:36:PHE:O	1:A:40:THR:N	5	0.23
(3,23)	1:A:36:PHE:O	1:A:40:THR:N	15	0.23
(3,21)	1:A:34:GLY:O	1:A:38:PHE:N	9	0.23
(3,21)	1:A:34:GLY:O	1:A:38:PHE:N	11	0.23
(3,21)	1:A:34:GLY:O	1:A:38:PHE:N	17	0.23
(3,21)	1:A:34:GLY:O	1:A:38:PHE:N	20	0.23
(3,20)	1:A:33:LYS:O	1:A:37:THR:N	4	0.23
(3,20)	1:A:33:LYS:O	1:A:37:THR:N	12	0.23
(3,20)	1:A:33:LYS:O	1:A:37:THR:N	16	0.23
(3,2)	1:A:7:SER:O	1:A:11:ASP:N	1	0.23
(3,16)	1:A:29:HIS:O	1:A:33:LYS:N	11	0.23
(3,16)	1:A:29:HIS:O	1:A:33:LYS:N	18	0.23
(3,16)	1:A:29:HIS:O	1:A:33:LYS:N	19	0.23
(3,13)	1:A:26:CYS:O	1:A:30:ALA:N	5	0.23
(3,13)	1:A:26:CYS:O	1:A:30:ALA:N	7	0.23
(3,12)	1:A:25:ALA:O	1:A:29:HIS:N	17	0.23
(3,11)	1:A:24:ALA:O	1:A:28:SER:N	1	0.23
(3,1)	1:A:6:LEU:O	1:A:10:ASP:N	8	0.23
(1,85)	1:A:56:PHE:H	1:A:55:LYS:H	2	0.23
(1,84)	1:A:55:LYS:H	1:A:56:PHE:H	2	0.23
(1,67)	1:A:42:THR:H	1:A:43:GLY:H	4	0.23

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,63)	1:A:43:GLY:H	1:A:42:THR:H	4	0.23
(1,142)	1:A:97:GLN:H	1:A:96:GLY:H	1	0.23
(1,142)	1:A:97:GLN:H	1:A:96:GLY:H	10	0.23
(1,140)	1:A:96:GLY:H	1:A:97:GLN:H	1	0.23
(1,140)	1:A:96:GLY:H	1:A:97:GLN:H	10	0.23
(3,8)	1:A:21:GLY:O	1:A:25:ALA:N	6	0.22
(3,57)	1:A:87:ASN:O	1:A:91:LEU:N	7	0.22
(3,57)	1:A:87:ASN:O	1:A:91:LEU:N	11	0.22
(3,28)	1:A:47:GLY:O	1:A:51:PHE:N	12	0.22
(3,26)	1:A:45:ALA:O	1:A:49:GLN:N	8	0.22
(3,24)	1:A:43:GLY:O	1:A:47:GLY:N	13	0.22
(3,23)	1:A:36:PHE:O	1:A:40:THR:N	18	0.22
(3,22)	1:A:35:VAL:O	1:A:39:VAL:N	13	0.22
(3,21)	1:A:34:GLY:O	1:A:38:PHE:N	2	0.22
(3,21)	1:A:34:GLY:O	1:A:38:PHE:N	18	0.22
(3,20)	1:A:33:LYS:O	1:A:37:THR:N	2	0.22
(3,19)	1:A:32:MET:O	1:A:36:PHE:N	18	0.22
(3,17)	1:A:30:ALA:O	1:A:34:GLY:N	5	0.22
(3,16)	1:A:29:HIS:O	1:A:33:LYS:N	3	0.22
(3,12)	1:A:25:ALA:O	1:A:29:HIS:N	8	0.22
(1,142)	1:A:97:GLN:H	1:A:96:GLY:H	16	0.22
(1,140)	1:A:96:GLY:H	1:A:97:GLN:H	16	0.22
(4,130)	1:A:56:PHE:CB	1:A:41:GLY:H	16	0.21
(4,129)	1:A:56:PHE:CB	1:A:40:THR:H	16	0.21
(3,8)	1:A:21:GLY:O	1:A:25:ALA:N	1	0.21
(3,7)	1:A:20:LEU:O	1:A:24:ALA:N	18	0.21
