



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Jun 4, 2023 – 11:11 PM EDT

PDB ID : 2LQN
BMRB ID : 18321
Title : Solution structure of CRKL
Authors : Jankowski, W.; Saleh, T.; Kalodimos, C.
Deposited on : 2012-03-09

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

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

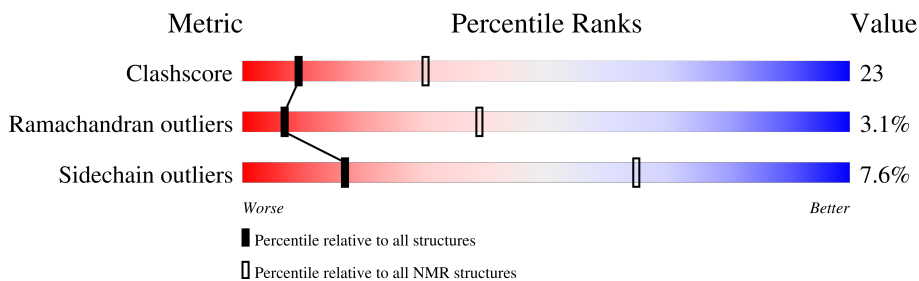
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 58%.

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



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

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	303	

2 Ensemble composition and analysis i

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

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:3-A:104, A:125-A:181 (159)	0.88	14
2	A:237-A:296 (60)	0.81	18

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 and 1 single-model cluster was found.

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 4710 atoms, of which 2326 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Crk-like protein.

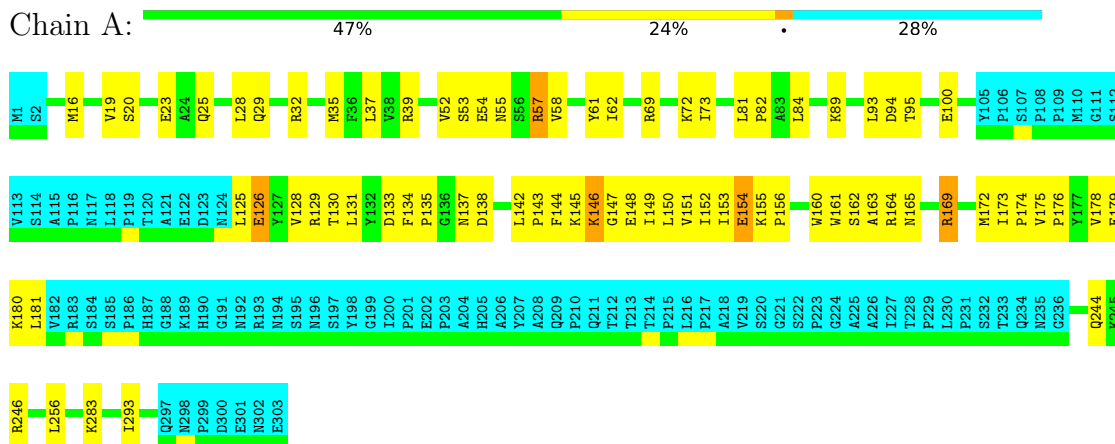
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	303	4710	1504	2326	419	453	8	0

4 Residue-property plots i

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

- Molecule 1: Crk-like protein

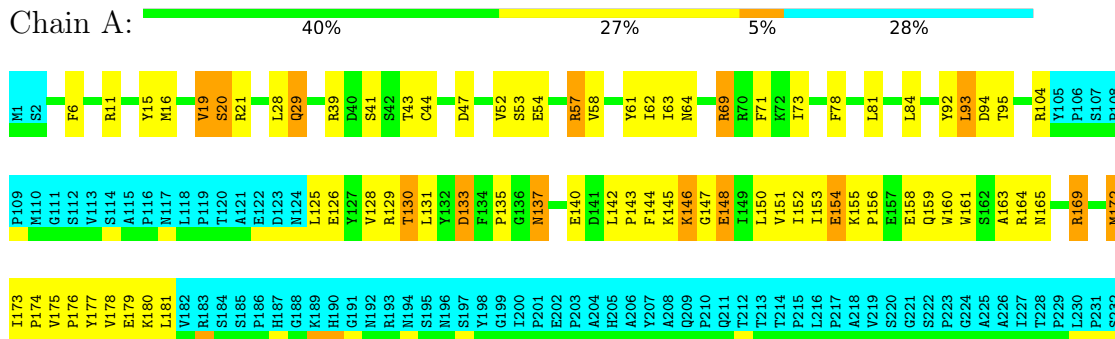


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

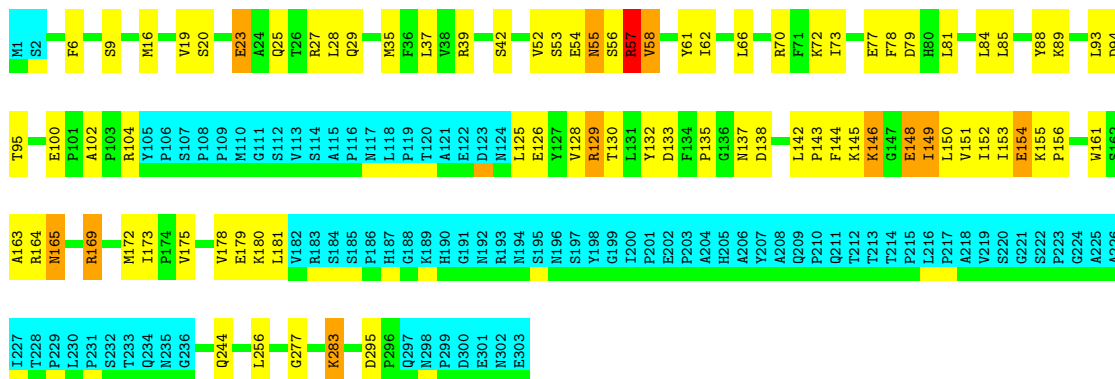
- Molecule 1: Crk-like protein





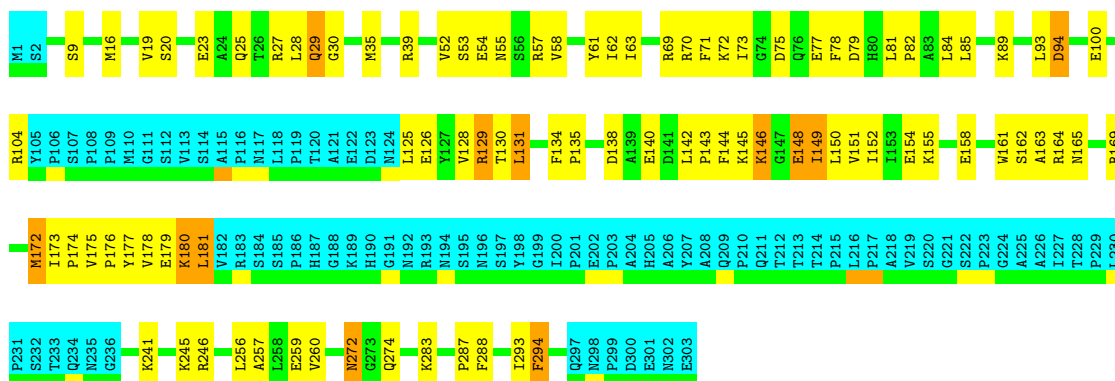
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Crk-like protein



4.2.3 Score per residue for model 3

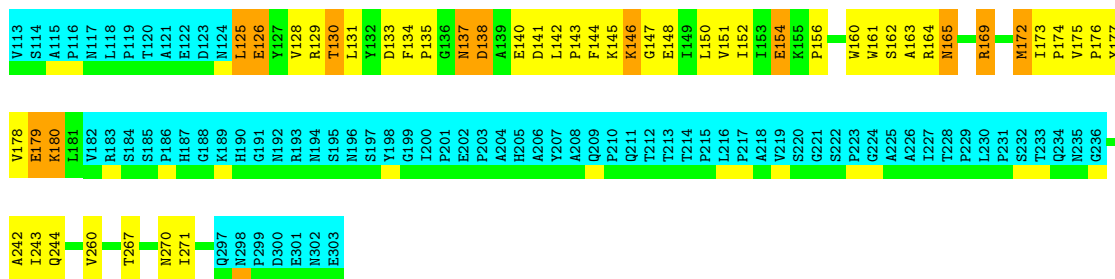
- Molecule 1: Crk-like protein



4.2.4 Score per residue for model 4

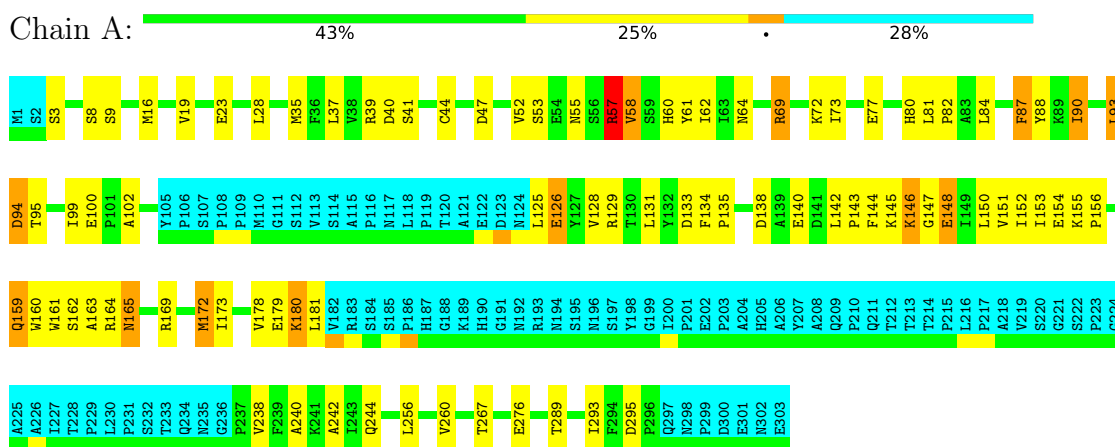
- Molecule 1: Crk-like protein





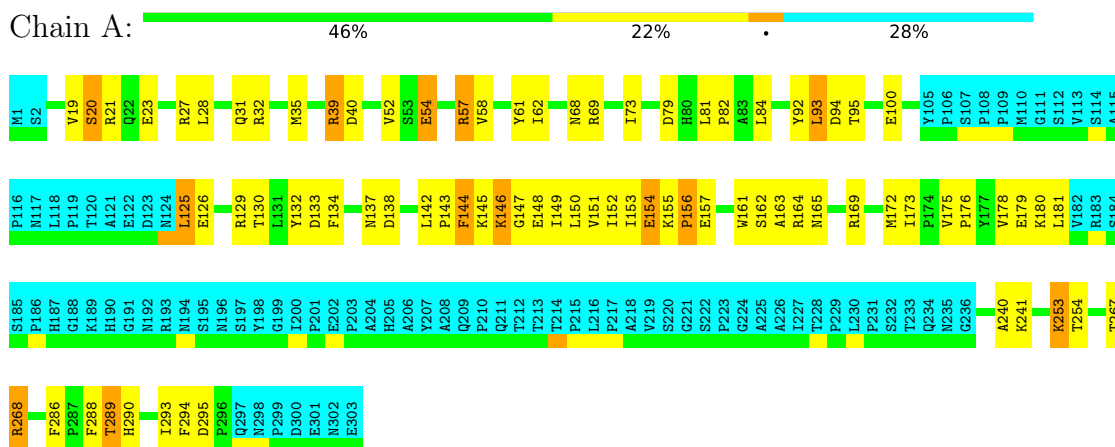
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Crk-like protein



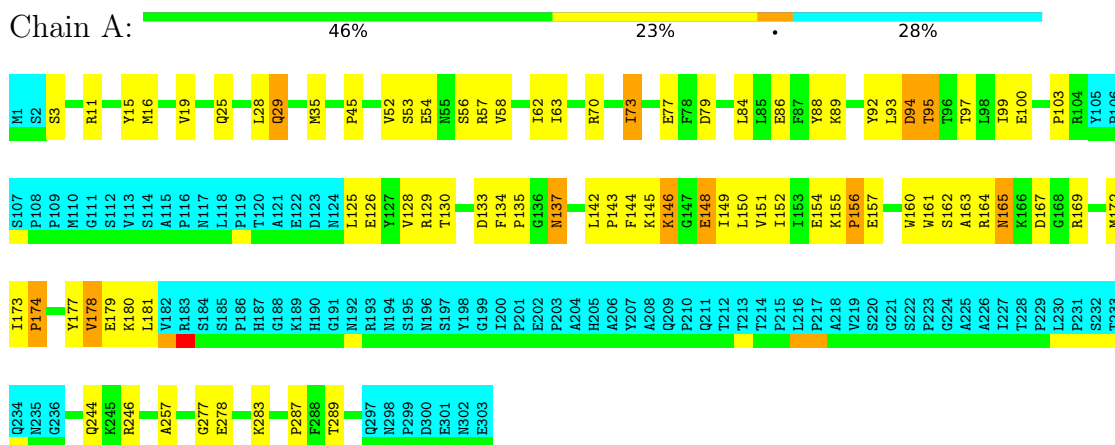
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Crk-like protein



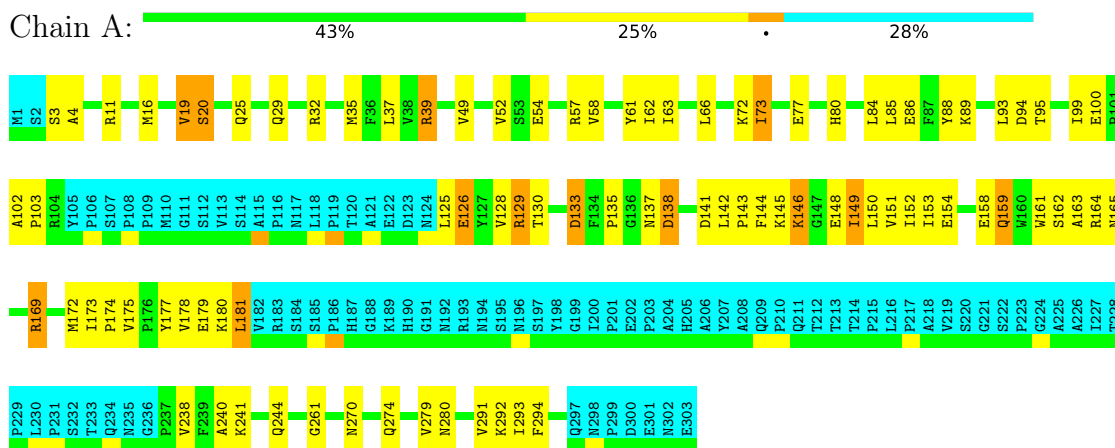
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Crk-like protein



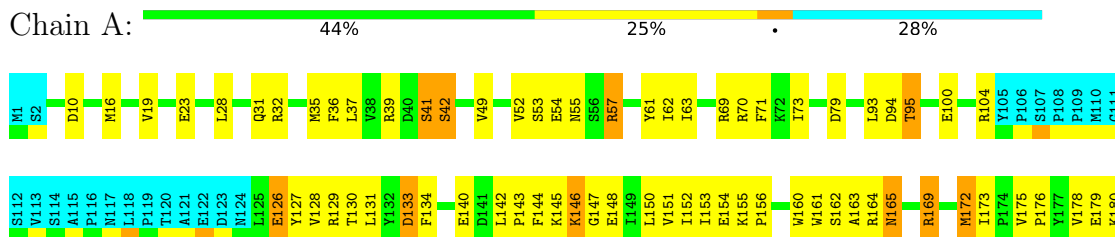
4.2.8 Score per residue for model 8

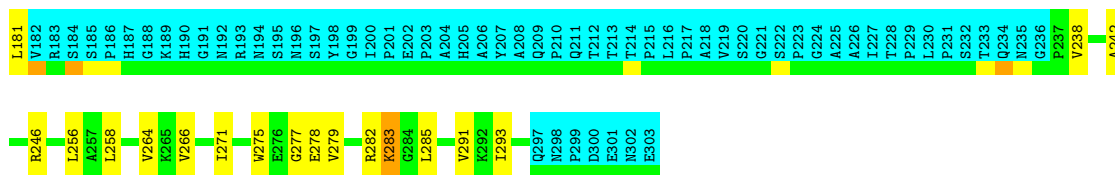
- Molecule 1: Crk-like protein



4.2.9 Score per residue for model 9

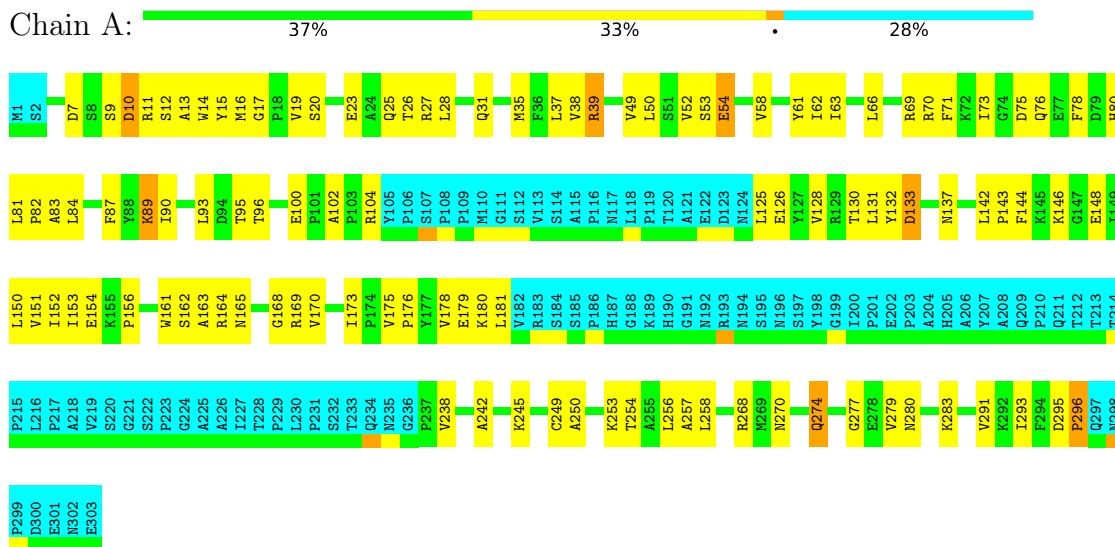
- Molecule 1: Crk-like protein





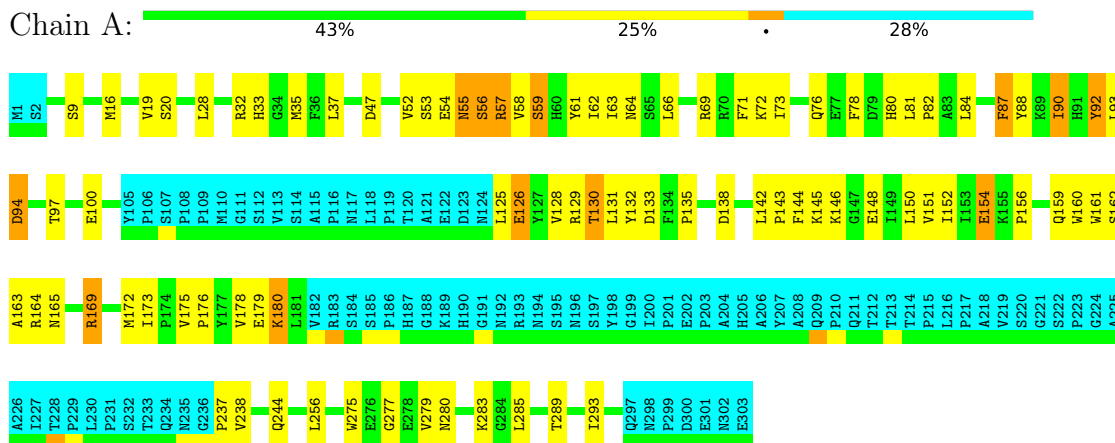
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Crk-like protein



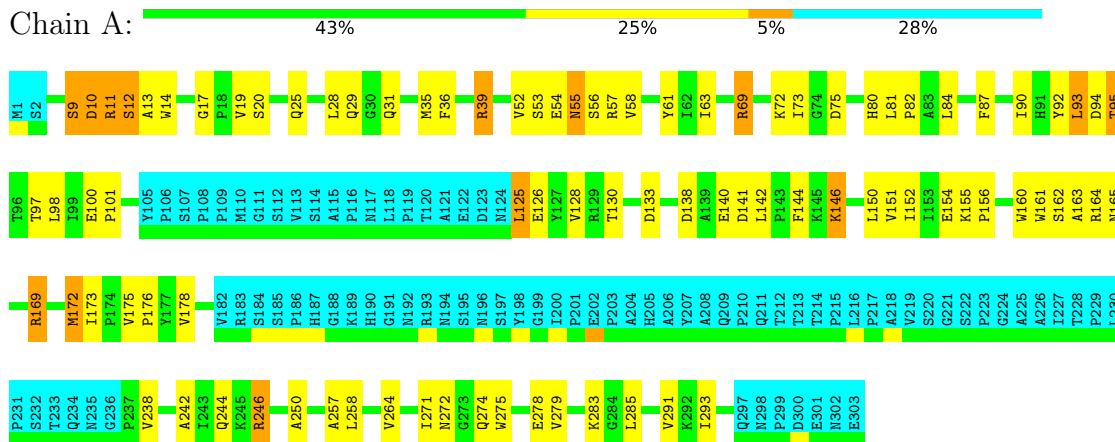
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Crk-like protein