(3,60)	1:A:90:TRP:O	1:A:94:GLU:N	3	0.21
(3,60)	1:A:90:TRP:O	1:A:94:GLU:N	8	0.21
(3,6)	1:A:11:ASP:O	1:A:15:ALA:N	6	0.21
(3,6)	1:A:11:ASP:O	1:A:15:ALA:N	14	0.21
(3,58)	1:A:88:ASN:O	1:A:92:PHE:N	15	0.21
(3,58)	1:A:88:ASN:O	1:A:92:PHE:N	19	0.21
(3,54)	1:A:84:GLU:O	1:A:88:ASN:N	16	0.21
(3,54)	1:A:84:GLU:O	1:A:88:ASN:N	17	0.21
(3,46)	1:A:76:TYR:O	1:A:80:ARG:N	12	0.21
(3,39)	1:A:69:VAL:O	1:A:73:VAL:N	20	0.21
(3,3)	1:A:8:ARG:O	1:A:12:ALA:N	5	0.21
(3,25)	1:A:44:MET:O	1:A:48:LEU:N	1	0.21
(3,24)	1:A:43:GLY:O	1:A:47:GLY:N	19	0.21
(3,21)	1:A:34:GLY:O	1:A:38:PHE:N	3	0.21
(3,21)	1:A:34:GLY:O	1:A:38:PHE:N	12	0.21
(3,20)	1:A:33:LYS:O	1:A:37:THR:N	1	0.21

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,19)	1:A:32:MET:O	1:A:36:PHE:N	20	0.21
(3,17)	1:A:30:ALA:O	1:A:34:GLY:N	17	0.21
(3,13)	1:A:26:CYS:O	1:A:30:ALA:N	13	0.21
(3,12)	1:A:25:ALA:O	1:A:29:HIS:N	3	0.21
(3,11)	1:A:24:ALA:O	1:A:28:SER:N	2	0.21
(4,5)	1:A:26:CYS:CB	1:A:43:GLY:H	20	0.2
(4,201)	1:A:86:CYS:CB	1:A:27:GLN:H	5	0.2
(4,200)	1:A:86:CYS:CB	1:A:26:CYS:H	15	0.2
(4,130)	1:A:56:PHE:CB	1:A:41:GLY:H	15	0.2
(3,9)	1:A:22:GLU:O	1:A:26:CYS:N	5	0.2
(3,8)	1:A:21:GLY:O	1:A:25:ALA:N	3	0.2
(3,58)	1:A:88:ASN:O	1:A:92:PHE:N	1	0.2
(3,58)	1:A:88:ASN:O	1:A:92:PHE:N	7	0.2
(3,58)	1:A:88:ASN:O	1:A:92:PHE:N	17	0.2
(3,57)	1:A:87:ASN:O	1:A:91:LEU:N	4	0.2
(3,57)	1:A:87:ASN:O	1:A:91:LEU:N	13	0.2
(3,42)	1:A:72:SER:O	1:A:76:TYR:N	19	0.2
(3,4)	1:A:9:VAL:O	1:A:13:VAL:N	5	0.2
(3,4)	1:A:9:VAL:O	1:A:13:VAL:N	7	0.2
(3,4)	1:A:9:VAL:O	1:A:13:VAL:N	11	0.2
(3,30)	1:A:49:GLN:O	1:A:53:GLN:N	8	0.2
(3,30)	1:A:49:GLN:O	1:A:53:GLN:N	20	0.2
(3,28)	1:A:47:GLY:O	1:A:51:PHE:N	1	0.2
(3,28)	1:A:47:GLY:O	1:A:51:PHE:N	11	0.2
(3,25)	1:A:44:MET:O	1:A:48:LEU:N	12	0.2
(3,24)	1:A:43:GLY:O	1:A:47:GLY:N	2	0.2
(3,24)	1:A:43:GLY:O	1:A:47:GLY:N	11	0.2
(3,24)	1:A:43:GLY:O	1:A:47:GLY:N	14	0.2
(3,23)	1:A:36:PHE:O	1:A:40:THR:N	20	0.2
(3,21)	1:A:34:GLY:O	1:A:38:PHE:N	16	0.2
(3,20)	1:A:33:LYS:O	1:A:37:THR:N	18	0.2
(3,19)	1:A:32:MET:O	1:A:36:PHE:N	8	0.2