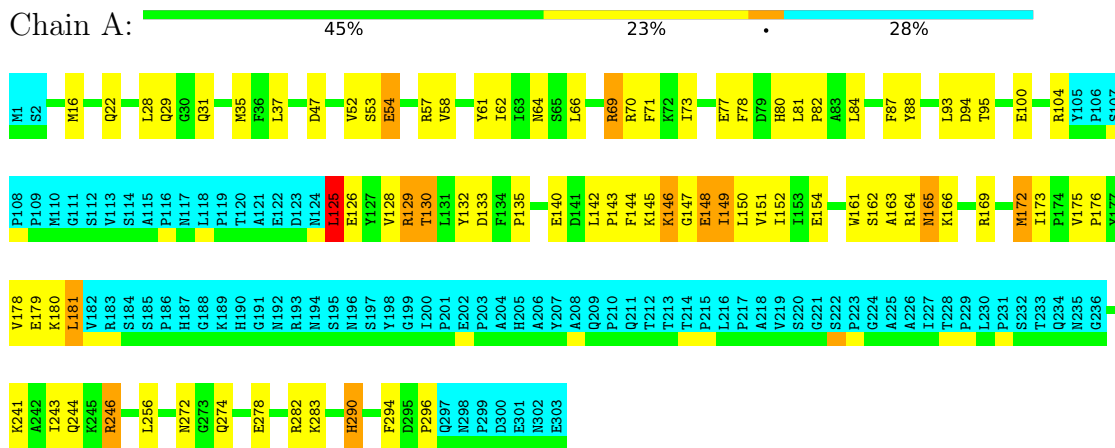
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Crk-like protein



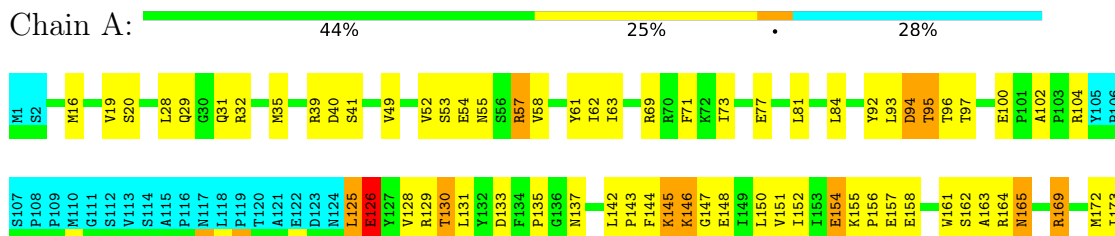
4.2.13 Score per residue for model 13

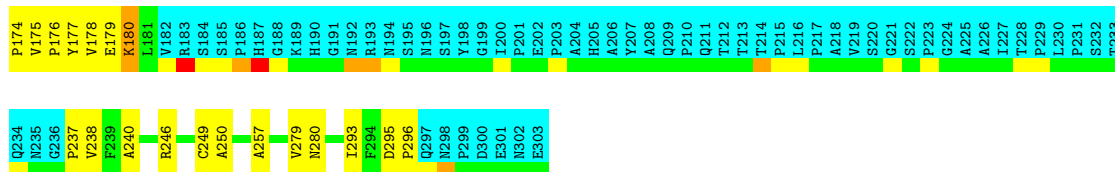
- Molecule 1: Crk-like protein



4.2.14 Score per residue for model 14 (medoid)

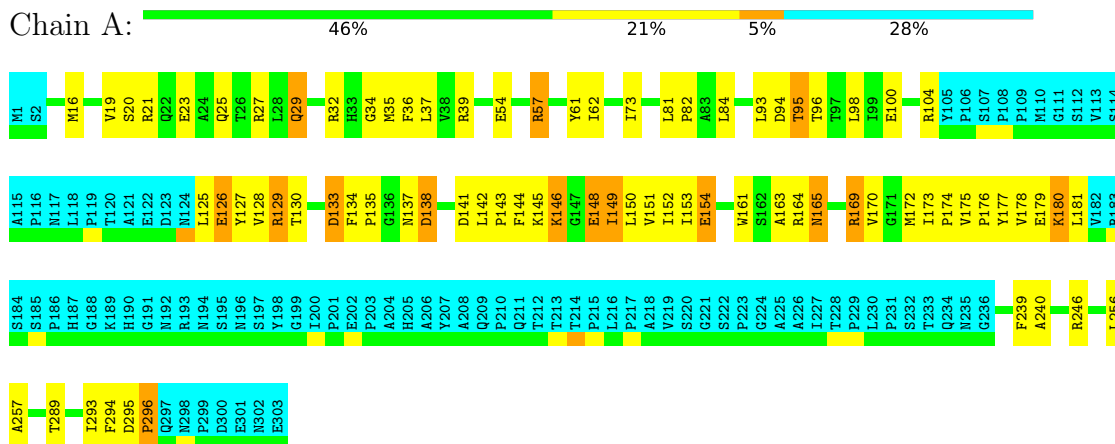
- Molecule 1: Crk-like protein





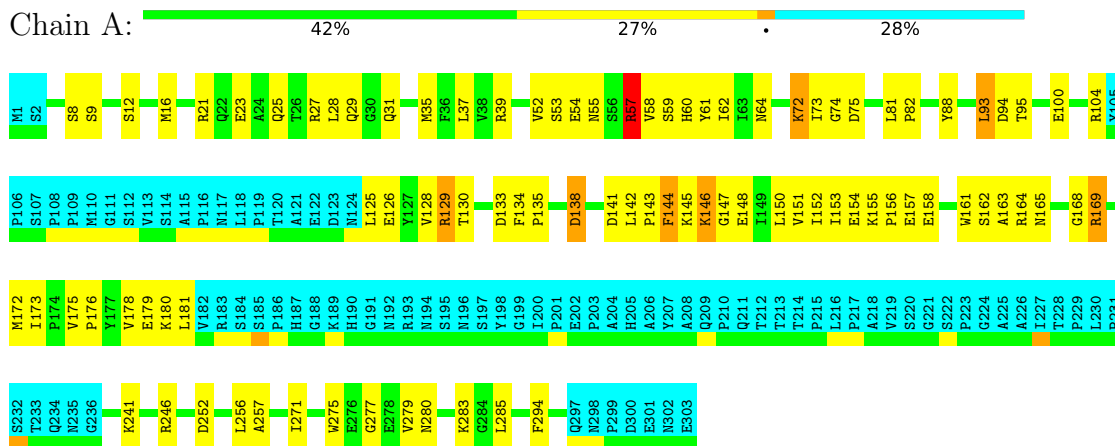
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Crk-like protein



4.2.16 Score per residue for model 16

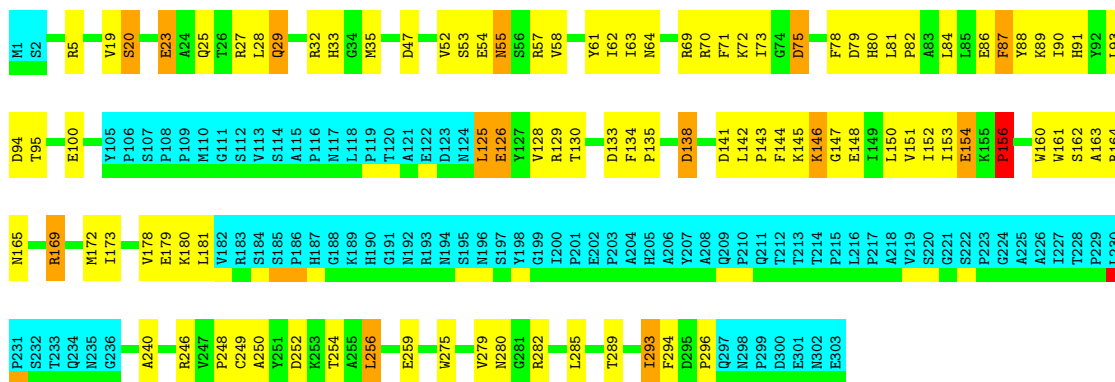
- Molecule 1: Crk-like protein



4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Crk-like protein

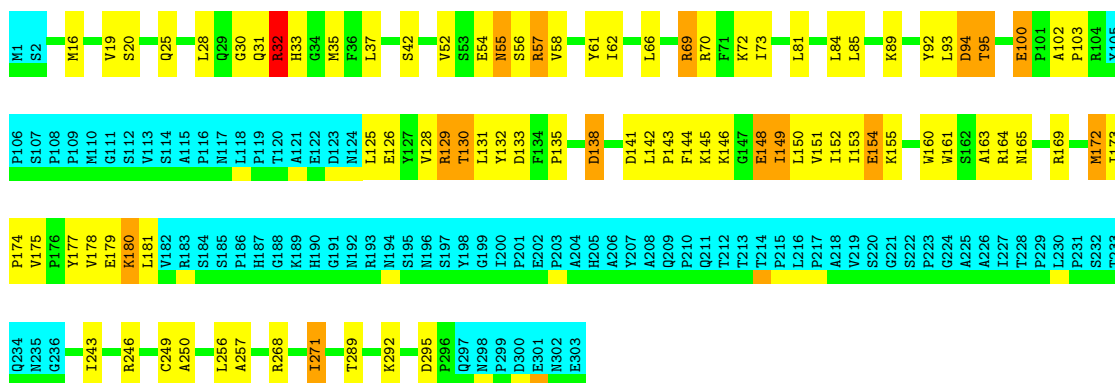




4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Crk-like protein

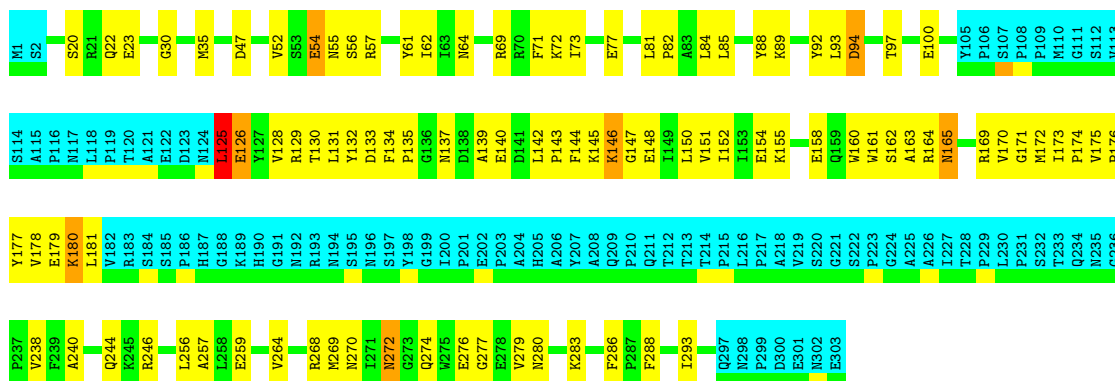
Chain A: 44% 23% 5% 28%



4.2.19 Score per residue for model 19

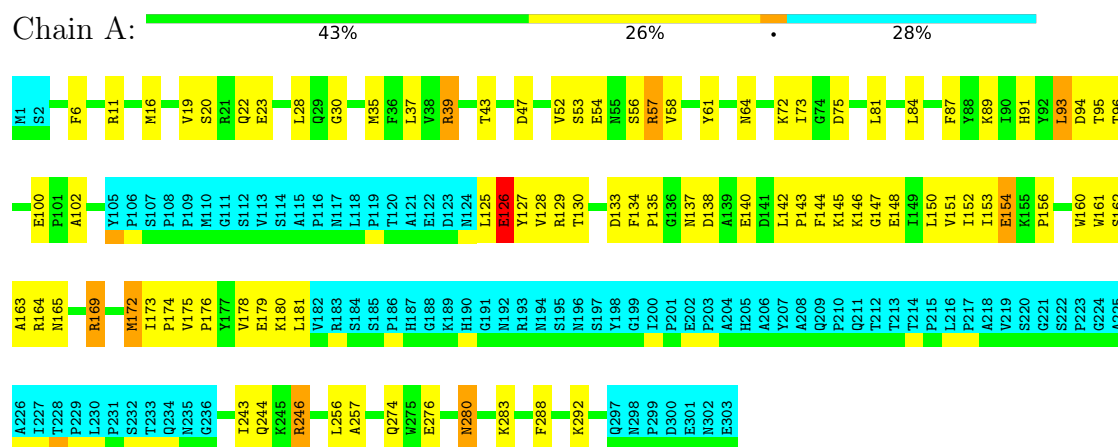
- Molecule 1: Crk-like protein

Chain A: 41% 29% 28%



4.2.20 Score per residue for model 20

● Molecule 1: Crk-like protein



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 400 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
CNS	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	2157
Number of shifts mapped to atoms	2157
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	58%

6 Model quality i

6.1 Standard geometry i

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	0.36±0.01	0±0/1824 (0.0± 0.0%)	0.50±0.02	0±1/2473 (0.0± 0.0%)
All	All	0.36	0/36480 (0.0%)	0.50	5/49460 (0.0%)

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

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	0.3±0.6
All	All	0	6

There are no bond-length outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	57	ARG	N-CA-CB	-6.74	98.47	110.60	5	3
1	A	57	ARG	N-CA-C	5.40	125.57	111.00	5	2

There are no chirality outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	169	ARG	Sidechain	2
1	A	178	VAL	Peptide	1
1	A	56	SER	Peptide	1
1	A	9	SER	Peptide	1
1	A	32	ARG	Sidechain	1

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	1776	1759	1754	80±7
All	All	35520	35180	35080	1610

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 23.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:142:LEU:HD11	1:A:165:ASN:HB2	1.06	1.26	13	18
1:A:128:VAL:HG22	1:A:180:LYS:HG3	1.04	1.25	2	13
1:A:173:ILE:HD13	1:A:178:VAL:HG11	1.02	1.31	6	7
1:A:94:ASP:HA	1:A:154:GLU:HB3	1.01	1.31	4	5
1:A:152:ILE:HD13	1:A:163:ALA:HB2	1.01	1.30	1	20
1:A:142:LEU:HD12	1:A:143:PRO:HD2	0.99	1.35	9	12
1:A:130:THR:HG22	1:A:178:VAL:HG12	0.99	1.34	10	13
1:A:19:VAL:HB	1:A:39:ARG:HG3	0.98	1.32	10	4
1:A:154:GLU:HB2	1:A:162:SER:HB2	0.95	1.38	9	11
1:A:125:LEU:HD12	1:A:152:ILE:HG21	0.91	1.41	20	18
1:A:72:LYS:HD3	1:A:77:GLU:HG2	0.90	1.40	19	1
1:A:95:THR:HB	1:A:156:PRO:HA	0.88	1.42	16	8
1:A:131:LEU:HD11	1:A:179:GLU:HG2	0.87	1.43	4	5
1:A:146:LYS:HD2	1:A:146:LYS:H	0.79	1.37	5	16
1:A:145:LYS:H	1:A:148:GLU:HG3	0.79	1.38	1	3
1:A:61:TYR:HB3	1:A:73:ILE:HD11	0.79	1.54	14	19
1:A:66:LEU:HD11	1:A:72:LYS:HG3	0.78	1.53	11	1
1:A:131:LEU:CD1	1:A:179:GLU:HG3	0.78	2.08	19	1
1:A:142:LEU:CD1	1:A:169:ARG:HD2	0.78	2.09	14	1
1:A:19:VAL:HG22	1:A:39:ARG:HD2	0.77	1.56	9	1
1:A:159:GLN:HE21	1:A:159:GLN:HA	0.76	1.40	8	2
1:A:142:LEU:HD12	1:A:169:ARG:HD2	0.76	1.57	14	1
1:A:258:LEU:HD21	1:A:279:VAL:HG21	0.76	1.56	10	3
1:A:128:VAL:HG22	1:A:180:LYS:CG	0.76	2.11	13	12
1:A:150:LEU:CD2	1:A:165:ASN:HA	0.75	2.11	20	6
1:A:19:VAL:HG13	1:A:39:ARG:HB3	0.75	1.59	9	1
1:A:57:ARG:NE	1:A:58:VAL:H	0.74	1.81	5	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:19:VAL:HG12	1:A:20:SER:H	0.74	1.42	11	4
1:A:272:ASN:HD21	1:A:274:GLN:HG2	0.74	1.43	13	4
1:A:164:ARG:HA	1:A:169:ARG:O	0.74	1.83	13	19
1:A:159:GLN:HG3	1:A:160:TRP:HD1	0.73	1.43	11	1
1:A:151:VAL:HB	1:A:164:ARG:HG2	0.72	1.60	9	18
1:A:152:ILE:HD12	1:A:161:TRP:HB3	0.72	1.60	8	14
1:A:66:LEU:HD12	1:A:70:ARG:HG3	0.72	1.61	18	3
1:A:16:MET:SD	1:A:104:ARG:HA	0.72	2.25	15	5
1:A:62:ILE:O	1:A:73:ILE:HA	0.71	1.86	13	16
1:A:130:THR:HG22	1:A:178:VAL:CG1	0.71	2.14	10	5
1:A:72:LYS:HE2	1:A:75:ASP:HA	0.71	1.60	12	2
1:A:179:GLU:HG3	1:A:180:LYS:H	0.71	1.46	7	2
1:A:9:SER:CA	1:A:14:TRP:HE1	0.70	1.99	12	2
1:A:16:MET:SD	1:A:104:ARG:HB3	0.70	2.26	10	2
1:A:32:ARG:HB3	1:A:35:MET:SD	0.70	2.27	4	2
1:A:54:GLU:O	1:A:57:ARG:HB3	0.69	1.86	6	7
1:A:28:LEU:HB3	1:A:53:SER:HB2	0.69	1.63	9	11
1:A:245:LYS:HG3	1:A:260:VAL:HG23	0.69	1.62	3	1
1:A:287:PRO:HB2	1:A:289:THR:HG22	0.69	1.64	7	1
1:A:128:VAL:HG22	1:A:180:LYS:HB3	0.69	1.64	11	3
1:A:137:ASN:HA	1:A:143:PRO:HG3	0.68	1.63	1	8
1:A:54:GLU:HB2	1:A:94:ASP:HB3	0.68	1.64	9	1
1:A:16:MET:SD	1:A:104:ARG:HG2	0.68	2.29	9	2
1:A:69:ARG:HA	1:A:69:ARG:HE	0.68	1.49	18	9
1:A:54:GLU:O	1:A:57:ARG:HG3	0.67	1.89	18	5
1:A:129:ARG:NH2	1:A:181:LEU:HG	0.67	2.03	3	1
1:A:142:LEU:HD11	1:A:165:ASN:CB	0.67	2.15	7	10
1:A:148:GLU:H	1:A:148:GLU:CD	0.67	1.93	1	3
1:A:161:TRP:O	1:A:173:ILE:HG13	0.67	1.90	4	18
1:A:152:ILE:CD1	1:A:163:ALA:HB2	0.67	2.19	15	12
1:A:129:ARG:NH2	1:A:181:LEU:HD13	0.67	2.05	7	3
1:A:69:ARG:NE	1:A:69:ARG:HA	0.66	2.05	17	5
1:A:142:LEU:CD2	1:A:150:LEU:HD22	0.66	2.21	17	17
1:A:35:MET:HA	1:A:100:GLU:O	0.66	1.91	19	18
1:A:57:ARG:HH21	1:A:94:ASP:HB2	0.66	1.47	15	2
1:A:54:GLU:HG3	1:A:96:THR:HG22	0.66	1.65	10	1
1:A:126:GLU:O	1:A:151:VAL:HA	0.66	1.89	20	9
1:A:57:ARG:NH2	1:A:94:ASP:HB2	0.66	2.06	8	1
1:A:246:ARG:HG3	1:A:290:HIS:HE1	0.66	1.50	13	1
1:A:253:LYS:HG3	1:A:254:THR:HG23	0.65	1.68	10	1
1:A:179:GLU:O	1:A:179:GLU:HG3	0.65	1.92	11	12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:146:LYS:HD3	1:A:146:LYS:N	0.65	2.06	3	1
1:A:160:TRP:HB3	1:A:172:MET:SD	0.65	2.31	9	8
1:A:54:GLU:HG3	1:A:55:ASN:ND2	0.65	2.07	18	3
1:A:129:ARG:HG2	1:A:180:LYS:O	0.65	1.92	6	2
1:A:16:MET:HG3	1:A:37:LEU:HB2	0.65	1.68	2	6
1:A:160:TRP:HB3	1:A:172:MET:HE2	0.64	1.70	11	2
1:A:70:ARG:HG2	1:A:79:ASP:HA	0.64	1.68	17	5
1:A:180:LYS:H	1:A:180:LYS:HD2	0.64	1.52	18	4
1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD22	0.64	1.70	17	17
1:A:19:VAL:HB	1:A:39:ARG:CG	0.64	2.17	10	3
1:A:156:PRO:HG2	1:A:172:MET:SD	0.64	2.32	11	1
1:A:95:THR:CB	1:A:156:PRO:HA	0.64	2.23	5	6
1:A:131:LEU:HD11	1:A:179:GLU:CG	0.64	2.23	10	2
1:A:32:ARG:CD	1:A:56:SER:HA	0.63	2.23	18	1
1:A:295:ASP:HB3	1:A:296:PRO:HD3	0.63	1.70	10	1
1:A:32:ARG:HB3	1:A:33:HIS:CD2	0.63	2.28	18	1
1:A:57:ARG:HG2	1:A:58:VAL:N	0.62	2.09	2	1
1:A:93:LEU:O	1:A:154:GLU:HB3	0.62	1.94	17	8
1:A:258:LEU:HD12	1:A:289:THR:HG21	0.62	1.71	1	1
1:A:174:PRO:O	1:A:178:VAL:HG13	0.62	1.94	7	4
1:A:153:ILE:HG23	1:A:154:GLU:HG2	0.62	1.72	20	4
1:A:16:MET:HB3	1:A:19:VAL:HG11	0.62	1.72	9	1
1:A:246:ARG:HG3	1:A:290:HIS:CE1	0.62	2.29	13	1
1:A:129:ARG:CZ	1:A:181:LEU:HD13	0.62	2.25	16	4
1:A:52:VAL:HG21	1:A:93:LEU:HD13	0.62	1.70	3	6
1:A:29:GLN:NE2	1:A:57:ARG:HB3	0.62	2.09	16	1
1:A:133:ASP:HB2	1:A:145:LYS:HA	0.62	1.71	9	1
1:A:61:TYR:CB	1:A:73:ILE:HD11	0.61	2.25	2	9
1:A:88:TYR:CG	1:A:93:LEU:HD23	0.61	2.30	7	3
1:A:16:MET:CG	1:A:37:LEU:HB2	0.61	2.25	2	7
1:A:93:LEU:HA	1:A:154:GLU:OE2	0.61	1.95	3	7
1:A:154:GLU:HG3	1:A:162:SER:HB2	0.61	1.70	4	2
1:A:61:TYR:OH	1:A:93:LEU:HB3	0.61	1.94	2	4
1:A:61:TYR:CZ	1:A:93:LEU:HD22	0.61	2.30	16	3
1:A:133:ASP:OD1	1:A:145:LYS:HA	0.61	1.96	6	6
1:A:129:ARG:HG3	1:A:179:GLU:HB3	0.61	1.73	4	1
1:A:179:GLU:C	1:A:180:LYS:HD2	0.61	2.14	6	1
1:A:32:ARG:NH1	1:A:57:ARG:H	0.61	1.94	18	1
1:A:61:TYR:CE2	1:A:93:LEU:HD22	0.61	2.31	3	8
1:A:180:LYS:HD3	1:A:180:LYS:H	0.60	1.55	2	3
1:A:150:LEU:HB3	1:A:163:ALA:HB1	0.60	1.73	20	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:73:ILE:HG13	1:A:84:LEU:HD13	0.60	1.71	7	2
1:A:271:ILE:H	1:A:271:ILE:HD13	0.60	1.56	18	1
1:A:129:ARG:O	1:A:179:GLU:HB3	0.60	1.96	5	11
1:A:148:GLU:OE1	1:A:150:LEU:HG	0.60	1.96	16	2
1:A:238:VAL:CG1	1:A:293:ILE:HD12	0.60	2.26	10	5
1:A:19:VAL:HG13	1:A:39:ARG:CB	0.60	2.24	9	1
1:A:148:GLU:CD	1:A:150:LEU:HG	0.60	2.17	16	3
1:A:16:MET:HG3	1:A:19:VAL:HG21	0.60	1.73	7	5
1:A:142:LEU:HB3	1:A:173:ILE:CG2	0.60	2.26	2	20
1:A:75:ASP:OD2	1:A:168:GLY:HA2	0.60	1.97	10	1
1:A:138:ASP:HB3	1:A:141:ASP:HB3	0.60	1.73	12	1
1:A:162:SER:OG	1:A:172:MET:HG2	0.60	1.96	6	7
1:A:174:PRO:O	1:A:177:TYR:HB2	0.60	1.97	19	4
1:A:125:LEU:CD1	1:A:152:ILE:HG21	0.59	2.23	20	6
1:A:19:VAL:HB	1:A:39:ARG:HD2	0.59	1.75	2	2
1:A:131:LEU:HD22	1:A:131:LEU:N	0.59	2.13	11	1
1:A:286:PHE:HB2	1:A:289:THR:OG1	0.59	1.98	1	2
1:A:277:GLY:O	1:A:283:LYS:HA	0.59	1.97	7	7
1:A:88:TYR:CD1	1:A:93:LEU:HD23	0.59	2.33	5	4
1:A:153:ILE:HG12	1:A:154:GLU:OE2	0.59	1.98	16	1
1:A:94:ASP:HB3	1:A:154:GLU:HB3	0.59	1.75	2	1
1:A:246:ARG:O	1:A:257:ALA:HA	0.59	1.97	12	9
1:A:157:GLU:HG2	1:A:172:MET:CE	0.58	2.28	6	4
1:A:173:ILE:O	1:A:173:ILE:HD12	0.58	1.97	7	2
1:A:57:ARG:HH21	1:A:154:GLU:HA	0.58	1.58	6	3
1:A:245:LYS:HG2	1:A:259:GLU:HA	0.58	1.73	3	1
1:A:131:LEU:HD11	1:A:179:GLU:HG3	0.58	1.72	19	1
1:A:52:VAL:O	1:A:58:VAL:HA	0.58	1.99	14	13
1:A:148:GLU:OE2	1:A:150:LEU:HG	0.58	1.98	6	3
1:A:95:THR:OG1	1:A:156:PRO:HA	0.58	1.98	4	2
1:A:20:SER:H	1:A:39:ARG:HG3	0.58	1.59	8	1
1:A:87:PHE:HE1	1:A:88:TYR:CE1	0.58	2.17	11	2
1:A:64:ASN:HB2	1:A:72:LYS:CG	0.58	2.29	16	1
1:A:179:GLU:O	1:A:180:LYS:HD3	0.58	1.99	7	1
1:A:55:ASN:HB2	1:A:57:ARG:NH2	0.58	2.14	5	2
1:A:69:ARG:HA	1:A:69:ARG:NE	0.58	2.14	3	5
1:A:129:ARG:HG3	1:A:179:GLU:CG	0.58	2.29	11	5
1:A:133:ASP:OD2	1:A:145:LYS:HA	0.58	1.99	20	8
1:A:240:ALA:HB2	1:A:293:ILE:HD12	0.58	1.75	19	2
1:A:129:ARG:NH1	1:A:181:LEU:HB2	0.57	2.14	8	4
1:A:29:GLN:HE21	1:A:29:GLN:HA	0.57	1.58	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:140:GLU:O	1:A:172:MET:HB2	0.57	1.98	13	9
1:A:288:PHE:O	1:A:291:VAL:HG22	0.57	2.00	1	1
1:A:73:ILE:HD13	1:A:88:TYR:CE2	0.57	2.34	17	5
1:A:130:THR:HG21	1:A:144:PHE:CG	0.57	2.34	7	5
1:A:128:VAL:CG1	1:A:178:VAL:HB	0.57	2.30	17	16
1:A:148:GLU:CD	1:A:148:GLU:N	0.57	2.57	3	3
1:A:175:VAL:N	1:A:176:PRO:HD2	0.57	2.14	12	14
1:A:129:ARG:HB3	1:A:149:ILE:HD12	0.57	1.77	15	6
1:A:57:ARG:HG2	1:A:58:VAL:HG23	0.57	1.77	2	1
1:A:135:PRO:HA	1:A:143:PRO:HA	0.57	1.76	3	16
1:A:179:GLU:HG3	1:A:180:LYS:N	0.57	2.12	7	2
1:A:131:LEU:HD11	1:A:179:GLU:HB2	0.57	1.76	14	1
1:A:53:SER:HA	1:A:57:ARG:O	0.56	1.98	2	2
1:A:278:GLU:HG2	1:A:283:LYS:HB3	0.56	1.77	7	1
1:A:174:PRO:HB2	1:A:177:TYR:HB2	0.56	1.76	19	1
1:A:131:LEU:CG	1:A:179:GLU:HG3	0.56	2.29	19	1
1:A:130:THR:OG1	1:A:144:PHE:HB2	0.56	2.00	16	5
1:A:57:ARG:HH22	1:A:154:GLU:HA	0.56	1.59	11	3
1:A:63:ILE:HG13	1:A:73:ILE:CG1	0.56	2.30	8	1
1:A:154:GLU:HB2	1:A:162:SER:CB	0.56	2.25	9	3
1:A:156:PRO:HG2	1:A:172:MET:HE1	0.56	1.77	17	1
1:A:243:ILE:HG12	1:A:292:LYS:HG3	0.56	1.75	20	1
1:A:9:SER:N	1:A:14:TRP:HE1	0.56	1.99	12	1
1:A:256:LEU:HD21	1:A:279:VAL:HB	0.56	1.76	9	1
1:A:95:THR:HB	1:A:155:LYS:O	0.56	2.00	7	3
1:A:128:VAL:CG2	1:A:180:LYS:HG3	0.56	2.30	1	2
1:A:54:GLU:OE2	1:A:96:THR:HB	0.56	2.01	15	1
1:A:161:TRP:CZ3	1:A:180:LYS:HE3	0.56	2.36	14	2
1:A:146:LYS:HD3	1:A:146:LYS:H	0.56	1.60	9	1
1:A:81:LEU:O	1:A:84:LEU:HG	0.55	2.00	2	12
1:A:173:ILE:CD1	1:A:178:VAL:HG11	0.55	2.21	6	5
1:A:57:ARG:CD	1:A:58:VAL:H	0.55	2.13	16	2
1:A:238:VAL:HG12	1:A:293:ILE:HD11	0.55	1.78	5	1
1:A:61:TYR:CE1	1:A:153:ILE:HD11	0.55	2.37	6	2
1:A:129:ARG:HG2	1:A:179:GLU:CB	0.55	2.32	3	1
1:A:129:ARG:CG	1:A:179:GLU:HB3	0.55	2.32	4	1
1:A:258:LEU:CD1	1:A:289:THR:HG21	0.55	2.31	1	1
1:A:61:TYR:HE1	1:A:153:ILE:HD11	0.55	1.60	6	2
1:A:128:VAL:HA	1:A:180:LYS:HA	0.55	1.78	3	14
1:A:241:LYS:HB2	1:A:294:PHE:CE1	0.55	2.37	3	4
1:A:57:ARG:NH2	1:A:154:GLU:HA	0.54	2.17	6	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:54:GLU:HG3	1:A:55:ASN:HD22	0.54	1.62	18	2
1:A:63:ILE:HG13	1:A:73:ILE:HG12	0.54	1.79	7	2
1:A:160:TRP:CB	1:A:172:MET:HE2	0.54	2.31	11	2
1:A:288:PHE:O	1:A:290:HIS:N	0.54	2.41	6	1
1:A:156:PRO:HG2	1:A:172:MET:CE	0.54	2.33	11	2
1:A:287:PRO:C	1:A:289:THR:H	0.54	2.06	1	1
1:A:180:LYS:H	1:A:180:LYS:CD	0.54	2.15	18	5
1:A:89:LYS:HE3	1:A:90:ILE:HG22	0.54	1.80	10	1
1:A:8:SER:O	1:A:82:PRO:HB3	0.54	2.03	16	2
1:A:238:VAL:HG11	1:A:293:ILE:HD12	0.54	1.80	10	4
1:A:20:SER:H	1:A:39:ARG:HD2	0.54	1.63	1	1
1:A:161:TRP:CZ3	1:A:180:LYS:HD2	0.54	2.38	8	2
1:A:137:ASN:HA	1:A:143:PRO:CG	0.54	2.33	1	1
1:A:134:PHE:HB3	1:A:144:PHE:CZ	0.54	2.38	16	11
1:A:125:LEU:HD11	1:A:161:TRP:CE2	0.54	2.37	8	3
1:A:93:LEU:O	1:A:154:GLU:HG2	0.53	2.02	16	4
1:A:125:LEU:HG	1:A:155:LYS:HD2	0.53	1.78	7	8
1:A:125:LEU:HD12	1:A:152:ILE:CG2	0.53	2.26	20	1
1:A:19:VAL:HG12	1:A:20:SER:N	0.53	2.15	11	5
1:A:87:PHE:O	1:A:90:ILE:HD13	0.53	2.04	11	2
1:A:179:GLU:O	1:A:180:LYS:HD2	0.53	2.02	6	1
1:A:128:VAL:HG22	1:A:179:GLU:O	0.53	2.03	7	1
1:A:63:ILE:CG2	1:A:71:PHE:HB3	0.53	2.33	10	6
1:A:125:LEU:HD11	1:A:161:TRP:CD2	0.53	2.39	18	3
1:A:87:PHE:HE1	1:A:88:TYR:CZ	0.53	2.21	11	2
1:A:258:LEU:HD12	1:A:289:THR:CG2	0.53	2.33	1	1
1:A:23:GLU:O	1:A:27:ARG:HG3	0.53	2.04	3	3
1:A:129:ARG:HG3	1:A:179:GLU:HG3	0.53	1.81	11	1
1:A:131:LEU:HG	1:A:179:GLU:CG	0.53	2.34	19	1
1:A:47:ASP:OD1	1:A:64:ASN:HA	0.53	2.04	20	4
1:A:175:VAL:O	1:A:178:VAL:HG22	0.53	2.04	16	10
1:A:95:THR:HB	1:A:156:PRO:CA	0.53	2.27	16	2
1:A:125:LEU:HG	1:A:155:LYS:CD	0.53	2.34	5	2
1:A:125:LEU:HD21	1:A:161:TRP:CH2	0.52	2.39	2	2
1:A:294:PHE:O	1:A:296:PRO:HD3	0.52	2.04	15	2
1:A:151:VAL:O	1:A:163:ALA:HA	0.52	2.04	20	10
1:A:129:ARG:O	1:A:179:GLU:HB2	0.52	2.04	3	1
1:A:161:TRP:CH2	1:A:180:LYS:HE3	0.52	2.38	5	2
1:A:47:ASP:OD2	1:A:64:ASN:HA	0.52	2.04	19	3
1:A:157:GLU:HG2	1:A:172:MET:HE3	0.52	1.81	14	2
1:A:39:ARG:HG3	1:A:49:VAL:O	0.52	2.04	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:64:ASN:O	1:A:71:PHE:HA	0.52	2.05	13	3
1:A:78:PHE:CD2	1:A:84:LEU:HB3	0.52	2.40	11	7
1:A:80:HIS:ND1	1:A:82:PRO:HG2	0.52	2.19	17	4
1:A:81:LEU:HB2	1:A:82:PRO:HD3	0.52	1.82	5	5
1:A:139:ALA:O	1:A:171:GLY:HA2	0.52	2.05	19	1
1:A:52:VAL:HG12	1:A:54:GLU:HG2	0.52	1.82	20	1
1:A:246:ARG:HB3	1:A:258:LEU:HB2	0.52	1.82	9	1
1:A:32:ARG:NE	1:A:32:ARG:HA	0.52	2.20	18	1
1:A:94:ASP:CA	1:A:154:GLU:HB3	0.51	2.27	5	1
1:A:55:ASN:HB2	1:A:57:ARG:CG	0.51	2.35	14	1
1:A:6:PHE:CE1	1:A:89:LYS:HE2	0.51	2.40	4	3
1:A:57:ARG:CG	1:A:58:VAL:N	0.51	2.74	2	1
1:A:20:SER:HA	1:A:42:SER:OG	0.51	2.06	2	1
1:A:159:GLN:HG3	1:A:160:TRP:CD1	0.51	2.32	11	1
1:A:32:ARG:HD3	1:A:56:SER:HA	0.51	1.83	18	1
1:A:154:GLU:HG3	1:A:162:SER:CB	0.51	2.36	6	2
1:A:279:VAL:HG12	1:A:280:ASN:HD22	0.51	1.65	11	3
1:A:55:ASN:C	1:A:57:ARG:HB2	0.51	2.26	11	1
1:A:35:MET:HB2	1:A:53:SER:HB3	0.51	1.83	12	1
1:A:286:PHE:HD2	1:A:289:THR:H	0.51	1.49	6	1
1:A:240:ALA:HB2	1:A:293:ILE:HD13	0.51	1.82	6	5
1:A:179:GLU:C	1:A:180:LYS:HD3	0.51	2.27	7	1
1:A:146:LYS:N	1:A:146:LYS:HD2	0.51	2.21	11	3
1:A:131:LEU:HG	1:A:179:GLU:HG3	0.51	1.81	19	1
1:A:54:GLU:HG3	1:A:94:ASP:O	0.51	2.05	4	1
1:A:153:ILE:HG23	1:A:154:GLU:HG3	0.51	1.83	8	2
1:A:25:GLN:HG3	1:A:58:VAL:HB	0.50	1.83	7	2
1:A:73:ILE:HG23	1:A:73:ILE:O	0.50	2.05	8	3
1:A:144:PHE:HA	1:A:148:GLU:OE1	0.50	2.05	7	6
1:A:152:ILE:HD13	1:A:163:ALA:CB	0.50	2.22	16	8
1:A:32:ARG:HB2	1:A:35:MET:SD	0.50	2.46	11	5
1:A:41:SER:HA	1:A:49:VAL:HG23	0.50	1.83	14	2
1:A:174:PRO:HB2	1:A:177:TYR:CG	0.50	2.40	19	1
1:A:128:VAL:HG13	1:A:178:VAL:HB	0.50	1.82	18	2
1:A:9:SER:O	1:A:14:TRP:NE1	0.50	2.44	12	2
1:A:242:ALA:O	1:A:260:VAL:HA	0.50	2.07	4	3
1:A:61:TYR:CZ	1:A:93:LEU:HB2	0.50	2.41	5	1
1:A:10:ASP:O	1:A:12:SER:N	0.50	2.45	12	2
1:A:145:LYS:H	1:A:148:GLU:CG	0.50	2.17	13	3
1:A:133:ASP:HB2	1:A:146:LYS:N	0.50	2.21	17	2
1:A:92:TYR:HA	1:A:97:THR:CA	0.50	2.36	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:23:GLU:O	1:A:27:ARG:HG2	0.50	2.07	10	3
1:A:37:LEU:O	1:A:50:LEU:HA	0.50	2.07	10	1
1:A:54:GLU:O	1:A:56:SER:N	0.50	2.44	11	1
1:A:253:LYS:HD2	1:A:253:LYS:H	0.50	1.64	6	1
1:A:54:GLU:HG3	1:A:96:THR:CG2	0.50	2.37	10	1
1:A:129:ARG:O	1:A:179:GLU:HG2	0.49	2.06	19	1
1:A:265:LYS:HD3	1:A:278:GLU:HG3	0.49	1.85	1	1
1:A:61:TYR:CE2	1:A:93:LEU:HB2	0.49	2.42	5	1
1:A:33:HIS:HB3	1:A:54:GLU:OE1	0.49	2.07	17	1
1:A:150:LEU:HD22	1:A:165:ASN:HA	0.49	1.85	12	4
1:A:21:ARG:HD2	1:A:39:ARG:NH2	0.49	2.22	16	2
1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:CD2	0.49	2.37	20	3
1:A:173:ILE:HD13	1:A:178:VAL:CG1	0.49	2.21	6	1
1:A:92:TYR:HA	1:A:97:THR:HA	0.49	1.84	12	1
1:A:57:ARG:HH21	1:A:94:ASP:CB	0.49	2.20	15	1
1:A:164:ARG:HB3	1:A:170:VAL:HG22	0.49	1.85	10	1
1:A:126:GLU:HG2	1:A:127:TYR:N	0.49	2.22	20	1