(3,15)	1:A:28:SER:O	1:A:32:MET:N	8	0.2
(1,19)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:HIS:H	15	0.2
(1,19)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:HIS:H	19	0.2
(1,18)	1:A:17:HIS:H	1:A:16:LYS:H	15	0.2
(1,18)	1:A:17:HIS:H	1:A:16:LYS:H	19	0.2
(1,142)	1:A:97:GLN:H	1:A:96:GLY:H	3	0.2
(1,141)	1:A:95:THR:H	1:A:96:GLY:H	18	0.2
(1,140)	1:A:96:GLY:H	1:A:97:GLN:H	3	0.2
(1,139)	1:A:96:GLY:H	1:A:95:THR:H	18	0.2
(3,53)	1:A:83:SER:O	1:A:87:ASN:N	4	0.19

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,53)	1:A:83:SER:O	1:A:87:ASN:N	11	0.19
(3,53)	1:A:83:SER:O	1:A:87:ASN:N	20	0.19
(3,51)	1:A:81:VAL:O	1:A:85:LYS:N	11	0.19
(3,46)	1:A:76:TYR:O	1:A:80:ARG:N	16	0.19
(3,43)	1:A:73:VAL:O	1:A:77:GLY:N	4	0.19
(3,42)	1:A:72:SER:O	1:A:76:TYR:N	1	0.19
(3,35)	1:A:65:LEU:O	1:A:69:VAL:N	10	0.19
(3,30)	1:A:49:GLN:O	1:A:53:GLN:N	3	0.19
(3,28)	1:A:47:GLY:O	1:A:51:PHE:N	2	0.19
(3,28)	1:A:47:GLY:O	1:A:51:PHE:N	13	0.19
(3,27)	1:A:46:PHE:O	1:A:50:MET:N	15	0.19
(3,24)	1:A:43:GLY:O	1:A:47:GLY:N	18	0.19
(3,23)	1:A:36:PHE:O	1:A:40:THR:N	16	0.19
(3,23)	1:A:36:PHE:O	1:A:40:THR:N	19	0.19
(3,21)	1:A:34:GLY:O	1:A:38:PHE:N	1	0.19
(3,21)	1:A:34:GLY:O	1:A:38:PHE:N	13	0.19
(3,20)	1:A:33:LYS:O	1:A:37:THR:N	13	0.19
(3,16)	1:A:29:HIS:O	1:A:33:LYS:N	9	0.19
(3,11)	1:A:24:ALA:O	1:A:28:SER:N	8	0.19
(3,1)	1:A:6:LEU:O	1:A:10:ASP:N	12	0.19
(3,1)	1:A:6:LEU:O	1:A:10:ASP:N	20	0.19
(1,151)	1:A:97:GLN:H	1:A:98:LEU:H	7	0.19
(4,129)	1:A:56:PHE:CB	1:A:40:THR:H	18	0.18
(3,9)	1:A:22:GLU:O	1:A:26:CYS:N	2	0.18
(3,8)	1:A:21:GLY:O	1:A:25:ALA:N	4	0.18
(3,8)	1:A:21:GLY:O	1:A:25:ALA:N	17	0.18
(3,60)	1:A:90:TRP:O	1:A:94:GLU:N	16	0.18
(3,6)	1:A:11:ASP:O	1:A:15:ALA:N	13	0.18
(3,6)	1:A:11:ASP:O	1:A:15:ALA:N	15	0.18
(3,58)	1:A:88:ASN:O	1:A:92:PHE:N	18	0.18
(3,57)	1:A:87:ASN:O	1:A:91:LEU:N	1	0.18
(3,5)	1:A:10:ASP:O	1:A:14:ALA:N	6	0.18
(3,42)	1:A:72:SER:O	1:A:76:TYR:N	12	0.18
(3,4)	1:A:9:VAL:O	1:A:13:VAL:N	19	0.18
(3,25)	1:A:44:MET:O	1:A:48:LEU:N	7	0.18