1:A:57:ARG:CD	1:A:57:ARG:N	0.49	2.76	2	1
1:A:94:ASP:O	1:A:95:THR:HB	0.49	2.08	18	2
1:A:155:LYS:HE3	1:A:161:TRP:HE1	0.49	1.66	19	1
1:A:129:ARG:HG2	1:A:179:GLU:O	0.48	2.08	8	7
1:A:54:GLU:HG3	1:A:95:THR:HG22	0.48	1.84	4	1
1:A:128:VAL:HG22	1:A:180:LYS:CB	0.48	2.37	15	2
1:A:144:PHE:CE2	1:A:173:ILE:HB	0.48	2.43	13	7
1:A:52:VAL:HG12	1:A:54:GLU:HG3	0.48	1.85	2	1
1:A:16:MET:HB2	1:A:37:LEU:HB2	0.48	1.84	4	2
1:A:146:LYS:HD2	1:A:146:LYS:N	0.48	2.23	13	2
1:A:58:VAL:HG11	1:A:60:HIS:CE1	0.48	2.42	16	1
1:A:64:ASN:HB2	1:A:72:LYS:HG3	0.48	1.84	16	1
1:A:61:TYR:OH	1:A:154:GLU:HG2	0.48	2.08	5	1
1:A:159:GLN:HE21	1:A:159:GLN:CA	0.48	2.17	5	2
1:A:130:THR:HG23	1:A:148:GLU:OE2	0.48	2.09	6	1
1:A:11:ARG:H	1:A:11:ARG:HD2	0.48	1.67	12	1
1:A:150:LEU:HA	1:A:164:ARG:O	0.48	2.07	12	1
1:A:41:SER:HB3	1:A:44:CYS:O	0.48	2.09	5	2
1:A:94:ASP:O	1:A:156:PRO:HB3	0.48	2.09	2	1
1:A:144:PHE:HA	1:A:148:GLU:OE2	0.48	2.08	9	1
1:A:19:VAL:CG1	1:A:20:SER:H	0.48	2.17	11	1
1:A:152:ILE:HD12	1:A:161:TRP:CB	0.48	2.39	19	1
1:A:72:LYS:HE2	1:A:77:GLU:HB3	0.48	1.84	5	1
1:A:249:CYS:SG	1:A:250:ALA:N	0.48	2.87	17	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:25:GLN:O	1:A:29:GLN:HB2	0.48	2.08	17	5
1:A:144:PHE:CD2	1:A:173:ILE:HG22	0.48	2.43	19	2
1:A:125:LEU:HD11	1:A:161:TRP:CE3	0.48	2.43	5	4
1:A:55:ASN:ND2	1:A:155:LYS:H	0.48	2.06	2	1
1:A:146:LYS:N	1:A:146:LYS:CD	0.48	2.77	3	1
1:A:161:TRP:HZ3	1:A:180:LYS:HD2	0.48	1.69	8	2
1:A:279:VAL:HG12	1:A:280:ASN:ND2	0.48	2.24	8	4
1:A:152:ILE:HG23	1:A:161:TRP:HB3	0.48	1.85	10	1
1:A:146:LYS:H	1:A:146:LYS:CD	0.48	2.21	17	7
1:A:73:ILE:HB	1:A:84:LEU:HD22	0.48	1.86	8	2
1:A:78:PHE:CZ	1:A:87:PHE:CD1	0.48	3.01	17	1
1:A:11:ARG:O	1:A:15:TYR:HB3	0.48	2.08	1	2
1:A:275:TRP:O	1:A:285:LEU:HA	0.48	2.09	11	6
1:A:25:GLN:HG3	1:A:58:VAL:HG21	0.48	1.84	2	1
1:A:95:THR:HA	1:A:156:PRO:HA	0.48	1.85	9	2
1:A:92:TYR:CD2	1:A:97:THR:HG23	0.48	2.44	7	4
1:A:256:LEU:HD23	1:A:257:ALA:N	0.48	2.23	10	1
1:A:94:ASP:CG	1:A:95:THR:N	0.48	2.67	13	1
1:A:144:PHE:CE1	1:A:173:ILE:HB	0.48	2.44	16	1
1:A:133:ASP:HB3	1:A:145:LYS:C	0.48	2.29	1	1
1:A:131:LEU:HD23	1:A:178:VAL:HA	0.47	1.84	11	1
1:A:66:LEU:HD11	1:A:72:LYS:HB2	0.47	1.86	2	3
1:A:19:VAL:O	1:A:20:SER:CB	0.47	2.62	6	2
1:A:28:LEU:O	1:A:58:VAL:HG22	0.47	2.09	13	2
1:A:289:THR:O	1:A:290:HIS:CB	0.47	2.62	1	1
1:A:28:LEU:HD21	1:A:102:ALA:HB2	0.47	1.84	18	4
1:A:9:SER:CA	1:A:14:TRP:NE1	0.47	2.76	12	1
1:A:129:ARG:CG	1:A:179:GLU:HB2	0.47	2.39	19	1
1:A:151:VAL:HB	1:A:164:ARG:CG	0.47	2.40	19	5
1:A:17:GLY:O	1:A:39:ARG:HB2	0.47	2.09	10	2
1:A:9:SER:HA	1:A:14:TRP:CZ2	0.47	2.45	12	1
1:A:30:GLY:HA2	1:A:56:SER:HA	0.47	1.85	20	1
1:A:87:PHE:C	1:A:87:PHE:CD1	0.47	2.88	5	2
1:A:19:VAL:HG13	1:A:23:GLU:HB3	0.47	1.86	17	2
1:A:130:THR:OG1	1:A:148:GLU:HG3	0.47	2.09	6	1
1:A:93:LEU:O	1:A:154:GLU:HA	0.47	2.09	9	1
1:A:72:LYS:HE3	1:A:75:ASP:O	0.47	2.10	20	1
1:A:85:LEU:O	1:A:89:LYS:HG3	0.47	2.09	4	6
1:A:158:GLU:O	1:A:175:VAL:HG21	0.47	2.10	8	4
1:A:138:ASP:HB3	1:A:141:ASP:H	0.47	1.70	4	6
1:A:20:SER:HB3	1:A:23:GLU:OE1	0.47	2.09	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:276:GLU:HB3	1:A:283:LYS:HE2	0.47	1.86	20	1
1:A:9:SER:O	1:A:11:ARG:N	0.47	2.48	12	1
1:A:39:ARG:HG3	1:A:40:ASP:O	0.47	2.10	14	1
1:A:139:ALA:HA	1:A:170:VAL:O	0.47	2.10	19	1
1:A:129:ARG:HH12	1:A:181:LEU:HB2	0.47	1.68	8	2
1:A:132:TYR:O	1:A:133:ASP:HB3	0.47	2.10	13	7
1:A:94:ASP:HA	1:A:154:GLU:CB	0.47	2.29	5	1
1:A:61:TYR:HB3	1:A:73:ILE:CD1	0.46	2.40	2	2
1:A:94:ASP:CG	1:A:95:THR:H	0.46	2.13	13	1
1:A:160:TRP:CH2	1:A:174:PRO:HG3	0.46	2.45	19	1
1:A:129:ARG:NH2	1:A:181:LEU:CG	0.46	2.78	3	1
1:A:160:TRP:HB3	1:A:172:MET:CE	0.46	2.38	11	1
1:A:73:ILE:HD13	1:A:88:TYR:HE2	0.46	1.70	2	3
1:A:60:HIS:O	1:A:153:ILE:HD11	0.46	2.09	5	1
1:A:72:LYS:HG3	1:A:77:GLU:HB3	0.46	1.85	8	1
1:A:94:ASP:OD1	1:A:96:THR:HG22	0.46	2.10	14	1
1:A:242:ALA:HA	1:A:291:VAL:HG12	0.46	1.88	9	3
1:A:72:LYS:HD3	1:A:77:GLU:CG	0.46	2.28	19	1
1:A:57:ARG:HH22	1:A:94:ASP:CG	0.46	2.14	20	1
1:A:142:LEU:HD22	1:A:163:ALA:O	0.46	2.11	19	6
1:A:142:LEU:CD1	1:A:165:ASN:HB2	0.46	2.19	13	2
1:A:27:ARG:O	1:A:31:GLN:HG3	0.46	2.11	6	2
1:A:155:LYS:HG3	1:A:161:TRP:CD1	0.46	2.45	9	2
1:A:125:LEU:HD12	1:A:152:ILE:HG13	0.46	1.88	15	1
1:A:129:ARG:HG2	1:A:179:GLU:HB3	0.46	1.87	3	1
1:A:131:LEU:HD21	1:A:179:GLU:HG2	0.46	1.88	3	1
1:A:130:THR:HB	1:A:144:PHE:CD1	0.46	2.45	18	5
1:A:15:TYR:HA	1:A:38:VAL:O	0.46	2.11	10	1
1:A:21:ARG:HD2	1:A:39:ARG:HH22	0.46	1.70	16	1
1:A:36:PHE:CB	1:A:52:VAL:HG22	0.46	2.41	12	2
1:A:92:TYR:HA	1:A:97:THR:HG22	0.46	1.88	12	1
1:A:94:ASP:CB	1:A:154:GLU:HG3	0.46	2.41	16	1
1:A:246:ARG:CZ	1:A:287:PRO:HD3	0.46	2.41	3	1
1:A:52:VAL:HG21	1:A:93:LEU:HD11	0.46	1.87	5	1
1:A:57:ARG:O	1:A:57:ARG:HD2	0.46	2.10	18	2
1:A:174:PRO:HB2	1:A:177:TYR:CD1	0.45	2.46	14	5
1:A:36:PHE:CD1	1:A:98:LEU:HD22	0.45	2.45	15	1
1:A:165:ASN:HD22	1:A:165:ASN:C	0.45	2.12	9	1
1:A:59:SER:HB2	1:A:61:TYR:CE2	0.45	2.47	11	1
1:A:92:TYR:C	1:A:94:ASP:H	0.45	2.14	12	1
1:A:74:GLY:O	1:A:75:ASP:HB3	0.45	2.11	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:150:LEU:HD23	1:A:165:ASN:HA	0.45	1.85	20	1
1:A:127:TYR:CE2	1:A:151:VAL:HG22	0.45	2.46	9	1
1:A:54:GLU:HG3	1:A:94:ASP:HB3	0.45	1.87	19	1
1:A:3:SER:O	1:A:99:ILE:HG23	0.45	2.11	7	3
1:A:94:ASP:O	1:A:95:THR:HG22	0.45	2.11	15	2
1:A:142:LEU:CD2	1:A:150:LEU:CD2	0.45	2.95	20	3
1:A:92:TYR:N	1:A:97:THR:HG22	0.45	2.27	19	1
1:A:270:ASN:HD21	1:A:276:GLU:HG3	0.45	1.71	19	1
1:A:55:ASN:HB2	1:A:57:ARG:HH21	0.45	1.71	5	1
1:A:95:THR:CA	1:A:156:PRO:HA	0.45	2.41	9	3
1:A:268:ARG:HD2	1:A:276:GLU:OE2	0.45	2.11	19	1
1:A:81:LEU:N	1:A:82:PRO:HD2	0.45	2.27	3	4
1:A:125:LEU:HD21	1:A:161:TRP:CZ2	0.45	2.45	3	1
1:A:131:LEU:HD21	1:A:179:GLU:CB	0.45	2.41	11	1
1:A:72:LYS:CE	1:A:75:ASP:HA	0.45	2.39	12	1
1:A:272:ASN:ND2	1:A:274:GLN:HG2	0.45	2.26	19	3
1:A:55:ASN:HB2	1:A:57:ARG:HG2	0.45	1.88	14	1
1:A:278:GLU:HG2	1:A:283:LYS:HE2	0.45	1.87	13	1
1:A:28:LEU:HD22	1:A:53:SER:HB2	0.45	1.89	2	4
1:A:81:LEU:HD23	1:A:84:LEU:HD21	0.45	1.89	3	2
1:A:160:TRP:HA	1:A:173:ILE:O	0.45	2.12	7	1
1:A:88:TYR:CG	1:A:93:LEU:HD21	0.45	2.47	16	1
1:A:155:LYS:HE3	1:A:161:TRP:NE1	0.45	2.27	19	1
1:A:131:LEU:N	1:A:131:LEU:CD2	0.45	2.80	11	1
1:A:55:ASN:OD1	1:A:155:LYS:HE2	0.45	2.12	12	1
1:A:16:MET:CG	1:A:19:VAL:HG21	0.44	2.42	1	2
1:A:55:ASN:HD22	1:A:94:ASP:CG	0.44	2.15	2	1
1:A:49:VAL:HG22	1:A:62:ILE:HG12	0.44	1.90	10	2
1:A:9:SER:O	1:A:10:ASP:C	0.44	2.54	10	2
1:A:175:VAL:HA	1:A:178:VAL:HG22	0.44	1.89	12	1
1:A:35:MET:HB3	1:A:102:ALA:HB2	0.44	1.87	2	2
1:A:89:LYS:HE3	1:A:90:ILE:CG2	0.44	2.42	10	1
1:A:129:ARG:HG2	1:A:179:GLU:CG	0.44	2.42	16	1
1:A:63:ILE:HG23	1:A:71:PHE:HB3	0.44	1.89	17	1
1:A:174:PRO:HB2	1:A:177:TYR:CB	0.44	2.42	19	1
1:A:131:LEU:CD2	1:A:178:VAL:HA	0.44	2.42	11	1
1:A:54:GLU:OE2	1:A:93:LEU:HD12	0.44	2.13	2	1
1:A:19:VAL:HG12	1:A:39:ARG:HD2	0.44	1.89	3	1
1:A:73:ILE:HG13	1:A:84:LEU:CD1	0.44	2.41	7	1
1:A:55:ASN:O	1:A:57:ARG:HG3	0.44	2.13	16	1
1:A:88:TYR:CD1	1:A:93:LEU:HD21	0.44	2.47	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:32:ARG:NH2	1:A:58:VAL:HG22	0.44	2.28	18	1
1:A:61:TYR:HB3	1:A:73:ILE:CG1	0.44	2.43	2	1
1:A:63:ILE:HG13	1:A:73:ILE:HB	0.44	1.88	9	3
1:A:274:GLN:HA	1:A:288:PHE:CZ	0.44	2.48	3	2
1:A:61:TYR:CZ	1:A:93:LEU:HB3	0.44	2.48	6	1
1:A:157:GLU:HB2	1:A:160:TRP:O	0.44	2.13	7	1
1:A:180:LYS:N	1:A:180:LYS:HD3	0.44	2.28	9	1
1:A:294:PHE:CE2	1:A:296:PRO:HA	0.44	2.48	13	1
1:A:174:PRO:HG2	1:A:177:TYR:CD2	0.44	2.48	7	1
1:A:148:GLU:HB2	1:A:166:LYS:HB2	0.44	1.90	13	1
1:A:94:ASP:HB2	1:A:154:GLU:HG3	0.44	1.90	16	1
1:A:23:GLU:HG2	1:A:27:ARG:HE	0.44	1.72	6	1
1:A:39:ARG:HD3	1:A:40:ASP:O	0.44	2.12	6	1
1:A:165:ASN:ND2	1:A:167:ASP:HB2	0.44	2.27	7	1
1:A:4:ALA:HB1	1:A:89:LYS:HE3	0.44	1.88	8	1
1:A:258:LEU:HD22	1:A:264:VAL:HG22	0.44	1.90	9	1
1:A:131:LEU:CD1	1:A:179:GLU:HB2	0.44	2.42	14	1
1:A:5:ARG:HA	1:A:5:ARG:CZ	0.44	2.42	17	1
1:A:287:PRO:C	1:A:289:THR:N	0.43	2.72	1	1
1:A:25:GLN:HA	1:A:58:VAL:HG21	0.43	1.90	10	2
1:A:33:HIS:CE1	1:A:55:ASN:HA	0.43	2.48	11	1
1:A:130:THR:HG23	1:A:150:LEU:CD1	0.43	2.43	20	1
1:A:173:ILE:HD12	1:A:173:ILE:C	0.43	2.33	7	1
1:A:156:PRO:CG	1:A:172:MET:HE1	0.43	2.43	17	1
1:A:289:THR:O	1:A:290:HIS:HB2	0.43	2.13	1	1
1:A:55:ASN:HD21	1:A:155:LYS:H	0.43	1.56	2	1
1:A:131:LEU:CD1	1:A:179:GLU:CG	0.43	2.90	19	1
1:A:86:GLU:OE2	1:A:89:LYS:HD2	0.43	2.14	17	1
1:A:131:LEU:HD11	1:A:179:GLU:OE2	0.43	2.14	3	1
1:A:178:VAL:HG23	1:A:180:LYS:HD2	0.43	1.89	2	1
1:A:131:LEU:HD21	1:A:179:GLU:HB3	0.43	1.89	11	1
1:A:135:PRO:HA	1:A:143:PRO:CA	0.43	2.43	11	1
1:A:264:VAL:HA	1:A:279:VAL:HG22	0.43	1.91	12	1
1:A:87:PHE:CE2	1:A:91:HIS:ND1	0.43	2.86	20	1
1:A:54:GLU:HG2	1:A:94:ASP:O	0.43	2.14	16	1
1:A:128:VAL:HG13	1:A:180:LYS:HG3	0.43	1.91	4	1
1:A:21:ARG:HA	1:A:39:ARG:NH2	0.43	2.29	6	1
1:A:88:TYR:CD1	1:A:93:LEU:HB3	0.43	2.49	7	1
1:A:128:VAL:HG21	1:A:152:ILE:HD11	0.43	1.90	7	1
1:A:37:LEU:HD12	1:A:37:LEU:O	0.43	2.14	9	1
1:A:180:LYS:HD3	1:A:180:LYS:N	0.43	2.28	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:148:GLU:CD	1:A:148:GLU:C	0.43	2.77	6	3
1:A:178:VAL:CG2	1:A:180:LYS:HD2	0.43	2.44	2	1
1:A:93:LEU:O	1:A:94:ASP:HB2	0.43	2.14	5	1
1:A:271:ILE:HD12	1:A:271:ILE:H	0.43	1.73	16	1
1:A:131:LEU:HD11	1:A:179:GLU:CD	0.42	2.34	5	2
1:A:289:THR:HB	1:A:291:VAL:HG13	0.42	1.90	1	1
1:A:148:GLU:OE1	1:A:150:LEU:CD2	0.42	2.67	6	1
1:A:241:LYS:HE3	1:A:261:GLY:HA2	0.42	1.91	8	1
1:A:35:MET:SD	1:A:103:PRO:HD3	0.42	2.54	7	1
1:A:81:LEU:CB	1:A:82:PRO:HD3	0.42	2.44	16	1
1:A:19:VAL:CB	1:A:39:ARG:HD2	0.42	2.43	2	1
1:A:264:VAL:HG13	1:A:279:VAL:CG2	0.42	2.45	9	2
1:A:19:VAL:O	1:A:20:SER:HB3	0.42	2.14	10	1
1:A:130:THR:C	1:A:131:LEU:HD22	0.42	2.34	11	1
1:A:246:ARG:HG3	1:A:256:LEU:O	0.42	2.13	17	1
1:A:34:GLY:CA	1:A:96:THR:HG21	0.42	2.45	15	1
1:A:54:GLU:CG	1:A:95:THR:HG22	0.42	2.44	1	1
1:A:142:LEU:HD13	1:A:169:ARG:O	0.42	2.14	13	2
1:A:28:LEU:HA	1:A:31:GLN:HG3	0.42	1.92	6	1
1:A:86:GLU:HA	1:A:89:LYS:HD3	0.42	1.90	8	1
1:A:148:GLU:OE1	1:A:165:ASN:HB2	0.42	2.14	9	1
1:A:238:VAL:HB	1:A:266:VAL:HG13	0.42	1.92	9	1
1:A:37:LEU:O	1:A:37:LEU:HD12	0.42	2.15	10	1
1:A:145:LYS:N	1:A:148:GLU:HG3	0.42	2.19	13	1
1:A:148:GLU:OE1	1:A:150:LEU:CG	0.42	2.67	16	1
1:A:78:PHE:CZ	1:A:87:PHE:CG	0.42	3.07	17	1
1:A:175:VAL:C	1:A:177:TYR:H	0.42	2.16	19	1
1:A:19:VAL:O	1:A:20:SER:HB2	0.42	2.15	12	2
1:A:158:GLU:HG3	1:A:159:GLN:HG2	0.42	1.90	1	1
1:A:270:ASN:HB2	1:A:274:GLN:O	0.42	2.15	10	2
1:A:248:PRO:HB3	1:A:252:ASP:CG	0.42	2.35	17	1
1:A:87:PHE:O	1:A:90:ILE:HG12	0.42	2.14	10	2
1:A:55:ASN:ND2	1:A:94:ASP:OD1	0.42	2.53	11	1
1:A:57:ARG:HE	1:A:94:ASP:CG	0.42	2.18	15	1
1:A:126:GLU:HG2	1:A:127:TYR:CD2	0.42	2.50	15	1
1:A:128:VAL:O	1:A:150:LEU:HB2	0.42	2.14	20	1
1:A:74:GLY:O	1:A:75:ASP:HB2	0.42	2.15	4	1
1:A:137:ASN:CA	1:A:143:PRO:HG3	0.42	2.42	7	1
1:A:25:GLN:O	1:A:29:GLN:N	0.42	2.52	3	1
1:A:54:GLU:HB3	1:A:94:ASP:CG	0.42	2.35	3	1
1:A:102:ALA:HB1	1:A:103:PRO:HD2	0.42	1.91	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:156:PRO:HD2	1:A:172:MET:HE1	0.42	1.92	9	1
1:A:36:PHE:HB2	1:A:52:VAL:HG22	0.42	1.90	12	1
1:A:54:GLU:HB2	1:A:94:ASP:CG	0.42	2.35	13	1
1:A:244:GLN:HB3	1:A:290:HIS:HB2	0.42	1.92	13	1
1:A:31:GLN:HB2	1:A:35:MET:CE	0.42	2.45	18	1
1:A:256:LEU:HA	1:A:282:ARG:NH1	0.41	2.30	1	1
1:A:72:LYS:HG3	1:A:77:GLU:HG2	0.41	1.91	3	1
1:A:86:GLU:HA	1:A:89:LYS:CG	0.41	2.44	7	1
1:A:57:ARG:HH12	1:A:154:GLU:CA	0.41	2.28	13	1
1:A:72:LYS:HG3	1:A:72:LYS:O	0.41	2.15	16	1
1:A:78:PHE:CZ	1:A:87:PHE:CD2	0.41	3.08	13	1
1:A:12:SER:HA	1:A:104:ARG:NH1	0.41	2.30	16	1
1:A:54:GLU:HG2	1:A:95:THR:HG22	0.41	1.93	1	1
1:A:57:ARG:HG3	1:A:57:ARG:O	0.41	2.15	1	1
1:A:239:PHE:HB2	1:A:296:PRO:CG	0.41	2.46	15	1
1:A:268:ARG:NE	1:A:268:ARG:HA	0.41	2.29	18	1
1:A:80:HIS:CE1	1:A:83:ALA:HB2	0.41	2.50	10	1
1:A:278:GLU:HB3	1:A:283:LYS:HG2	0.41	1.91	12	1
1:A:130:THR:CG2	1:A:178:VAL:HG12	0.41	2.45	1	1
1:A:289:THR:O	1:A:289:THR:HG22	0.41	2.14	6	1
1:A:283:LYS:O	1:A:283:LYS:HD2	0.41	2.15	9	1
1:A:126:GLU:CG	1:A:127:TYR:N	0.41	2.84	20	1
1:A:142:LEU:HD21	1:A:165:ASN:HA	0.41	1.91	6	1
1:A:93:LEU:HD11	1:A:98:LEU:CD2	0.41	2.45	12	1
1:A:240:ALA:HB2	1:A:293:ILE:HG13	0.41	1.90	17	1
1:A:30:GLY:C	1:A:32:ARG:HG2	0.41	2.35	18	1
1:A:180:LYS:CD	1:A:180:LYS:N	0.41	2.83	18	1
1:A:63:ILE:HA	1:A:73:ILE:HA	0.41	1.92	10	1
1:A:162:SER:HA	1:A:172:MET:HA	0.41	1.93	19	1
1:A:129:ARG:NH2	1:A:149:ILE:HD11	0.41	2.30	6	1
1:A:267:THR:OG1	1:A:268:ARG:HD2	0.41	2.16	6	1
1:A:52:VAL:HG11	1:A:93:LEU:CD1	0.41	2.45	7	1
1:A:54:GLU:CB	1:A:94:ASP:HB3	0.41	2.40	9	1
1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD13	0.41	1.92	10	1
1:A:88:TYR:CD1	1:A:93:LEU:CD2	0.41	3.04	17	2
1:A:131:LEU:HA	1:A:146:LYS:O	0.41	2.16	18	1
1:A:243:ILE:HD13	1:A:292:LYS:HG2	0.41	1.93	18	1
1:A:80:HIS:ND1	1:A:82:PRO:HD2	0.41	2.31	5	1
1:A:39:ARG:CZ	1:A:49:VAL:HB	0.41	2.46	8	1
1:A:39:ARG:HH21	1:A:42:SER:HB3	0.41	1.75	9	1
1:A:153:ILE:HG21	1:A:170:VAL:HG22	0.41	1.92	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:55:ASN:O	1:A:57:ARG:HB2	0.41	2.15	17	1
1:A:258:LEU:HD12	1:A:289:THR:OG1	0.40	2.16	1	1
1:A:156:PRO:HG2	1:A:172:MET:HE3	0.40	1.92	2	1
1:A:32:ARG:HB2	1:A:35:MET:HG3	0.40	1.92	8	1
1:A:291:VAL:O	1:A:292:LYS:HD2	0.40	2.17	8	1
1:A:66:LEU:HD21	1:A:72:LYS:HD2	0.40	1.92	11	1
1:A:129:ARG:HG3	1:A:179:GLU:HG2	0.40	1.92	14	1
1:A:238:VAL:HB	1:A:269:MET:HE3	0.40	1.93	19	1
1:A:238:VAL:CG1	1:A:293:ILE:HD11	0.40	2.46	5	1
1:A:175:VAL:N	1:A:176:PRO:CD	0.40	2.85	9	2
1:A:243:ILE:HG12	1:A:290:HIS:O	0.40	2.16	13	1
1:A:19:VAL:HB	1:A:39:ARG:CB	0.40	2.46	15	1
1:A:290:HIS:H	1:A:290:HIS:CD2	0.40	2.34	13	1
1:A:164:ARG:HB2	1:A:168:GLY:C	0.40	2.37	16	1
1:A:144:PHE:CE2	1:A:173:ILE:HG22	0.40	2.51	19	1
1:A:264:VAL:HG11	1:A:286:PHE:CZ	0.40	2.52	19	1
1:A:130:THR:HG23	1:A:150:LEU:HD12	0.40	1.93	20	1
1:A:52:VAL:HG21	1:A:93:LEU:CD1	0.40	2.44	3	1
1:A:7:ASP:HB3	1:A:13:ALA:CB	0.40	2.47	10	1
1:A:13:ALA:O	1:A:101:PRO:HG2	0.40	2.16	12	1
1:A:69:ARG:HE	1:A:69:ARG:HA	0.40	1.77	13	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	219/303 (72%)	185±4 (85±2%)	27±4 (12±2%)	7±2 (3±1%)	7	39
All	All	4380/6060 (72%)	3704 (85%)	542 (12%)	134 (3%)	7	39