(3,23)	1:A:36:PHE:O	1:A:40:THR:N	11	0.18
(3,22)	1:A:35:VAL:O	1:A:39:VAL:N	20	0.18
(3,21)	1:A:34:GLY:O	1:A:38:PHE:N	8	0.18
(3,17)	1:A:30:ALA:O	1:A:34:GLY:N	3	0.18
(3,16)	1:A:29:HIS:O	1:A:33:LYS:N	17	0.18
(3,14)	1:A:27:GLN:O	1:A:31:PHE:N	12	0.18
(3,12)	1:A:25:ALA:O	1:A:29:HIS:N	15	0.18

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,12)	1:A:25:ALA:O	1:A:29:HIS:N	20	0.18
(3,11)	1:A:24:ALA:O	1:A:28:SER:N	11	0.18
(3,11)	1:A:24:ALA:O	1:A:28:SER:N	13	0.18
(1,151)	1:A:97:GLN:H	1:A:98:LEU:H	8	0.18
(1,141)	1:A:95:THR:H	1:A:96:GLY:H	5	0.18
(1,139)	1:A:96:GLY:H	1:A:95:THR:H	5	0.18
(4,201)	1:A:86:CYS:CB	1:A:27:GLN:H	19	0.17
(3,6)	1:A:11:ASP:O	1:A:15:ALA:N	1	0.17
(3,6)	1:A:11:ASP:O	1:A:15:ALA:N	9	0.17
(3,59)	1:A:89:LEU:O	1:A:93:LEU:N	14	0.17
(3,53)	1:A:83:SER:O	1:A:87:ASN:N	19	0.17
(3,5)	1:A:10:ASP:O	1:A:14:ALA:N	13	0.17
(3,43)	1:A:73:VAL:O	1:A:77:GLY:N	20	0.17
(3,42)	1:A:72:SER:O	1:A:76:TYR:N	4	0.17
(3,4)	1:A:9:VAL:O	1:A:13:VAL:N	15	0.17
(3,35)	1:A:65:LEU:O	1:A:69:VAL:N	5	0.17
(3,3)	1:A:8:ARG:O	1:A:12:ALA:N	12	0.17
(3,3)	1:A:8:ARG:O	1:A:12:ALA:N	16	0.17
(3,3)	1:A:8:ARG:O	1:A:12:ALA:N	17	0.17
(3,2)	1:A:7:SER:O	1:A:11:ASP:N	14	0.17
(3,2)	1:A:7:SER:O	1:A:11:ASP:N	19	0.17
(3,19)	1:A:32:MET:O	1:A:36:PHE:N	14	0.17
(3,15)	1:A:28:SER:O	1:A:32:MET:N	1	0.17
(3,15)	1:A:28:SER:O	1:A:32:MET:N	13	0.17
(3,1)	1:A:6:LEU:O	1:A:10:ASP:N	9	0.17
(3,1)	1:A:6:LEU:O	1:A:10:ASP:N	16	0.17
(1,19)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:HIS:H	17	0.17
(1,18)	1:A:17:HIS:H	1:A:16:LYS:H	17	0.17
(1,142)	1:A:97:GLN:H	1:A:96:GLY:H	4	0.17
(1,140)	1:A:96:GLY:H	1:A:97:GLN:H	4	0.17
(4,61)	1:A:49:GLN:CB	1:A:34:GLY:H	9	0.16
(4,5)	1:A:26:CYS:CB	1:A:43:GLY:H	16	0.16
(3,9)	1:A:22:GLU:O	1:A:26:CYS:N	13	0.16
(3,9)	1:A:22:GLU:O	1:A:26:CYS:N	14	0.16
(3,7)	1:A:20:LEU:O	1:A:24:ALA:N	13	0.16
(3,60)	1:A:90:TRP:O	1:A:94:GLU:N	11	0.16
(3,6)	1:A:11:ASP:O	1:A:15:ALA:N	5	0.16
(3,58)	1:A:88:ASN:O	1:A:92:PHE:N	3	0.16
(3,58)	1:A:88:ASN:O	1:A:92:PHE:N	6	0.16
(3,58)	1:A:88:ASN:O	1:A:92:PHE:N	14	0.16
(3,56)	1:A:86:CYS:O	1:A:90:TRP:N	4	0.16
(3,56)	1:A:86:CYS:O	1:A:90:TRP:N	5	0.16

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,56)	1:A:86:CYS:O	1:A:90:TRP:N	13	0.16
(3,5)	1:A:10:ASP:O	1:A:14:ALA:N	8	0.16
(3,33)	1:A:63:SER:O	1:A:67:ALA:N	6	0.16
(3,33)	1:A:63:SER:O	1:A:67:ALA:N	7	0.16
(3,33)	1:A:63:SER:O	1:A:67:ALA:N	8	0.16
(3,33)	1:A:63:SER:O	1:A:67:ALA:N	16	0.16
(3,3)	1:A:8:ARG:O	1:A:12:ALA:N	2	0.16
(3,3)	1:A:8:ARG:O	1:A:12:ALA:N	7	0.16
(3,24)	1:A:43:GLY:O	1:A:47:GLY:N	4	0.16
(3,23)	1:A:36:PHE:O	1:A:40:THR:N	17	0.16
(3,22)	1:A:35:VAL:O	1:A:39:VAL:N	5	0.16
(3,21)	1:A:34:GLY:O	1:A:38:PHE:N	6	0.16
(3,21)	1:A:34:GLY:O	1:A:38:PHE:N	15	0.16
(3,20)	1:A:33:LYS:O	1:A:37:THR:N	3	0.16
(3,19)	1:A:32:MET:O	1:A:36:PHE:N	1	0.16
(3,17)	1:A:30:ALA:O	1:A:34:GLY:N	15	0.16
(3,15)	1:A:28:SER:O	1:A:32:MET:N	10	0.16
(3,14)	1:A:27:GLN:O	1:A:31:PHE:N	9	0.16
(3,13)	1:A:26:CYS:O	1:A:30:ALA:N	6	0.16
(3,13)	1:A:26:CYS:O	1:A:30:ALA:N	20	0.16
(3,1)	1:A:6:LEU:O	1:A:10:ASP:N	17	0.16
(3,57)	1:A:87:ASN:O	1:A:91:LEU:N	12	0.15
(3,57)	1:A:87:ASN:O	1:A:91:LEU:N	14	0.15
(3,56)	1:A:86:CYS:O	1:A:90:TRP:N	3	0.15
(3,56)	1:A:86:CYS:O	1:A:90:TRP:N	11	0.15
(3,56)	1:A:86:CYS:O	1:A:90:TRP:N	16	0.15
(3,5)	1:A:10:ASP:O	1:A:14:ALA:N	1	0.15
(3,46)	1:A:76:TYR:O	1:A:80:ARG:N	5	0.15
(3,46)	1:A:76:TYR:O	1:A:80:ARG:N	9	0.15
(3,42)	1:A:72:SER:O	1:A:76:TYR:N	3	0.15
(3,35)	1:A:65:LEU:O	1:A:69:VAL:N	11	0.15
(3,33)	1:A:63:SER:O	1:A:67:ALA:N	11	0.15
(3,32)	1:A:62:TRP:O	1:A:66:VAL:N	7	0.15
(3,3)	1:A:8:ARG:O	1:A:12:ALA:N	15	0.15
(3,29)	1:A:48:LEU:O	1:A:52:ILE:N	13	0.15
(3,28)	1:A:47:GLY:O	1:A:51:PHE:N	4	0.15
(3,28)	1:A:47:GLY:O	1:A:51:PHE:N	16	0.15
(3,28)	1:A:47:GLY:O	1:A:51:PHE:N	19	0.15
(3,19)	1:A:32:MET:O	1:A:36:PHE:N	4	0.15
(3,19)	1:A:32:MET:O	1:A:36:PHE:N	11	0.15
(3,19)	1:A:32:MET:O	1:A:36:PHE:N	17	0.15
(3,13)	1:A:26:CYS:O	1:A:30:ALA:N	8	0.15

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,12)	1:A:25:ALA:O	1:A:29:HIS:N	5	0.15