All 39 unique Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	126	GLU	19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	147	GLY	11
1	A	181	LEU	8
1	A	165	ASN	8
1	A	125	LEU	7
1	A	95	THR	6
1	A	20	SER	5
1	A	92	TYR	5
1	A	93	LEU	5
1	A	133	ASP	5
1	A	9	SER	5
1	A	94	ASP	5
1	A	156	PRO	4
1	A	31	GLN	4
1	A	75	ASP	3
1	A	271	ILE	3
1	A	295	ASP	3
1	A	10	ASP	3
1	A	19	VAL	2
1	A	272	ASN	2
1	A	11	ARG	2
1	A	296	PRO	2
1	A	6	PHE	1
1	A	248	PRO	1
1	A	279	VAL	1
1	A	290	HIS	1
1	A	57	ARG	1
1	A	270	ASN	1
1	A	289	THR	1
1	A	45	PRO	1
1	A	41	SER	1
1	A	42	SER	1
1	A	55	ASN	1
1	A	12	SER	1
1	A	56	SER	1
1	A	250	ALA	1
1	A	32	ARG	1
1	A	103	PRO	1
1	A	280	ASN	1

6.3.2 Protein sidechains [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	193/262 (74%)	178±3 (92±1%)	15±3 (8±1%)	17 65
All	All	3860/5240 (74%)	3568 (92%)	292 (8%)	17 65

All 81 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	146	LYS	17
1	A	148	GLU	14
1	A	57	ARG	13
1	A	256	LEU	12
1	A	138	ASP	12
1	A	169	ARG	11
1	A	154	GLU	10
1	A	172	MET	10
1	A	244	GLN	10
1	A	29	GLN	9
1	A	130	THR	8
1	A	180	LYS	8
1	A	129	ARG	7
1	A	149	ILE	7
1	A	54	GLU	7
1	A	69	ARG	6
1	A	137	ASN	6
1	A	55	ASN	6
1	A	289	THR	5
1	A	39	ARG	5
1	A	246	ARG	4
1	A	77	GLU	4
1	A	94	ASP	4
1	A	23	GLU	3
1	A	283	LYS	3
1	A	93	LEU	3
1	A	87	PHE	3
1	A	90	ILE	3
1	A	95	THR	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	282	ARG	3
1	A	22	GLN	3
1	A	43	THR	2
1	A	252	ASP	2
1	A	58	VAL	2
1	A	181	LEU	2
1	A	293	ILE	2
1	A	294	PHE	2
1	A	267	THR	2
1	A	159	GLN	2
1	A	144	PHE	2
1	A	254	THR	2
1	A	268	ARG	2
1	A	73	ILE	2
1	A	11	ARG	2
1	A	80	HIS	2
1	A	133	ASP	2
1	A	145	LYS	2
1	A	76	GLN	2
1	A	280	ASN	2
1	A	59	SER	2
1	A	100	GLU	2
1	A	125	LEU	2
1	A	126	GLU	2
1	A	259	GLU	2
1	A	292	LYS	1
1	A	20	SER	1
1	A	131	LEU	1
1	A	64	ASN	1
1	A	179	GLU	1
1	A	243	ILE	1
1	A	40	ASP	1
1	A	276	GLU	1
1	A	68	ASN	1
1	A	79	ASP	1
1	A	253	LYS	1
1	A	174	PRO	1
1	A	31	GLN	1
1	A	165	ASN	1
1	A	278	GLU	1
1	A	89	LYS	1
1	A	245	LYS	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	274	GLN	1
1	A	290	HIS	1
1	A	21	ARG	1
1	A	72	LYS	1
1	A	91	HIS	1
1	A	156	PRO	1
1	A	42	SER	1
1	A	271	ILE	1
1	A	158	GLU	1
1	A	96	THR	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 58% for the well-defined parts and 53% 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	2157
Number of shifts mapped to atoms	2157
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	16

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
$^{13}\text{C}_\alpha$	267	0.13 ± 0.10	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}_\beta$	242	0.20 ± 0.17	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}'$	211	0.07 ± 0.08	None needed (< 0.5 ppm)
^{15}N	232	0.11 ± 0.32	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 58%, i.e. 1786 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 3081. 0 out of 34 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	912/1079 (85%)	347/437 (79%)	380/438 (87%)	185/204 (91%)
Sidechain	874/1723 (51%)	541/1115 (49%)	333/531 (63%)	0/77 (0%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Aromatic	0/279 (0%)	0/135 (0%)	0/130 (0%)	0/14 (0%)
Overall	1786/3081 (58%)	888/1687 (53%)	713/1099 (65%)	185/295 (63%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 53%, i.e. 2153 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 4079. 0 out of 40 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Backbone	1139/1476 (77%)	429/597 (72%)	478/606 (79%)	232/273 (85%)
Sidechain	1014/2273 (45%)	610/1473 (41%)	404/704 (57%)	0/96 (0%)
Aromatic	0/330 (0%)	0/159 (0%)	0/151 (0%)	0/20 (0%)
Overall	2153/4079 (53%)	1039/2229 (47%)	882/1461 (60%)	232/389 (60%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

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

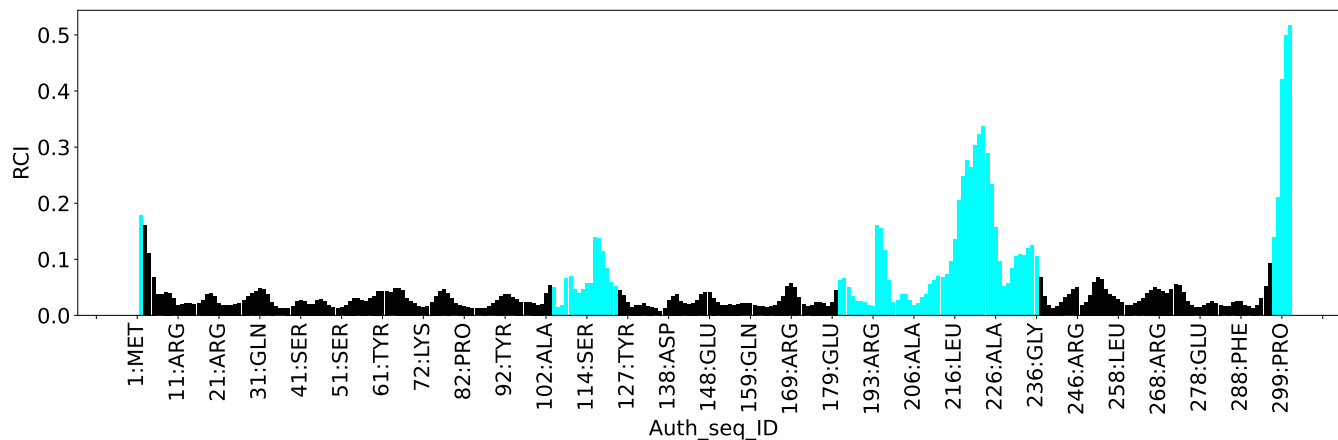
List Id	Chain	Res	Type	Atom	Shift, ppm	Expected range, ppm	Z-score
1	A	32	ARG	HH21	1.64	4.81 – 8.80	-12.9
1	A	21	ARG	CD	51.74	38.57 – 47.75	9.3
1	A	231	PRO	CD	42.81	45.11 – 55.58	-7.2
1	A	11	ARG	CB	43.01	21.74 – 39.52	7.0
1	A	206	ALA	CA	40.20	43.52 – 62.81	-6.7
1	A	101	PRO	CA	53.31	55.85 – 70.84	-6.7
1	A	201	PRO	CA	53.89	55.85 – 70.84	-6.3
1	A	269	MET	HG3	0.14	0.54 – 4.26	-6.1
1	A	11	ARG	HA	1.94	2.06 – 6.51	-5.3
1	A	85	LEU	HD21	-0.73	-0.65 – 2.13	-5.3
1	A	85	LEU	HD22	-0.73	-0.65 – 2.13	-5.3
1	A	85	LEU	HD23	-0.73	-0.65 – 2.13	-5.3
1	A	84	LEU	HA	1.92	2.04 – 6.55	-5.3
1	A	93	LEU	HD21	-0.68	-0.65 – 2.13	-5.1
1	A	93	LEU	HD22	-0.68	-0.65 – 2.13	-5.1
1	A	93	LEU	HD23	-0.68	-0.65 – 2.13	-5.1

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	3975
Intra-residue ($ i-j =0$)	765
Sequential ($ i-j =1$)	1012
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	522
Long range ($ i-j \geq 5$)	1675
Inter-chain	0
Hydrogen bond restraints	1
Disulfide bond restraints	0
Total dihedral-angle restraints	183
Number of unmapped restraints	0
Number of restraints per residue	13.7
Number of long range restraints per residue ¹	5.5

¹Long 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)	17.1	0.2
0.2-0.5 (Medium)	37.5	0.5
>0.5 (Large)	66.0	6.38

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

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

Bins (°)	Average number of violations per model	Max (°)
1.0-10.0 (Small)	14.9	8.6
10.0-20.0 (Medium)	None	None
>20.0 (Large)	None	None

9 Distance violation analysis i

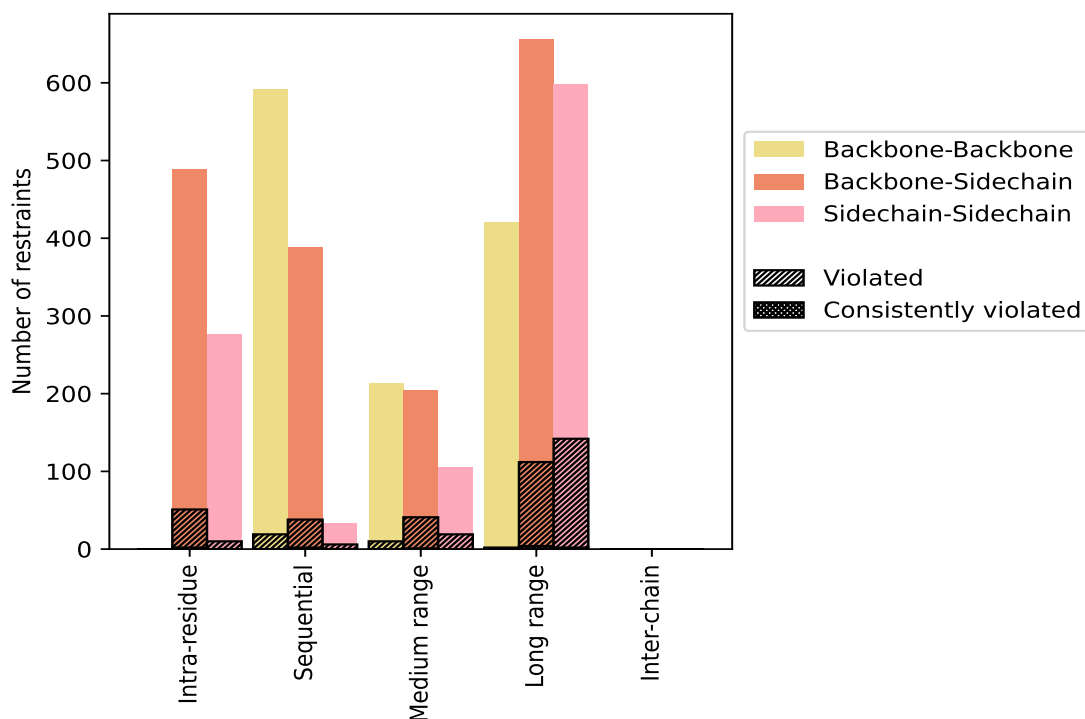
9.1 Summary of distance violations i

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

Restrains type	Count	% ¹	Violated ³			Consistently Violated ⁴		
			Count	% ²	% ¹	Count	% ²	% ¹
Intra-residue ($i-j =0$)	765	19.2	61	8.0	1.5	2	0.3	0.1
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	489	12.3	51	10.4	1.3	2	0.4	0.1
Sidechain-Sidechain	276	6.9	10	3.6	0.3	0	0.0	0.0
Sequential ($i-j =1$)	1012	25.5	63	6.2	1.6	2	0.2	0.1
Backbone-Backbone	591	14.9	19	3.2	0.5	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	388	9.8	38	9.8	1.0	2	0.5	0.1
Sidechain-Sidechain	33	0.8	6	18.2	0.2	0	0.0	0.0
Medium range ($i-j >1$ & $i-j <5$)	522	13.1	70	13.4	1.8	1	0.2	0.0
Backbone-Backbone	213	5.4	10	4.7	0.3	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	204	5.1	41	20.1	1.0	1	0.5	0.0
Sidechain-Sidechain	105	2.6	19	18.1	0.5	0	0.0	0.0
Long range ($i-j \geq 5$)	1675	42.1	256	15.3	6.4	6	0.4	0.2
Backbone-Backbone	421	10.6	2	0.5	0.1	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	656	16.5	112	17.1	2.8	4	0.6	0.1
Sidechain-Sidechain	598	15.0	142	23.7	3.6	2	0.3	0.1
Inter-chain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Hydrogen bond	1	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Disulfide bond	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Total	3975	100.0	450	11.3	11.3	11	0.3	0.3
Backbone-Backbone	1226	30.8	31	2.5	0.8	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	1737	43.7	242	13.9	6.1	9	0.5	0.2
Sidechain-Sidechain	1012	25.5	177	17.5	4.5	2	0.2	0.1

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

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



Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories. The hydrogen bonds and 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 ⁶ (Å)	Median (Å)
	IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total				
1	11	10	20	65	0	106	0.77	3.16	0.76	0.45
2	12	15	17	50	0	94	0.8	3.39	0.78	0.53
3	8	16	10	43	0	77	0.49	1.87	0.33	0.43
4	17	18	22	67	0	124	0.95	5.36	0.98	0.54
5	13	21	22	91	0	147	1.12	5.15	0.99	0.75
6	9	13	23	91	0	136	1.0	3.97	0.94	0.62
7	11	22	16	84	0	133	1.05	4.25	0.94	0.67
8	16	26	16	83	0	141	1.01	4.1	0.91	0.62
9	16	24	16	73	0	129	0.77	4.27	0.87	0.43
10	17	16	13	67	0	113	0.68	3.59	0.66	0.44
11	13	14	21	66	0	114	1.0	6.2	1.07	0.6

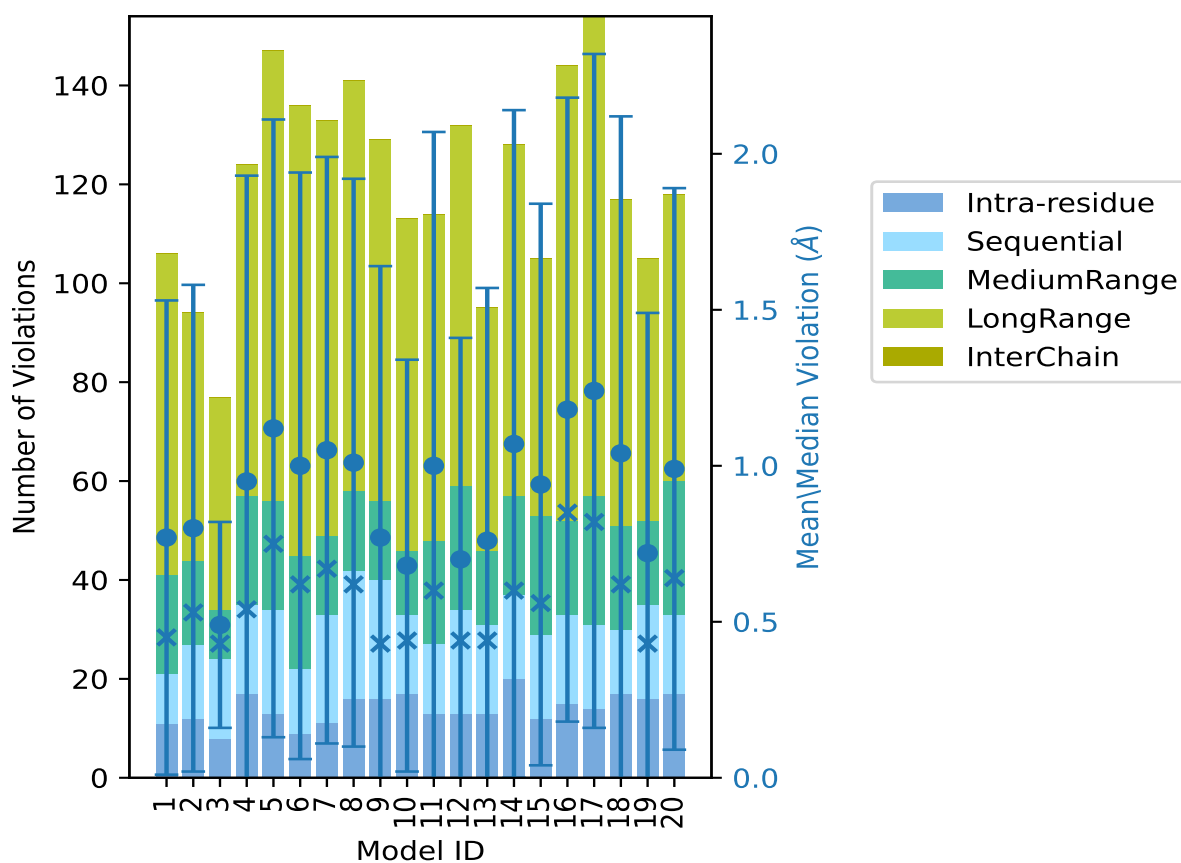
Continued on next page...

Continued from previous page...

Model ID	Number of violations					Total	Mean (Å)	Max (Å)	SD ⁶ (Å)	Median (Å)
	IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵					
12	13	21	25	73	0	132	0.7	3.86	0.71	0.44
13	13	18	15	49	0	95	0.76	4.08	0.81	0.44
14	20	17	20	71	0	128	1.07	6.03	1.07	0.6
15	12	17	24	52	0	105	0.94	4.24	0.9	0.56
16	15	18	19	92	0	144	1.18	5.39	1.0	0.85
17	14	17	26	97	0	154	1.24	5.43	1.08	0.82
18	17	13	21	66	0	117	1.04	6.38	1.08	0.62
19	16	19	17	53	0	105	0.72	3.94	0.77	0.43
20	17	16	27	58	0	118	0.99	4.09	0.9	0.64

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

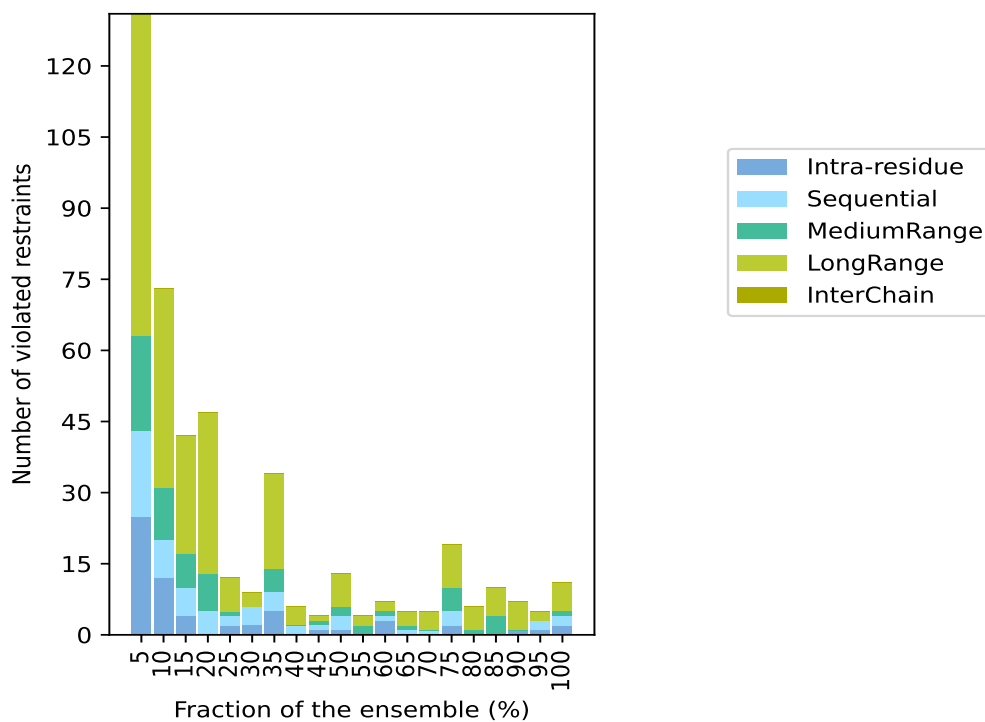
9.3 Distance violation statistics for the ensemble

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, 3524(IR:704, SQ:949, MR:452, LR:1419, IC:0) restraints are not violated in the ensemble.