(3,12)	1:A:25:ALA:O	1:A:29:HIS:N	12	0.15
(3,11)	1:A:24:ALA:O	1:A:28:SER:N	10	0.15
(1,149)	1:A:104:THR:H	1:A:103:SER:H	10	0.15
(1,148)	1:A:103:SER:H	1:A:104:THR:H	10	0.15
(1,141)	1:A:95:THR:H	1:A:96:GLY:H	7	0.15
(1,139)	1:A:96:GLY:H	1:A:95:THR:H	7	0.15
(3,8)	1:A:21:GLY:O	1:A:25:ALA:N	5	0.14
(3,7)	1:A:20:LEU:O	1:A:24:ALA:N	6	0.14
(3,60)	1:A:90:TRP:O	1:A:94:GLU:N	5	0.14
(3,6)	1:A:11:ASP:O	1:A:15:ALA:N	7	0.14
(3,6)	1:A:11:ASP:O	1:A:15:ALA:N	17	0.14
(3,58)	1:A:88:ASN:O	1:A:92:PHE:N	4	0.14
(3,58)	1:A:88:ASN:O	1:A:92:PHE:N	9	0.14
(3,56)	1:A:86:CYS:O	1:A:90:TRP:N	7	0.14
(3,55)	1:A:85:LYS:O	1:A:89:LEU:N	17	0.14
(3,5)	1:A:10:ASP:O	1:A:14:ALA:N	9	0.14
(3,5)	1:A:10:ASP:O	1:A:14:ALA:N	15	0.14
(3,5)	1:A:10:ASP:O	1:A:14:ALA:N	16	0.14
(3,5)	1:A:10:ASP:O	1:A:14:ALA:N	19	0.14
(3,46)	1:A:76:TYR:O	1:A:80:ARG:N	4	0.14
(3,46)	1:A:76:TYR:O	1:A:80:ARG:N	7	0.14
(3,46)	1:A:76:TYR:O	1:A:80:ARG:N	13	0.14
(3,46)	1:A:76:TYR:O	1:A:80:ARG:N	17	0.14
(3,46)	1:A:76:TYR:O	1:A:80:ARG:N	18	0.14
(3,46)	1:A:76:TYR:O	1:A:80:ARG:N	19	0.14
(3,42)	1:A:72:SER:O	1:A:76:TYR:N	8	0.14
(3,42)	1:A:72:SER:O	1:A:76:TYR:N	16	0.14
(3,33)	1:A:63:SER:O	1:A:67:ALA:N	9	0.14
(3,32)	1:A:62:TRP:O	1:A:66:VAL:N	11	0.14
(3,3)	1:A:8:ARG:O	1:A:12:ALA:N	11	0.14
(3,3)	1:A:8:ARG:O	1:A:12:ALA:N	19	0.14
(3,23)	1:A:36:PHE:O	1:A:40:THR:N	12	0.14
(3,23)	1:A:36:PHE:O	1:A:40:THR:N	13	0.14
(3,23)	1:A:36:PHE:O	1:A:40:THR:N	14	0.14
(3,19)	1:A:32:MET:O	1:A:36:PHE:N	2	0.14
(3,18)	1:A:31:PHE:O	1:A:35:VAL:N	11	0.14
(3,10)	1:A:23:TYR:O	1:A:27:GLN:N	11	0.14
(3,1)	1:A:6:LEU:O	1:A:10:ASP:N	5	0.14
(1,149)	1:A:104:THR:H	1:A:103:SER:H	6	0.14
(1,148)	1:A:103:SER:H	1:A:104:THR:H	6	0.14
(1,142)	1:A:97:GLN:H	1:A:96:GLY:H	12	0.14

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,140)	1:A:96:GLY:H	1:A:97:GLN:H	12	0.14
(4,130)	1:A:56:PHE:CB	1:A:41:GLY:H	5	0.13
(4,130)	1:A:56:PHE:CB	1:A:41:GLY:H	9	0.13
(4,129)	1:A:56:PHE:CB	1:A:40:THR:H	5	0.13
(4,129)	1:A:56:PHE:CB	1:A:40:THR:H	17	0.13
(3,9)	1:A:22:GLU:O	1:A:26:CYS:N	17	0.13
(3,7)	1:A:20:LEU:O	1:A:24:ALA:N	10	0.13
(3,60)	1:A:90:TRP:O	1:A:94:GLU:N	1	0.13
(3,6)	1:A:11:ASP:O	1:A:15:ALA:N	20	0.13
(3,58)	1:A:88:ASN:O	1:A:92:PHE:N	2	0.13
(3,58)	1:A:88:ASN:O	1:A:92:PHE:N	13	0.13
(3,56)	1:A:86:CYS:O	1:A:90:TRP:N	10	0.13
(3,55)	1:A:85:LYS:O	1:A:89:LEU:N	12	0.13
(3,53)	1:A:83:SER:O	1:A:87:ASN:N	15	0.13
(3,5)	1:A:10:ASP:O	1:A:14:ALA:N	2	0.13
(3,48)	1:A:78:VAL:O	1:A:82:GLU:N	7	0.13
(3,46)	1:A:76:TYR:O	1:A:80:ARG:N	8	0.13
(3,46)	1:A:76:TYR:O	1:A:80:ARG:N	11	0.13
(3,46)	1:A:76:TYR:O	1:A:80:ARG:N	14	0.13
(3,46)	1:A:76:TYR:O	1:A:80:ARG:N	15	0.13
(3,46)	1:A:76:TYR:O	1:A:80:ARG:N	20	0.13
(3,42)	1:A:72:SER:O	1:A:76:TYR:N	11	0.13
(3,42)	1:A:72:SER:O	1:A:76:TYR:N	17	0.13
(3,4)	1:A:9:VAL:O	1:A:13:VAL:N	20	0.13
(3,33)	1:A:63:SER:O	1:A:67:ALA:N	4	0.13
(3,33)	1:A:63:SER:O	1:A:67:ALA:N	5	0.13
(3,33)	1:A:63:SER:O	1:A:67:ALA:N	12	0.13
(3,31)	1:A:50:MET:O	1:A:54:ARG:N	7	0.13
(3,3)	1:A:8:ARG:O	1:A:12:ALA:N	8	0.13
(3,27)	1:A:46:PHE:O	1:A:50:MET:N	7	0.13
(3,27)	1:A:46:PHE:O	1:A:50:MET:N	14	0.13
(3,19)	1:A:32:MET:O	1:A:36:PHE:N	19	0.13
(3,18)	1:A:31:PHE:O	1:A:35:VAL:N	13	0.13
(3,18)	1:A:31:PHE:O	1:A:35:VAL:N	18	0.13
(3,15)	1:A:28:SER:O	1:A:32:MET:N	14	0.13
(3,12)	1:A:25:ALA:O	1:A:29:HIS:N	16	0.13
(3,11)	1:A:24:ALA:O	1:A:28:SER:N	5	0.13
(3,11)	1:A:24:ALA:O	1:A:28:SER:N	19	0.13
(1,141)	1:A:95:THR:H	1:A:96:GLY:H	1	0.13
(1,139)	1:A:96:GLY:H	1:A:95:THR:H	1	0.13
(3,8)	1:A:21:GLY:O	1:A:25:ALA:N	2	0.12
(3,7)	1:A:20:LEU:O	1:A:24:ALA:N	7	0.12

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,7)	1:A:20:LEU:O	1:A:24:ALA:N	14	0.12
(3,56)	1:A:86:CYS:O	1:A:90:TRP:N	2	0.12
(3,56)	1:A:86:CYS:O	1:A:90:TRP:N	14	0.12
(3,5)	1:A:10:ASP:O	1:A:14:ALA:N	14	0.12
(3,5)	1:A:10:ASP:O	1:A:14:ALA:N	18	0.12
(3,5)	1:A:10:ASP:O	1:A:14:ALA:N	20	0.12
(3,46)	1:A:76:TYR:O	1:A:80:ARG:N	6	0.12
(3,42)	1:A:72:SER:O	1:A:76:TYR:N	2	0.12
(3,4)	1:A:9:VAL:O	1:A:13:VAL:N	2	0.12
(3,4)	1:A:9:VAL:O	1:A:13:VAL:N	16	0.12
(3,35)	1:A:65:LEU:O	1:A:69:VAL:N	12	0.12