Number of violated restraints						Fraction of the ensemble	
IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total	Count ⁶	%
25	18	20	68	0	131	1	5.0
12	8	11	42	0	73	2	10.0
4	6	7	25	0	42	3	15.0
0	5	8	34	0	47	4	20.0
2	2	1	7	0	12	5	25.0
2	4	0	3	0	9	6	30.0
5	4	5	20	0	34	7	35.0
0	2	0	4	0	6	8	40.0
1	1	1	1	0	4	9	45.0
1	3	2	7	0	13	10	50.0
0	0	2	2	0	4	11	55.0
3	1	1	2	0	7	12	60.0
0	1	1	3	0	5	13	65.0
0	1	0	4	0	5	14	70.0
2	3	5	9	0	19	15	75.0
0	0	1	5	0	6	16	80.0
0	0	4	6	0	10	17	85.0
1	0	0	6	0	7	18	90.0
1	2	0	2	0	5	19	95.0
2	2	1	6	0	11	20	100.0

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

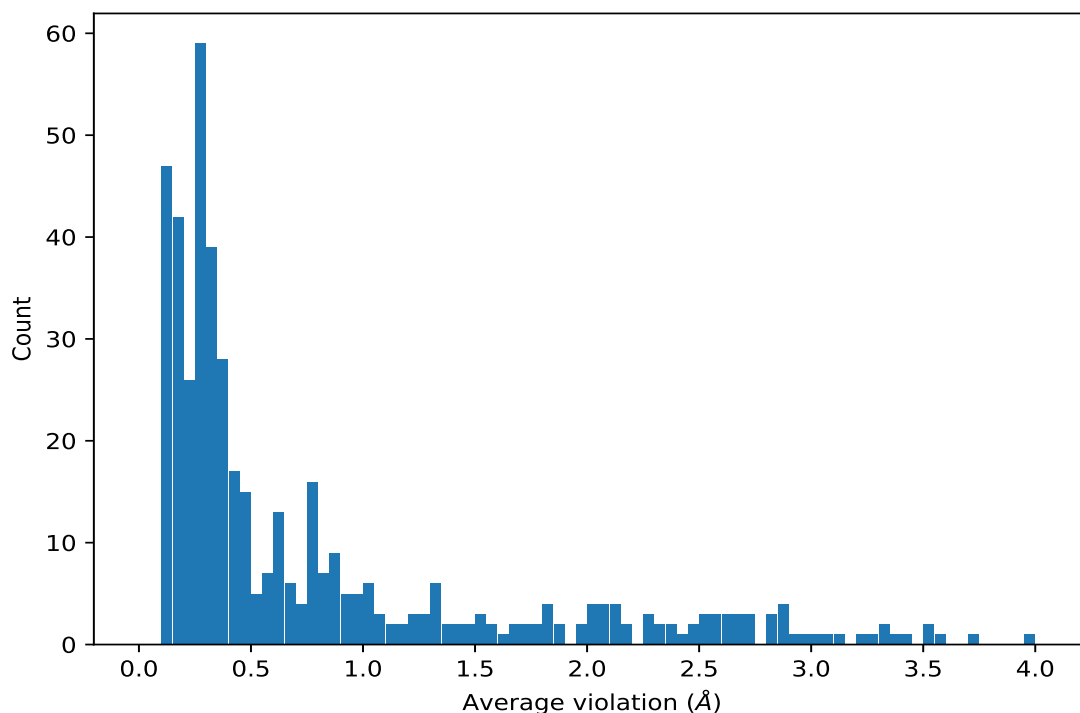
9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble [i](#)



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

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

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,206)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HB2	20	1.49	0.26	1.43
(1,3180)	1:A:242:ALA:H	1:A:263:ILE:HD13	20	0.79	0.25	0.82
(1,204)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HA	20	0.78	0.34	0.67
(1,148)	1:A:15:TYR:H	1:A:16:MET:HE3	20	0.7	0.26	0.66
(1,205)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HB1	20	0.69	0.31	0.62
(1,605)	1:A:37:LEU:HA	1:A:102:ALA:HB2	20	0.63	0.14	0.6
(1,129)	1:A:14:TRP:HA	1:A:16:MET:HE3	20	0.63	0.27	0.55
(1,3136)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:294:PHE:H	20	0.61	0.23	0.6
(1,1586)	1:A:102:ALA:H	1:A:102:ALA:HB2	20	0.6	0.01	0.6
(1,1585)	1:A:101:PRO:HA	1:A:102:ALA:HB2	20	0.58	0.04	0.57
(1,1061)	1:A:66:LEU:HA	1:A:66:LEU:HD23	20	0.38	0.05	0.36
(1,3134)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:293:ILE:HA	19	0.78	0.19	0.8
(1,155)	1:A:15:TYR:HA	1:A:16:MET:HE3	19	0.51	0.23	0.53
(1,1036)	1:A:65:SER:HA	1:A:66:LEU:HD23	19	0.46	0.13	0.44
(1,1050)	1:A:66:LEU:H	1:A:66:LEU:HD23	19	0.32	0.1	0.34
(1,563)	1:A:36:PHE:HA	1:A:102:ALA:HB2	19	0.29	0.15	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,2456)	1:A:156:PRO:HG2	1:A:172:MET:HE3	18	0.96	0.14	0.96
(1,3216)	1:A:242:ALA:HB2	1:A:258:LEU:HD23	18	0.73	0.23	0.72
(1,3166)	1:A:241:LYS:HA	1:A:263:ILE:HD13	18	0.68	0.23	0.71
(1,3133)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:293:ILE:H	18	0.53	0.17	0.46
(1,2610)	1:A:162:SER:HA	1:A:172:MET:HE3	18	0.41	0.1	0.45
(1,3378)	1:A:255:ALA:H	1:A:255:ALA:HB2	18	0.33	0.05	0.34
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD11	18	0.26	0.03	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD12	18	0.26	0.03	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD13	18	0.26	0.03	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD21	18	0.26	0.03	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD22	18	0.26	0.03	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD23	18	0.26	0.03	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD11	18	0.26	0.03	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD12	18	0.26	0.03	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD13	18	0.26	0.03	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD21	18	0.26	0.03	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD22	18	0.26	0.03	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD23	18	0.26	0.03	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD11	18	0.26	0.03	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD12	18	0.26	0.03	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD13	18	0.26	0.03	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD21	18	0.26	0.03	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD22	18	0.26	0.03	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD23	18	0.26	0.03	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD11	18	0.26	0.03	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD12	18	0.26	0.03	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD13	18	0.26	0.03	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD21	18	0.26	0.03	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD22	18	0.26	0.03	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD23	18	0.26	0.03	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD11	18	0.26	0.03	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD12	18	0.26	0.03	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD13	18	0.26	0.03	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD21	18	0.26	0.03	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD22	18	0.26	0.03	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD23	18	0.26	0.03	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD11	18	0.26	0.03	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD12	18	0.26	0.03	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD13	18	0.26	0.03	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD21	18	0.26	0.03	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD22	18	0.26	0.03	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD23	18	0.26	0.03	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,1896)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HD1	17	3.55	1.56	2.77
(1,1905)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HD1	17	3.31	1.34	2.9
(1,3356)	1:A:253:LYS:HA	1:A:255:ALA:HB2	17	0.97	0.43	0.88
(1,2576)	1:A:161:TRP:HB2	1:A:163:ALA:HB2	17	0.91	0.15	0.91
(1,3308)	1:A:247:VAL:HA	1:A:257:ALA:HB2	17	0.76	0.51	0.55
(1,3060)	1:A:238:VAL:HB	1:A:269:MET:HE1	17	0.64	0.34	0.55
(1,2595)	1:A:162:SER:H	1:A:172:MET:HE3	17	0.62	0.16	0.68
(1,3048)	1:A:238:VAL:H	1:A:269:MET:HE1	17	0.61	0.3	0.72
(1,758)	1:A:49:VAL:H	1:A:63:ILE:HD13	17	0.37	0.11	0.38
(1,806)	1:A:50:LEU:HG	1:A:63:ILE:HD12	17	0.3	0.17	0.26
(1,1906)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:144:PHE:HE1	16	2.7	1.21	2.2
(1,2427)	1:A:155:LYS:HA	1:A:172:MET:HE3	16	0.83	0.13	0.84
(1,2618)	1:A:162:SER:HB2	1:A:172:MET:HE3	16	0.58	0.12	0.6
(1,1234)	1:A:79:ASP:H	1:A:83:ALA:HB1	16	0.38	0.14	0.36
(1,616)	1:A:37:LEU:HG	1:A:102:ALA:HB2	16	0.36	0.2	0.33
(1,2364)	1:A:152:ILE:HA	1:A:163:ALA:HB2	16	0.29	0.06	0.27
(1,1903)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HA	15	3.99	0.21	4.02
(1,1894)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HA	15	3.71	0.25	3.74
(1,1902)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:H	15	3.01	0.28	2.96
(1,1908)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:177:TYR:HE2	15	2.7	0.25	2.81
(1,1901)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:133:ASP:HA	15	2.26	0.05	2.27
(1,1897)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:177:TYR:HE2	15	2.11	0.2	2.15
(1,1904)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HB2	15	2.09	0.23	2.13
(1,1904)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HB3	15	2.09	0.23	2.13
(1,1909)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:177:TYR:HD2	15	1.64	0.2	1.64
(1,1907)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:144:PHE:HZ	15	1.59	0.22	1.52
(1,1861)	1:A:131:LEU:HB2	1:A:132:TYR:HD1	15	1.47	0.21	1.48
(1,1895)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HB2	15	1.34	0.28	1.36
(1,1895)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HB3	15	1.34	0.28	1.36
(1,1898)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:177:TYR:HH	15	1.2	0.3	1.31
(1,1900)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:133:ASP:H	15	1.04	0.03	1.04
(1,2545)	1:A:160:TRP:HB2	1:A:172:MET:HE1	15	0.44	0.17	0.4
(1,1882)	1:A:132:TYR:HB2	1:A:132:TYR:HD1	15	0.42	0.02	0.42
(1,3488)	1:A:258:LEU:HD21	1:A:279:VAL:HB	15	0.41	0.19	0.34
(1,2546)	1:A:160:TRP:HB2	1:A:172:MET:HE2	15	0.35	0.18	0.32
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD11	15	0.26	0.1	0.24
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD12	15	0.26	0.1	0.24
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD13	15	0.26	0.1	0.24
(1,994)	1:A:63:ILE:HB	1:A:63:ILE:HD13	15	0.15	0.03	0.15
(1,3973)	1:A:94:ASP:HA	1:A:154:GLU:HB2	14	0.82	0.39	0.66
(1,3973)	1:A:94:ASP:HA	1:A:154:GLU:HB3	14	0.82	0.39	0.66
(1,1892)	1:A:132:TYR:HD1	1:A:177:TYR:HA	14	0.47	0.29	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,3205)	1:A:242:ALA:HB1	1:A:258:LEU:HD23	14	0.44	0.26	0.43
(1,201)	1:A:16:MET:HE1	1:A:37:LEU:HD23	14	0.27	0.14	0.22
(1,3360)	1:A:254:THR:H	1:A:255:ALA:HB2	14	0.25	0.13	0.2
(1,3440)	1:A:257:ALA:HB1	1:A:282:ARG:HH22	13	0.6	0.33	0.6
(1,1014)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HD11	13	0.38	0.29	0.29
(1,1014)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HD12	13	0.38	0.29	0.29
(1,1014)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HD13	13	0.38	0.29	0.29
(1,3351)	1:A:252:ASP:HA	1:A:255:ALA:HB2	13	0.34	0.11	0.36
(1,2621)	1:A:162:SER:HG	1:A:172:MET:HE3	13	0.31	0.13	0.29
(1,114)	1:A:13:ALA:HB1	1:A:14:TRP:HA	13	0.31	0.1	0.27
(1,3353)	1:A:253:LYS:H	1:A:255:ALA:HB2	12	0.88	0.24	0.94
(1,3054)	1:A:238:VAL:HA	1:A:269:MET:HE1	12	0.79	0.4	0.92
(1,187)	1:A:16:MET:H	1:A:16:MET:HE3	12	0.42	0.13	0.45
(1,2275)	1:A:149:ILE:HA	1:A:149:ILE:HD12	12	0.35	0.19	0.36
(1,2521)	1:A:160:TRP:H	1:A:172:MET:HE1	12	0.32	0.17	0.25
(1,3441)	1:A:257:ALA:HB2	1:A:258:LEU:H	12	0.2	0.06	0.19
(1,404)	1:A:28:LEU:H	1:A:28:LEU:HD21	12	0.18	0.05	0.19
(1,3327)	1:A:249:CYS:HG	1:A:251:TYR:HD1	11	1.01	0.29	0.99
(1,3328)	1:A:249:CYS:HG	1:A:251:TYR:HE1	11	0.82	0.42	0.81
(1,1760)	1:A:129:ARG:HA	1:A:149:ILE:HD12	11	0.69	0.27	0.75
(1,3137)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:294:PHE:HD1	11	0.27	0.14	0.18
(1,1999)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:144:PHE:HD2	10	1.83	0.65	2.16
(1,530)	1:A:35:MET:HA	1:A:36:PHE:HD2	10	1.66	0.07	1.64
(1,1998)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:144:PHE:HE2	10	1.35	0.37	1.5
(1,3085)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:263:ILE:HD12	10	1.08	0.55	1.34
(1,2998)	1:A:213:THR:H	1:A:214:THR:HB	10	0.83	0.3	0.77
(1,3497)	1:A:258:LEU:HD23	1:A:264:VAL:HG22	10	0.69	0.25	0.72
(1,3226)	1:A:242:ALA:HB3	1:A:291:VAL:HG13	10	0.58	0.07	0.6
(1,3148)	1:A:241:LYS:H	1:A:263:ILE:HD13	10	0.47	0.2	0.44
(1,540)	1:A:36:PHE:H	1:A:36:PHE:HD2	10	0.4	0.05	0.4
(1,1260)	1:A:80:HIS:HD1	1:A:83:ALA:HB2	10	0.38	0.25	0.3
(1,42)	1:A:7:ASP:H	1:A:13:ALA:HB1	10	0.36	0.24	0.34
(1,1243)	1:A:80:HIS:H	1:A:83:ALA:HB1	10	0.3	0.08	0.31
(1,2646)	1:A:163:ALA:HB3	1:A:164:ARG:HA	10	0.18	0.04	0.18
(1,1263)	1:A:80:HIS:HD2	1:A:83:ALA:HB2	9	0.6	0.2	0.56
(1,3552)	1:A:263:ILE:HD11	1:A:294:PHE:HE2	9	0.38	0.18	0.32
(1,1877)	1:A:132:TYR:HA	1:A:132:TYR:HD1	9	0.21	0.06	0.2
(1,3000)	1:A:217:PRO:HA	1:A:218:ALA:H	9	0.2	0.02	0.21
(1,3247)	1:A:243:ILE:HD13	1:A:290:HIS:HA	8	0.9	0.44	0.84
(1,203)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:H	8	0.38	0.19	0.36
(1,1201)	1:A:78:PHE:HA	1:A:83:ALA:HB1	8	0.37	0.22	0.28
(1,214)	1:A:16:MET:HE3	1:A:38:VAL:H	8	0.34	0.13	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,2995)	1:A:211:GLN:HB2	1:A:212:THR:HA	8	0.29	0.15	0.24
(1,1620)	1:A:122:GLU:HA	1:A:123:ASP:H	8	0.27	0.05	0.29
(1,1995)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:143:PRO:HA	7	3.25	0.15	3.34
(1,3084)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:263:ILE:HB	7	3.12	0.13	3.16
(1,1988)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:141:ASP:HA	7	2.92	0.44	3.01
(1,1983)	1:A:134:PHE:HD1	1:A:177:TYR:HH	7	2.74	0.21	2.7
(1,3083)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:263:ILE:HA	7	2.68	0.07	2.66
(1,1987)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:136:GLY:HA3	7	2.65	0.15	2.69
(1,1994)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:137:ASN:H	7	2.61	0.12	2.58
(1,1989)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:143:PRO:HA	7	2.59	0.13	2.64
(1,1992)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:136:GLY:H	7	2.59	0.18	2.63
(1,3086)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:264:VAL:H	7	2.3	0.16	2.24
(1,1996)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:144:PHE:H	7	2.27	0.15	2.27
(1,3087)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:265:LYS:H	7	2.12	0.26	2.09
(1,1986)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:136:GLY:H	7	2.07	0.16	2.08
(1,1993)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:136:GLY:HA3	7	2.02	0.14	2.05
(1,1985)	1:A:134:PHE:HE1	1:A:177:TYR:HH	7	1.99	0.28	1.97
(1,3052)	1:A:238:VAL:HA	1:A:239:PHE:HD2	7	1.5	0.16	1.44
(1,1981)	1:A:134:PHE:HD1	1:A:177:TYR:HE2	7	1.44	0.23	1.32
(1,2000)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:160:TRP:HZ3	7	1.36	0.36	1.43
(1,3069)	1:A:239:PHE:H	1:A:239:PHE:HD2	7	1.29	0.07	1.25
(1,3082)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:240:ALA:H	7	1.24	0.09	1.24
(1,1990)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:160:TRP:HZ3	7	1.13	0.36	1.16
(1,3116)	1:A:240:ALA:HB1	1:A:264:VAL:HG22	7	0.93	0.16	0.9
(1,3088)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:265:LYS:HA	7	0.91	0.27	0.88
(1,3090)	1:A:239:PHE:HE1	1:A:265:LYS:HA	7	0.91	0.28	1.0
(1,397)	1:A:27:ARG:HH11	1:A:37:LEU:HD23	7	0.65	0.35	0.45
(1,1960)	1:A:134:PHE:HA	1:A:134:PHE:HD1	7	0.57	0.06	0.55
(1,1611)	1:A:120:THR:HA	1:A:121:ALA:H	7	0.49	0.08	0.52
(1,3219)	1:A:242:ALA:HB2	1:A:261:GLY:H	7	0.39	0.17	0.37
(1,521)	1:A:34:GLY:HA2	1:A:99:ILE:HD13	7	0.36	0.11	0.42
(1,1626)	1:A:123:ASP:H	1:A:123:ASP:HB2	7	0.35	0.13	0.34
(1,2989)	1:A:204:ALA:H	1:A:204:ALA:HB1	7	0.3	0.16	0.22
(1,1596)	1:A:112:SER:H	1:A:112:SER:HB2	7	0.29	0.05	0.32
(1,2286)	1:A:149:ILE:HD12	1:A:150:LEU:H	7	0.27	0.1	0.23
(1,2465)	1:A:156:PRO:HD2	1:A:172:MET:HE3	7	0.19	0.05	0.17
(1,3972)	1:A:76:GLN:HG2	1:A:169:ARG:HA	6	0.88	0.62	0.8
(1,3972)	1:A:76:GLN:HG3	1:A:169:ARG:HA	6	0.88	0.62	0.8
(1,3002)	1:A:221:GLY:HA2	1:A:222:SER:H	6	0.41	0.11	0.43
(1,3004)	1:A:223:PRO:HA	1:A:224:GLY:H	6	0.4	0.13	0.4
(1,3321)	1:A:249:CYS:H	1:A:255:ALA:HB2	6	0.32	0.16	0.28
(1,2983)	1:A:198:TYR:H	1:A:198:TYR:HB2	6	0.31	0.05	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,2993)	1:A:210:PRO:HA	1:A:211:GLN:H	6	0.31	0.04	0.33
(1,1617)	1:A:121:ALA:H	1:A:122:GLU:HB2	6	0.26	0.08	0.26
(1,1617)	1:A:121:ALA:H	1:A:122:GLU:HB3	6	0.26	0.08	0.26
(1,3072)	1:A:239:PHE:HA	1:A:239:PHE:HD1	6	0.25	0.06	0.22
(1,2316)	1:A:150:LEU:HD11	1:A:165:ASN:HA	6	0.19	0.03	0.19
(1,2316)	1:A:150:LEU:HD12	1:A:165:ASN:HA	6	0.19	0.03	0.19
(1,2316)	1:A:150:LEU:HD13	1:A:165:ASN:HA	6	0.19	0.03	0.19
(1,2316)	1:A:150:LEU:HD21	1:A:165:ASN:HA	6	0.19	0.03	0.19
(1,2316)	1:A:150:LEU:HD22	1:A:165:ASN:HA	6	0.19	0.03	0.19
(1,2316)	1:A:150:LEU:HD23	1:A:165:ASN:HA	6	0.19	0.03	0.19
(1,1526)	1:A:96:THR:HG1	1:A:99:ILE:HD13	5	1.42	0.09	1.39
(1,1203)	1:A:78:PHE:HD1	1:A:83:ALA:HB1	5	0.97	0.81	0.55
(1,3970)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:153:ILE:HD11	5	0.78	0.43	0.64
(1,3970)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:153:ILE:HD12	5	0.78	0.43	0.64
(1,3970)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:153:ILE:HD13	5	0.78	0.43	0.64
(1,3486)	1:A:258:LEU:HD21	1:A:264:VAL:HG13	5	0.51	0.27	0.6
(1,2001)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:160:TRP:HH2	5	0.47	0.24	0.53
(1,1424)	1:A:90:ILE:H	1:A:97:THR:HG22	5	0.4	0.16	0.3
(1,2002)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:174:PRO:HD2	5	0.35	0.12	0.31
(1,3429)	1:A:257:ALA:H	1:A:258:LEU:HD22	5	0.3	0.13	0.26
(1,1608)	1:A:120:THR:H	1:A:120:THR:HB	5	0.27	0.17	0.24
(1,3675)	1:A:269:MET:HE2	1:A:275:TRP:HE3	5	0.2	0.06	0.22
(1,1606)	1:A:115:ALA:H	1:A:116:PRO:HD2	5	0.2	0.05	0.21
(1,2497)	1:A:158:GLU:H	1:A:158:GLU:HB2	5	0.13	0.03	0.12
(1,2208)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:160:TRP:HZ3	4	3.36	0.14	3.37
(1,2211)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:173:ILE:HG21	4	3.06	0.77	3.04
(1,2210)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:173:ILE:HA	4	2.89	0.2	2.82
(1,2186)	1:A:144:PHE:HD1	1:A:146:LYS:HA	4	2.87	0.1	2.88
(1,1914)	1:A:133:ASP:H	1:A:144:PHE:HD1	4	2.86	0.05	2.88
(1,2128)	1:A:142:LEU:HG	1:A:144:PHE:HD2	4	2.84	0.05	2.84
(1,1938)	1:A:133:ASP:HB2	1:A:144:PHE:HD1	4	2.83	0.04	2.82
(1,1928)	1:A:133:ASP:HA	1:A:144:PHE:HD1	4	2.69	0.04	2.68
(1,1915)	1:A:133:ASP:H	1:A:144:PHE:HE1	4	2.64	0.09	2.65
(1,2223)	1:A:144:PHE:HD2	1:A:173:ILE:HG22	4	2.46	0.12	2.46
(1,2209)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:160:TRP:HH2	4	2.44	0.1	2.45
(1,2212)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:173:ILE:HG23	4	2.38	0.59	2.4
(1,1886)	1:A:132:TYR:HB2	1:A:144:PHE:HE1	4	2.36	0.17	2.37
(1,2185)	1:A:144:PHE:HD1	1:A:145:LYS:HA	4	2.33	0.02	2.32
(1,2221)	1:A:144:PHE:HD2	1:A:173:ILE:HA	4	2.17	0.2	2.12
(1,1872)	1:A:132:TYR:H	1:A:144:PHE:HE1	4	2.14	0.13	2.09
(1,2187)	1:A:144:PHE:HD1	1:A:147:GLY:H	4	2.12	0.1	2.12
(1,2213)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:173:ILE:HG12	4	2.04	0.1	2.08