(3,32)	1:A:62:TRP:O	1:A:66:VAL:N	8	0.12
(3,3)	1:A:8:ARG:O	1:A:12:ALA:N	18	0.12
(3,28)	1:A:47:GLY:O	1:A:51:PHE:N	17	0.12
(3,23)	1:A:36:PHE:O	1:A:40:THR:N	3	0.12
(3,20)	1:A:33:LYS:O	1:A:37:THR:N	8	0.12
(3,18)	1:A:31:PHE:O	1:A:35:VAL:N	16	0.12
(3,16)	1:A:29:HIS:O	1:A:33:LYS:N	16	0.12
(3,15)	1:A:28:SER:O	1:A:32:MET:N	5	0.12
(3,15)	1:A:28:SER:O	1:A:32:MET:N	7	0.12
(3,1)	1:A:6:LEU:O	1:A:10:ASP:N	2	0.12
(1,141)	1:A:95:THR:H	1:A:96:GLY:H	3	0.12
(1,139)	1:A:96:GLY:H	1:A:95:THR:H	3	0.12
(4,5)	1:A:26:CYS:CB	1:A:43:GLY:H	5	0.11
(4,39)	1:A:26:CYS:CB	1:A:88:ASN:H	11	0.11
(3,7)	1:A:20:LEU:O	1:A:24:ALA:N	1	0.11
(3,7)	1:A:20:LEU:O	1:A:24:ALA:N	19	0.11
(3,6)	1:A:11:ASP:O	1:A:15:ALA:N	11	0.11
(3,57)	1:A:87:ASN:O	1:A:91:LEU:N	5	0.11
(3,56)	1:A:86:CYS:O	1:A:90:TRP:N	9	0.11
(3,5)	1:A:10:ASP:O	1:A:14:ALA:N	4	0.11
(3,5)	1:A:10:ASP:O	1:A:14:ALA:N	5	0.11
(3,5)	1:A:10:ASP:O	1:A:14:ALA:N	11	0.11
(3,48)	1:A:78:VAL:O	1:A:82:GLU:N	15	0.11
(3,42)	1:A:72:SER:O	1:A:76:TYR:N	7	0.11
(3,42)	1:A:72:SER:O	1:A:76:TYR:N	13	0.11
(3,4)	1:A:9:VAL:O	1:A:13:VAL:N	6	0.11
(3,4)	1:A:9:VAL:O	1:A:13:VAL:N	9	0.11
(3,4)	1:A:9:VAL:O	1:A:13:VAL:N	17	0.11
(3,33)	1:A:63:SER:O	1:A:67:ALA:N	19	0.11
(3,32)	1:A:62:TRP:O	1:A:66:VAL:N	1	0.11
(3,32)	1:A:62:TRP:O	1:A:66:VAL:N	19	0.11

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,3)	1:A:8:ARG:O	1:A:12:ALA:N	9	0.11
(3,28)	1:A:47:GLY:O	1:A:51:PHE:N	9	0.11
(3,27)	1:A:46:PHE:O	1:A:50:MET:N	3	0.11
(3,23)	1:A:36:PHE:O	1:A:40:THR:N	2	0.11
(3,23)	1:A:36:PHE:O	1:A:40:THR:N	8	0.11
(3,20)	1:A:33:LYS:O	1:A:37:THR:N	20	0.11
(3,2)	1:A:7:SER:O	1:A:11:ASP:N	18	0.11
(3,18)	1:A:31:PHE:O	1:A:35:VAL:N	2	0.11
(3,10)	1:A:23:TYR:O	1:A:27:GLN:N	16	0.11
(3,1)	1:A:6:LEU:O	1:A:10:ASP:N	3	0.11
(1,19)	1:A:16:LYS:H	1:A:17:HIS:H	16	0.11
(1,18)	1:A:17:HIS:H	1:A:16:LYS:H	16	0.11
(1,145)	1:A:100:LYS:H	1:A:101:ASP:H	14	0.11
(1,143)	1:A:101:ASP:H	1:A:100:LYS:H	14	0.11

## 10 Dihedral-angle violation analysis

No dihedral-angle restraints found