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,1929)	1:A:133:ASP:HA	1:A:144:PHE:HE1	4	2.04	0.05	2.01
(1,2222)	1:A:144:PHE:HD2	1:A:173:ILE:HB	4	1.89	0.13	1.88
(1,1871)	1:A:132:TYR:H	1:A:144:PHE:HD1	4	1.84	0.1	1.83
(1,1825)	1:A:130:THR:HB	1:A:144:PHE:HD1	4	1.82	0.15	1.86
(1,1531)	1:A:97:THR:H	1:A:99:ILE:HD13	4	1.74	0.01	1.74
(1,2188)	1:A:144:PHE:HD1	1:A:148:GLU:H	4	1.74	0.08	1.69
(1,2196)	1:A:144:PHE:HE1	1:A:177:TYR:HD2	4	1.67	0.03	1.67
(1,2217)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:174:PRO:HD2	4	1.58	0.22	1.58
(1,2193)	1:A:144:PHE:HE1	1:A:177:TYR:HA	4	1.5	0.21	1.6
(1,1964)	1:A:134:PHE:HA	1:A:144:PHE:HE1	4	1.31	0.04	1.3
(1,1826)	1:A:130:THR:HB	1:A:144:PHE:HE1	4	1.3	0.19	1.4
(1,1467)	1:A:92:TYR:HE2	1:A:97:THR:H	4	1.26	0.66	1.44
(1,2195)	1:A:144:PHE:HE1	1:A:177:TYR:HE2	4	1.23	0.12	1.19
(1,1951)	1:A:134:PHE:H	1:A:144:PHE:HD1	4	1.16	0.04	1.14
(1,1813)	1:A:130:THR:HA	1:A:144:PHE:HD1	4	1.1	0.15	1.13
(1,1952)	1:A:134:PHE:H	1:A:144:PHE:HE1	4	0.99	0.07	0.97
(1,2224)	1:A:144:PHE:HD2	1:A:174:PRO:HD2	4	0.89	0.22	0.91
(1,2184)	1:A:144:PHE:HD1	1:A:145:LYS:H	4	0.86	0.12	0.86
(1,2189)	1:A:144:PHE:HD1	1:A:177:TYR:HD2	4	0.83	0.04	0.82
(1,1796)	1:A:130:THR:H	1:A:144:PHE:HD1	4	0.59	0.1	0.63
(1,3971)	1:A:75:ASP:HB2	1:A:168:GLY:HA2	4	0.58	0.29	0.52
(1,3971)	1:A:75:ASP:HB2	1:A:168:GLY:HA3	4	0.58	0.29	0.52
(1,3438)	1:A:257:ALA:HB1	1:A:282:ARG:HH11	4	0.47	0.47	0.24
(1,2945)	1:A:185:SER:HB2	1:A:186:PRO:HA	4	0.46	0.13	0.52
(1,3030)	1:A:233:THR:HG1	1:A:235:ASN:HD22	4	0.41	0.13	0.46
(1,1991)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:160:TRP:HH2	4	0.4	0.24	0.32
(1,249)	1:A:20:SER:H	1:A:23:GLU:H	4	0.39	0.27	0.35
(1,1625)	1:A:122:GLU:HB2	1:A:123:ASP:HA	4	0.31	0.17	0.26
(1,3001)	1:A:220:SER:HA	1:A:221:GLY:H	4	0.3	0.07	0.3
(1,1259)	1:A:80:HIS:HD1	1:A:83:ALA:HB1	4	0.18	0.03	0.18
(1,1472)	1:A:92:TYR:HD2	1:A:96:THR:HA	3	3.5	0.18	3.59
(1,1474)	1:A:92:TYR:HD2	1:A:96:THR:HG1	3	3.4	0.62	3.69
(1,1473)	1:A:92:TYR:HD2	1:A:96:THR:HB	3	3.24	0.1	3.19
(1,1466)	1:A:92:TYR:HE2	1:A:96:THR:HA	3	2.45	0.22	2.37
(1,1475)	1:A:92:TYR:HD2	1:A:97:THR:H	3	2.01	0.3	1.84
(1,1471)	1:A:92:TYR:HD2	1:A:96:THR:H	3	1.84	0.08	1.83
(1,3201)	1:A:242:ALA:HB1	1:A:258:LEU:HD11	3	1.33	0.2	1.38
(1,3203)	1:A:242:ALA:HB1	1:A:258:LEU:HD13	3	1.17	0.18	1.15
(1,3202)	1:A:242:ALA:HB1	1:A:258:LEU:HD12	3	1.02	0.2	0.92
(1,1428)	1:A:90:ILE:HA	1:A:92:TYR:HE1	3	1.0	0.35	0.91
(1,709)	1:A:43:THR:HG1	1:A:62:ILE:HD11	3	0.63	0.2	0.68
(1,2229)	1:A:145:LYS:H	1:A:146:LYS:HD2	3	0.63	0.19	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,3200)	1:A:242:ALA:HB1	1:A:258:LEU:HG	3	0.62	0.22	0.54
(1,1304)	1:A:83:ALA:HB1	1:A:84:LEU:HA	3	0.54	0.02	0.53
(1,1476)	1:A:92:TYR:HD2	1:A:97:THR:HA	3	0.49	0.06	0.48
(1,3287)	1:A:246:ARG:HE	1:A:290:HIS:HD1	3	0.49	0.13	0.56
(1,274)	1:A:21:ARG:HA	1:A:39:ARG:HH21	3	0.46	0.1	0.44
(1,2216)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:174:PRO:HG2	3	0.45	0.21	0.49
(1,3677)	1:A:269:MET:HE3	1:A:275:TRP:HZ3	3	0.4	0.01	0.4
(1,3587)	1:A:264:VAL:HG13	1:A:279:VAL:HG23	3	0.4	0.08	0.45
(1,202)	1:A:16:MET:HE1	1:A:101:PRO:HA	3	0.39	0.06	0.4
(1,3217)	1:A:242:ALA:HB2	1:A:259:GLU:H	3	0.38	0.06	0.38
(1,2214)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:173:ILE:HD11	3	0.37	0.13	0.3
(1,2214)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:173:ILE:HD12	3	0.37	0.13	0.3
(1,2214)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:173:ILE:HD13	3	0.37	0.13	0.3
(1,3485)	1:A:258:LEU:HD21	1:A:264:VAL:HB	3	0.37	0.18	0.36
(1,1368)	1:A:87:PHE:HD1	1:A:90:ILE:HD13	3	0.36	0.29	0.16
(1,1982)	1:A:134:PHE:HD1	1:A:177:TYR:HD2	3	0.35	0.14	0.39
(1,1867)	1:A:131:LEU:HD11	1:A:179:GLU:HG2	3	0.34	0.16	0.24
(1,1867)	1:A:131:LEU:HD12	1:A:179:GLU:HG2	3	0.34	0.16	0.24
(1,1867)	1:A:131:LEU:HD13	1:A:179:GLU:HG2	3	0.34	0.16	0.24
(1,1867)	1:A:131:LEU:HD21	1:A:179:GLU:HG2	3	0.34	0.16	0.24
(1,1867)	1:A:131:LEU:HD22	1:A:179:GLU:HG2	3	0.34	0.16	0.24
(1,1867)	1:A:131:LEU:HD23	1:A:179:GLU:HG2	3	0.34	0.16	0.24
(1,1618)	1:A:122:GLU:H	1:A:122:GLU:HB2	3	0.33	0.05	0.32
(1,2992)	1:A:207:TYR:HA	1:A:207:TYR:HD1	3	0.33	0.02	0.33
(1,2374)	1:A:152:ILE:HD11	1:A:163:ALA:HB3	3	0.32	0.02	0.31
(1,2374)	1:A:152:ILE:HD12	1:A:163:ALA:HB3	3	0.32	0.02	0.31
(1,2374)	1:A:152:ILE:HD13	1:A:163:ALA:HB3	3	0.32	0.02	0.31
(1,1605)	1:A:115:ALA:H	1:A:115:ALA:HB1	3	0.3	0.08	0.28
(1,3210)	1:A:242:ALA:HB1	1:A:291:VAL:HB	3	0.28	0.08	0.29
(1,3496)	1:A:258:LEU:HD23	1:A:264:VAL:HA	3	0.27	0.09	0.26
(1,3414)	1:A:256:LEU:HD11	1:A:279:VAL:HB	3	0.23	0.09	0.23
(1,3414)	1:A:256:LEU:HD12	1:A:279:VAL:HB	3	0.23	0.09	0.23
(1,3414)	1:A:256:LEU:HD13	1:A:279:VAL:HB	3	0.23	0.09	0.23
(1,3414)	1:A:256:LEU:HD21	1:A:279:VAL:HB	3	0.23	0.09	0.23
(1,3414)	1:A:256:LEU:HD22	1:A:279:VAL:HB	3	0.23	0.09	0.23
(1,3414)	1:A:256:LEU:HD23	1:A:279:VAL:HB	3	0.23	0.09	0.23
(1,2963)	1:A:187:HIS:HB2	1:A:188:GLY:HA2	3	0.23	0.08	0.24
(1,455)	1:A:32:ARG:H	1:A:32:ARG:HE	3	0.21	0.03	0.22
(1,510)	1:A:34:GLY:H	1:A:96:THR:HG23	3	0.21	0.04	0.21
(1,3493)	1:A:258:LEU:HD22	1:A:279:VAL:HB	3	0.21	0.07	0.25
(1,2986)	1:A:199:GLY:H	1:A:200:ILE:H	3	0.17	0.04	0.17
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:143:PRO:HD2	3	0.16	0.02	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:143:PRO:HD3	3	0.16	0.02	0.15
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:143:PRO:HD2	3	0.16	0.02	0.15
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:143:PRO:HD3	3	0.16	0.02	0.15
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:143:PRO:HD2	3	0.16	0.02	0.15
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:143:PRO:HD3	3	0.16	0.02	0.15
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:143:PRO:HD2	3	0.16	0.02	0.15
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:143:PRO:HD3	3	0.16	0.02	0.15
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:143:PRO:HD2	3	0.16	0.02	0.15
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:143:PRO:HD3	3	0.16	0.02	0.15
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:143:PRO:HD2	3	0.16	0.02	0.15
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:143:PRO:HD3	3	0.16	0.02	0.15
(1,2788)	1:A:173:ILE:HD11	1:A:178:VAL:HG12	3	0.16	0.02	0.16
(1,2788)	1:A:173:ILE:HD12	1:A:178:VAL:HG12	3	0.16	0.02	0.16
(1,2788)	1:A:173:ILE:HD13	1:A:178:VAL:HG12	3	0.16	0.02	0.16
(1,2142)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:143:PRO:HD2	3	0.15	0.02	0.15
(1,2142)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:143:PRO:HD2	3	0.15	0.02	0.15
(1,2142)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:143:PRO:HD2	3	0.15	0.02	0.15
(1,2142)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:143:PRO:HD2	3	0.15	0.02	0.15
(1,2142)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:143:PRO:HD2	3	0.15	0.02	0.15
(1,2142)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:143:PRO:HD2	3	0.15	0.02	0.15
(1,1682)	1:A:127:TYR:HD1	1:A:150:LEU:H	2	3.5	0.09	3.5
(1,1683)	1:A:127:TYR:HD1	1:A:150:LEU:HA	2	3.32	0.09	3.32
(1,1228)	1:A:78:PHE:HE2	1:A:88:TYR:HH	2	2.98	0.0	2.98
(1,1142)	1:A:72:LYS:HA	1:A:78:PHE:HD2	2	2.86	0.28	2.86
(1,1149)	1:A:73:ILE:H	1:A:78:PHE:HD2	2	2.84	0.19	2.84
(1,1148)	1:A:73:ILE:H	1:A:78:PHE:HE2	2	2.62	0.14	2.62
(1,1164)	1:A:73:ILE:HG21	1:A:78:PHE:HE2	2	2.55	0.32	2.55
(1,1168)	1:A:73:ILE:HG22	1:A:78:PHE:HE2	2	2.51	0.28	2.51
(1,1210)	1:A:78:PHE:HE1	1:A:87:PHE:HD1	2	2.5	0.06	2.5
(1,1172)	1:A:73:ILE:HG23	1:A:78:PHE:HE2	2	2.5	0.06	2.5
(1,1209)	1:A:78:PHE:HE1	1:A:87:PHE:HA	2	2.26	0.1	2.26
(1,1165)	1:A:73:ILE:HG21	1:A:78:PHE:HD2	2	2.19	0.57	2.19
(1,1191)	1:A:77:GLU:HA	1:A:78:PHE:HD2	2	2.06	0.04	2.06
(1,1159)	1:A:73:ILE:HB	1:A:78:PHE:HD2	2	1.96	0.12	1.96
(1,1211)	1:A:78:PHE:HE1	1:A:87:PHE:HE1	2	1.86	0.02	1.86
(1,1226)	1:A:78:PHE:HE2	1:A:88:TYR:HE1	2	1.76	0.08	1.76
(1,1226)	1:A:78:PHE:HE2	1:A:88:TYR:HE2	2	1.76	0.08	1.76
(1,1169)	1:A:73:ILE:HG22	1:A:78:PHE:HD2	2	1.5	0.51	1.5
(1,1208)	1:A:78:PHE:HE1	1:A:87:PHE:H	2	1.3	0.12	1.3
(1,1689)	1:A:127:TYR:HE1	1:A:164:ARG:HE	2	1.26	0.44	1.26
(1,1232)	1:A:78:PHE:HD2	1:A:88:TYR:HE1	2	1.07	0.09	1.07
(1,1232)	1:A:78:PHE:HD2	1:A:88:TYR:HE2	2	1.07	0.09	1.07

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,2447)	1:A:156:PRO:HB2	1:A:172:MET:HE3	2	1.03	0.1	1.03
(1,1192)	1:A:78:PHE:H	1:A:78:PHE:HD2	2	1.02	0.02	1.02
(1,3638)	1:A:266:VAL:HG21	1:A:269:MET:HE2	2	0.95	0.23	0.95
(1,71)	1:A:10:ASP:H	1:A:14:TRP:HE1	2	0.88	0.24	0.88
(1,1681)	1:A:127:TYR:HD1	1:A:128:VAL:H	2	0.88	0.02	0.88
(1,1684)	1:A:127:TYR:HD1	1:A:151:VAL:HA	2	0.88	0.12	0.88
(1,1230)	1:A:78:PHE:HD2	1:A:84:LEU:HG	2	0.87	0.05	0.87
(1,70)	1:A:10:ASP:H	1:A:14:TRP:HD1	2	0.8	0.4	0.8
(1,324)	1:A:23:GLU:HA	1:A:26:THR:HG23	2	0.77	0.04	0.77
(1,1231)	1:A:78:PHE:HD2	1:A:84:LEU:HD11	2	0.77	0.1	0.77
(1,1231)	1:A:78:PHE:HD2	1:A:84:LEU:HD12	2	0.77	0.1	0.77
(1,1231)	1:A:78:PHE:HD2	1:A:84:LEU:HD13	2	0.77	0.1	0.77
(1,1231)	1:A:78:PHE:HD2	1:A:84:LEU:HD21	2	0.77	0.1	0.77
(1,1231)	1:A:78:PHE:HD2	1:A:84:LEU:HD22	2	0.77	0.1	0.77
(1,1231)	1:A:78:PHE:HD2	1:A:84:LEU:HD23	2	0.77	0.1	0.77
(1,1470)	1:A:92:TYR:HD2	1:A:95:THR:HA	2	0.76	0.12	0.76
(1,1212)	1:A:78:PHE:HE1	1:A:87:PHE:HZ	2	0.72	0.02	0.72
(1,3329)	1:A:249:CYS:HG	1:A:251:TYR:HH	2	0.7	0.04	0.7
(1,1687)	1:A:127:TYR:HE1	1:A:151:VAL:HA	2	0.68	0.15	0.68
(1,2530)	1:A:160:TRP:HA	1:A:172:MET:HE2	2	0.6	0.01	0.6
(1,3680)	1:A:269:MET:HE3	1:A:286:PHE:HZ	2	0.53	0.07	0.53
(1,1227)	1:A:78:PHE:HE2	1:A:88:TYR:HD1	2	0.49	0.06	0.49
(1,1227)	1:A:78:PHE:HE2	1:A:88:TYR:HD2	2	0.49	0.06	0.49
(1,1214)	1:A:78:PHE:HE1	1:A:87:PHE:HD2	2	0.48	0.08	0.48
(1,2656)	1:A:164:ARG:HA	1:A:165:ASN:HB2	2	0.48	0.04	0.48
(1,3006)	1:A:226:ALA:HA	1:A:227:ILE:H	2	0.44	0.02	0.44
(1,3248)	1:A:243:ILE:HD13	1:A:291:VAL:HA	2	0.4	0.11	0.4
(1,2985)	1:A:198:TYR:HB2	1:A:199:GLY:HA3	2	0.4	0.1	0.4
(1,1598)	1:A:112:SER:HA	1:A:113:VAL:H	2	0.36	0.13	0.36
(1,77)	1:A:10:ASP:HA	1:A:14:TRP:HE1	2	0.34	0.06	0.34
(1,115)	1:A:13:ALA:HB1	1:A:14:TRP:HD1	2	0.34	0.12	0.34
(1,1597)	1:A:112:SER:HA	1:A:112:SER:HG	2	0.34	0.16	0.34
(1,2220)	1:A:144:PHE:HD2	1:A:150:LEU:HD11	2	0.32	0.08	0.32
(1,2220)	1:A:144:PHE:HD2	1:A:150:LEU:HD12	2	0.32	0.08	0.32
(1,2220)	1:A:144:PHE:HD2	1:A:150:LEU:HD13	2	0.32	0.08	0.32
(1,2220)	1:A:144:PHE:HD2	1:A:150:LEU:HD21	2	0.32	0.08	0.32
(1,2220)	1:A:144:PHE:HD2	1:A:150:LEU:HD22	2	0.32	0.08	0.32
(1,2220)	1:A:144:PHE:HD2	1:A:150:LEU:HD23	2	0.32	0.08	0.32
(1,2462)	1:A:156:PRO:HD2	1:A:172:MET:HG2	2	0.32	0.12	0.32
(1,1673)	1:A:127:TYR:HB2	1:A:127:TYR:HD2	2	0.31	0.0	0.31
(1,3678)	1:A:269:MET:HE3	1:A:275:TRP:HZ2	2	0.29	0.11	0.29
(1,3139)	1:A:240:ALA:HB3	1:A:264:VAL:H	2	0.28	0.16	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,3494)	1:A:258:LEU:HD22	1:A:279:VAL:HG11	2	0.28	0.04	0.28
(1,3199)	1:A:242:ALA:HB1	1:A:244:GLN:H	2	0.27	0.1	0.27
(1,90)	1:A:11:ARG:HA	1:A:14:TRP:HE3	2	0.26	0.02	0.26
(1,307)	1:A:22:GLN:H	1:A:22:GLN:HE21	2	0.24	0.14	0.24
(1,3490)	1:A:258:LEU:HD21	1:A:279:VAL:HG22	2	0.24	0.08	0.24
(1,1013)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HB	2	0.24	0.0	0.24
(1,2679)	1:A:165:ASN:H	1:A:165:ASN:HB2	2	0.24	0.0	0.24
(1,2428)	1:A:155:LYS:HB2	1:A:155:LYS:HD2	2	0.23	0.07	0.23
(1,1224)	1:A:78:PHE:HE2	1:A:84:LEU:HD11	2	0.2	0.07	0.2
(1,1224)	1:A:78:PHE:HE2	1:A:84:LEU:HD12	2	0.2	0.07	0.2
(1,1224)	1:A:78:PHE:HE2	1:A:84:LEU:HD13	2	0.2	0.07	0.2
(1,1224)	1:A:78:PHE:HE2	1:A:84:LEU:HD21	2	0.2	0.07	0.2
(1,1224)	1:A:78:PHE:HE2	1:A:84:LEU:HD22	2	0.2	0.07	0.2
(1,1224)	1:A:78:PHE:HE2	1:A:84:LEU:HD23	2	0.2	0.07	0.2
(1,24)	1:A:6:PHE:H	1:A:6:PHE:HD1	2	0.18	0.02	0.18
(1,24)	1:A:6:PHE:H	1:A:6:PHE:HD2	2	0.18	0.02	0.18
(1,2886)	1:A:178:VAL:HG13	1:A:178:VAL:HG21	2	0.18	0.01	0.18
(1,31)	1:A:6:PHE:HE1	1:A:100:GLU:HA	2	0.18	0.02	0.18
(1,31)	1:A:6:PHE:HE2	1:A:100:GLU:HA	2	0.18	0.02	0.18
(1,2913)	1:A:182:VAL:H	1:A:182:VAL:HG11	2	0.18	0.06	0.18
(1,2758)	1:A:172:MET:HA	1:A:172:MET:HE2	2	0.16	0.01	0.16
(1,3005)	1:A:225:ALA:H	1:A:225:ALA:HB1	2	0.16	0.05	0.16
(1,3876)	1:A:287:PRO:HA	1:A:290:HIS:H	2	0.15	0.04	0.15
(1,331)	1:A:24:ALA:H	1:A:39:ARG:HE	2	0.14	0.01	0.14
(1,3525)	1:A:260:VAL:HG23	1:A:261:GLY:H	2	0.14	0.02	0.14
(1,1160)	1:A:73:ILE:HB	1:A:84:LEU:HD11	2	0.13	0.01	0.13
(1,1160)	1:A:73:ILE:HB	1:A:84:LEU:HD12	2	0.13	0.01	0.13
(1,1160)	1:A:73:ILE:HB	1:A:84:LEU:HD13	2	0.13	0.01	0.13
(1,1160)	1:A:73:ILE:HB	1:A:84:LEU:HD21	2	0.13	0.01	0.13
(1,1160)	1:A:73:ILE:HB	1:A:84:LEU:HD22	2	0.13	0.01	0.13
(1,1160)	1:A:73:ILE:HB	1:A:84:LEU:HD23	2	0.13	0.01	0.13
(1,653)	1:A:38:VAL:HG11	1:A:50:LEU:HD11	2	0.12	0.01	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG11	1:A:50:LEU:HD12	2	0.12	0.01	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG11	1:A:50:LEU:HD13	2	0.12	0.01	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG11	1:A:50:LEU:HD21	2	0.12	0.01	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG11	1:A:50:LEU:HD22	2	0.12	0.01	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG11	1:A:50:LEU:HD23	2	0.12	0.01	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG12	1:A:50:LEU:HD11	2	0.12	0.01	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG12	1:A:50:LEU:HD12	2	0.12	0.01	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG12	1:A:50:LEU:HD13	2	0.12	0.01	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG12	1:A:50:LEU:HD21	2	0.12	0.01	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG12	1:A:50:LEU:HD22	2	0.12	0.01	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

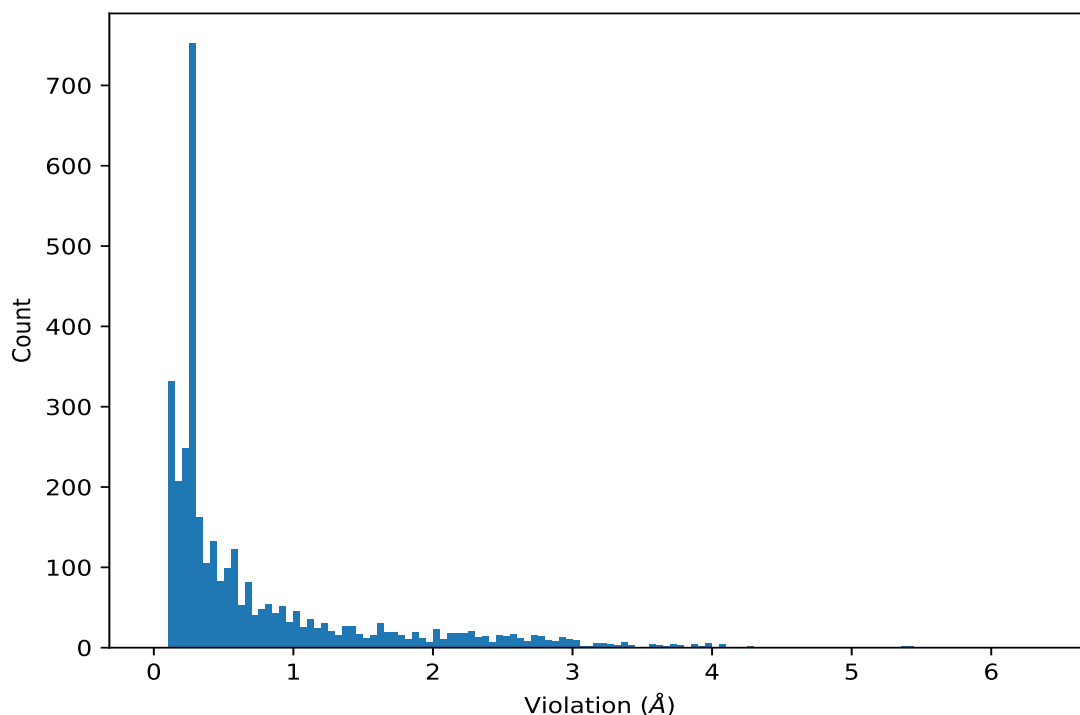
Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,653)	1:A:38:VAL:HG12	1:A:50:LEU:HD23	2	0.12	0.01	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG13	1:A:50:LEU:HD11	2	0.12	0.01	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG13	1:A:50:LEU:HD12	2	0.12	0.01	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG13	1:A:50:LEU:HD13	2	0.12	0.01	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG13	1:A:50:LEU:HD21	2	0.12	0.01	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG13	1:A:50:LEU:HD22	2	0.12	0.01	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG13	1:A:50:LEU:HD23	2	0.12	0.01	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG21	1:A:50:LEU:HD11	2	0.12	0.01	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG21	1:A:50:LEU:HD12	2	0.12	0.01	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG21	1:A:50:LEU:HD13	2	0.12	0.01	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG21	1:A:50:LEU:HD21	2	0.12	0.01	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG21	1:A:50:LEU:HD22	2	0.12	0.01	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG21	1:A:50:LEU:HD23	2	0.12	0.01	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG22	1:A:50:LEU:HD11	2	0.12	0.01	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG22	1:A:50:LEU:HD12	2	0.12	0.01	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG22	1:A:50:LEU:HD13	2	0.12	0.01	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG22	1:A:50:LEU:HD21	2	0.12	0.01	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG22	1:A:50:LEU:HD22	2	0.12	0.01	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG22	1:A:50:LEU:HD23	2	0.12	0.01	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG23	1:A:50:LEU:HD11	2	0.12	0.01	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG23	1:A:50:LEU:HD12	2	0.12	0.01	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG23	1:A:50:LEU:HD13	2	0.12	0.01	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG23	1:A:50:LEU:HD21	2	0.12	0.01	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG23	1:A:50:LEU:HD22	2	0.12	0.01	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG23	1:A:50:LEU:HD23	2	0.12	0.01	0.12
(1,3584)	1:A:264:VAL:HG13	1:A:266:VAL:HA	2	0.12	0.02	0.12
(1,920)	1:A:59:SER:H	1:A:59:SER:HG	2	0.12	0.0	0.12

¹Number of violated models, ²Standard deviation

9.5 All violated distance restraints [i](#)

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

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1896)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HD1	18	6.38
(1,1896)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HD1	11	6.2
(1,1896)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HD1	14	6.03
(1,1905)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HD1	18	5.66
(1,1905)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HD1	11	5.44
(1,1896)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HD1	17	5.43
(1,1906)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:144:PHE:HE1	16	5.39
(1,1896)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HD1	4	5.36
(1,1905)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HD1	14	5.31
(1,1906)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:144:PHE:HE1	5	5.15
(1,1906)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:144:PHE:HE1	17	4.99
(1,1905)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HD1	4	4.92
(1,1905)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HD1	17	4.85
(1,1903)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HA	9	4.27
(1,1903)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HA	7	4.25
(1,1903)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HA	15	4.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1903)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HA	8	4.1
(1,1903)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HA	20	4.09
(1,1903)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HA	13	4.08
(1,1903)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HA	5	4.06
(1,1903)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HA	16	4.02
(1,1903)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HA	18	3.98
(1,1894)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HA	9	3.97
(1,1474)	1:A:92:TYR:HD2	1:A:96:THR:HG1	6	3.97
(1,1903)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HA	14	3.96
(1,1894)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HA	15	3.95
(1,1903)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HA	19	3.94
(1,1894)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HA	7	3.94
(1,1894)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HA	20	3.87
(1,2211)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:173:ILE:HG21	16	3.86
(1,1903)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HA	12	3.86
(1,1894)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HA	13	3.86
(1,1894)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HA	5	3.84
(1,2211)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:173:ILE:HG21	5	3.8
(1,1903)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HA	11	3.8
(1,1894)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HA	14	3.78
(1,1894)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HA	16	3.74
(1,1894)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HA	8	3.73
(1,1894)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HA	19	3.73
(1,1903)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HA	17	3.72
(1,1474)	1:A:92:TYR:HD2	1:A:96:THR:HG1	20	3.69
(1,1894)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HA	18	3.66
(1,1472)	1:A:92:TYR:HD2	1:A:96:THR:HA	15	3.65
(1,1902)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:H	9	3.63
(1,1894)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HA	11	3.62
(1,1682)	1:A:127:TYR:HD1	1:A:150:LEU:H	10	3.59
(1,1472)	1:A:92:TYR:HD2	1:A:96:THR:HA	6	3.59
(1,1894)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HA	12	3.58
(1,1988)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:141:ASP:HA	17	3.56
(1,2208)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:160:TRP:HZ3	17	3.55
(1,1903)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HA	4	3.46
(1,1995)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:143:PRO:HA	17	3.42
(1,1683)	1:A:127:TYR:HD1	1:A:150:LEU:HA	10	3.42
(1,1995)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:143:PRO:HA	14	3.41
(1,1894)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HA	17	3.4
(1,1682)	1:A:127:TYR:HD1	1:A:150:LEU:H	9	3.4
(1,1988)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:141:ASP:HA	2	3.39
(1,1902)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:H	15	3.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2208)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:160:TRP:HZ3	6	3.38
(1,1473)	1:A:92:TYR:HD2	1:A:96:THR:HB	6	3.38
(1,2208)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:160:TRP:HZ3	5	3.36
(1,1995)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:143:PRO:HA	2	3.34
(1,1995)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:143:PRO:HA	4	3.34
(1,3084)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:263:ILE:HB	5	3.33
(1,1896)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HD1	9	3.3
(1,1902)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:H	7	3.25
(1,1902)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:H	8	3.25
(1,1472)	1:A:92:TYR:HD2	1:A:96:THR:HA	20	3.25
(1,1905)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HD1	9	3.23
(1,1683)	1:A:127:TYR:HD1	1:A:150:LEU:HA	9	3.23
(1,3084)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:263:ILE:HB	16	3.22
(1,2210)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:173:ILE:HA	6	3.21
(1,3084)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:263:ILE:HB	8	3.2
(1,1473)	1:A:92:TYR:HD2	1:A:96:THR:HB	20	3.19
(1,3084)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:263:ILE:HB	7	3.16
(1,2208)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:160:TRP:HZ3	16	3.16
(1,1995)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:143:PRO:HA	1	3.16
(1,1473)	1:A:92:TYR:HD2	1:A:96:THR:HB	15	3.16
(1,1902)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:H	12	3.15
(1,1142)	1:A:72:LYS:HA	1:A:78:PHE:HD2	7	3.14
(1,1995)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:143:PRO:HA	18	3.06
(1,1983)	1:A:134:PHE:HD1	1:A:177:TYR:HH	18	3.06
(1,1995)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:143:PRO:HA	11	3.05
(1,1988)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:141:ASP:HA	4	3.05
(1,1902)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:H	19	3.04
(1,1908)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:177:TYR:HE2	12	3.02
(1,1902)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:H	18	3.02
(1,1149)	1:A:73:ILE:H	1:A:78:PHE:HD2	7	3.02
(1,3084)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:263:ILE:HB	10	3.01
(1,3084)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:263:ILE:HB	14	3.01
(1,1988)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:141:ASP:HA	11	3.01
(1,1983)	1:A:134:PHE:HD1	1:A:177:TYR:HH	1	2.99
(1,1894)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HA	4	2.98
(1,1228)	1:A:78:PHE:HE2	1:A:88:TYR:HH	7	2.98
(1,2212)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:173:ILE:HG23	6	2.97
(1,1908)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:177:TYR:HE2	16	2.97
(1,1228)	1:A:78:PHE:HE2	1:A:88:TYR:HH	8	2.97
(1,2212)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:173:ILE:HG23	17	2.96
(1,2186)	1:A:144:PHE:HD1	1:A:146:LYS:HA	6	2.96
(1,2186)	1:A:144:PHE:HD1	1:A:146:LYS:HA	16	2.96

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1908)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:177:TYR:HE2	9	2.96
(1,1902)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:H	20	2.96
(1,1905)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HD1	13	2.93
(1,1896)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HD1	13	2.93
(1,3084)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:263:ILE:HB	20	2.92
(1,2128)	1:A:142:LEU:HG	1:A:144:PHE:HD2	17	2.92
(1,1908)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:177:TYR:HE2	7	2.92
(1,1908)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:177:TYR:HE2	8	2.92
(1,1902)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:H	11	2.92
(1,1902)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:H	14	2.92
(1,2210)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:173:ILE:HA	17	2.91
(1,1914)	1:A:133:ASP:H	1:A:144:PHE:HD1	16	2.91
(1,1914)	1:A:133:ASP:H	1:A:144:PHE:HD1	17	2.91
(1,1905)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HD1	7	2.91
(1,1902)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:H	13	2.91
(1,1905)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HD1	16	2.9
(1,1938)	1:A:133:ASP:HB2	1:A:144:PHE:HD1	17	2.89
(1,1902)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:H	5	2.87
(1,1164)	1:A:73:ILE:HG21	1:A:78:PHE:HE2	8	2.87
(1,2128)	1:A:142:LEU:HG	1:A:144:PHE:HD2	5	2.86
(1,1987)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:136:GLY:HA3	14	2.85
(1,1938)	1:A:133:ASP:HB2	1:A:144:PHE:HD1	5	2.85
(1,1908)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:177:TYR:HE2	15	2.85
(1,1914)	1:A:133:ASP:H	1:A:144:PHE:HD1	6	2.84
(1,2128)	1:A:142:LEU:HG	1:A:144:PHE:HD2	16	2.83
(1,1908)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:177:TYR:HE2	20	2.83
(1,1994)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:137:ASN:H	14	2.82
(1,1987)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:136:GLY:HA3	4	2.82
(1,1983)	1:A:134:PHE:HD1	1:A:177:TYR:HH	11	2.82
(1,2186)	1:A:144:PHE:HD1	1:A:146:LYS:HA	5	2.81
(1,1992)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:136:GLY:H	14	2.81
(1,1908)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:177:TYR:HE2	18	2.81
(1,3083)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:263:ILE:HA	5	2.8
(1,1938)	1:A:133:ASP:HB2	1:A:144:PHE:HD1	6	2.8
(1,1914)	1:A:133:ASP:H	1:A:144:PHE:HD1	5	2.8
(1,1168)	1:A:73:ILE:HG22	1:A:78:PHE:HE2	7	2.8
(1,1896)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HD1	1	2.79
(1,1992)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:136:GLY:H	17	2.78
(1,1938)	1:A:133:ASP:HB2	1:A:144:PHE:HD1	16	2.78
(1,2128)	1:A:142:LEU:HG	1:A:144:PHE:HD2	6	2.77
(1,1989)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:143:PRO:HA	14	2.77
(1,1896)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HD1	7	2.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1165)	1:A:73:ILE:HG21	1:A:78:PHE:HD2	8	2.76
(1,1148)	1:A:73:ILE:H	1:A:78:PHE:HE2	7	2.76
(1,1928)	1:A:133:ASP:HA	1:A:144:PHE:HD1	17	2.75
(1,1466)	1:A:92:TYR:HE2	1:A:96:THR:HA	15	2.75
(1,2210)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:173:ILE:HA	5	2.74
(1,2186)	1:A:144:PHE:HD1	1:A:146:LYS:HA	17	2.74
(1,1915)	1:A:133:ASP:H	1:A:144:PHE:HE1	17	2.74
(1,3083)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:263:ILE:HA	8	2.73
(1,1896)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HD1	16	2.73
(1,3083)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:263:ILE:HA	10	2.72
(1,1987)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:136:GLY:HA3	1	2.72
(1,1905)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HD1	5	2.72
(1,1994)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:137:ASN:H	4	2.71
(1,1989)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:143:PRO:HA	17	2.71
(1,1915)	1:A:133:ASP:H	1:A:144:PHE:HE1	16	2.71
(1,2210)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:173:ILE:HA	16	2.7
(1,1992)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:136:GLY:H	4	2.7
(1,1983)	1:A:134:PHE:HD1	1:A:177:TYR:HH	2	2.7
(1,1902)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:H	16	2.7
(1,1987)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:136:GLY:HA3	17	2.69
(1,1928)	1:A:133:ASP:HA	1:A:144:PHE:HD1	6	2.68
(1,1905)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HD1	8	2.68
(1,1905)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HD1	20	2.68
(1,1928)	1:A:133:ASP:HA	1:A:144:PHE:HD1	5	2.67
(1,3083)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:263:ILE:HA	20	2.66
(1,1989)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:143:PRO:HA	2	2.66
(1,1928)	1:A:133:ASP:HA	1:A:144:PHE:HD1	16	2.66
(1,1908)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:177:TYR:HE2	14	2.65
(1,1149)	1:A:73:ILE:H	1:A:78:PHE:HD2	8	2.65
(1,1989)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:143:PRO:HA	4	2.64
(1,1896)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HD1	5	2.64
(1,3083)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:263:ILE:HA	7	2.63
(1,1994)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:137:ASN:H	17	2.63
(1,1992)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:136:GLY:H	2	2.63
(1,3083)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:263:ILE:HA	14	2.62
(1,1988)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:141:ASP:HA	1	2.62
(1,3083)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:263:ILE:HA	16	2.61
(1,3086)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:264:VAL:H	8	2.6
(1,1902)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:H	4	2.6
(1,2223)	1:A:144:PHE:HD2	1:A:173:ILE:HG22	16	2.59
(1,1915)	1:A:133:ASP:H	1:A:144:PHE:HE1	6	2.59
(1,1904)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HB2	9	2.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1904)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HB3	9	2.59
(1,1142)	1:A:72:LYS:HA	1:A:78:PHE:HD2	8	2.59
(1,1994)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:137:ASN:H	1	2.58
(1,1983)	1:A:134:PHE:HD1	1:A:177:TYR:HH	17	2.58
(1,1908)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:177:TYR:HE2	5	2.58
(1,1908)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:177:TYR:HE2	13	2.58
(1,1905)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HD1	15	2.58
(1,1896)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HD1	20	2.58
(1,2223)	1:A:144:PHE:HD2	1:A:173:ILE:HG22	5	2.56
(1,2209)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:160:TRP:HH2	6	2.56
(1,1988)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:141:ASP:HA	14	2.56
(1,1902)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:H	17	2.56
(1,1210)	1:A:78:PHE:HE1	1:A:87:PHE:HD1	7	2.56
(1,1172)	1:A:73:ILE:HG23	1:A:78:PHE:HE2	7	2.56
(1,1999)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:144:PHE:HD2	2	2.54
(1,1994)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:137:ASN:H	2	2.54
(1,1989)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:143:PRO:HA	1	2.54
(1,1987)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:136:GLY:HA3	2	2.54
(1,1906)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:144:PHE:HE1	9	2.54
(1,1992)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:136:GLY:H	1	2.53
(1,1886)	1:A:132:TYR:HB2	1:A:144:PHE:HE1	6	2.53
(1,1474)	1:A:92:TYR:HD2	1:A:96:THR:HG1	15	2.53
(1,2209)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:160:TRP:HH2	17	2.52
(1,1983)	1:A:134:PHE:HD1	1:A:177:TYR:HH	14	2.52
(1,1896)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HD1	19	2.52
(1,1886)	1:A:132:TYR:HB2	1:A:144:PHE:HE1	16	2.52
(1,1915)	1:A:133:ASP:H	1:A:144:PHE:HE1	5	2.51
(1,1994)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:137:ASN:H	18	2.5
(1,1996)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:144:PHE:H	17	2.49
(1,1987)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:136:GLY:HA3	11	2.49
(1,1908)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:177:TYR:HE2	4	2.49
(1,1906)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:144:PHE:HE1	6	2.49
(1,1896)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HD1	15	2.49
(1,2221)	1:A:144:PHE:HD2	1:A:173:ILE:HA	6	2.48
(1,1989)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:143:PRO:HA	11	2.48
(1,1983)	1:A:134:PHE:HD1	1:A:177:TYR:HH	4	2.48
(1,1148)	1:A:73:ILE:H	1:A:78:PHE:HE2	8	2.47
(1,3087)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:265:LYS:H	8	2.46
(1,1994)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:137:ASN:H	11	2.46
(1,1905)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HD1	19	2.46
(1,1896)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HD1	8	2.46
(1,1996)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:144:PHE:H	2	2.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1987)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:136:GLY:HA3	18	2.45
(1,1475)	1:A:92:TYR:HD2	1:A:97:THR:H	6	2.44
(1,1210)	1:A:78:PHE:HE1	1:A:87:PHE:HD1	8	2.44
(1,3086)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:264:VAL:H	10	2.43
(1,1172)	1:A:73:ILE:HG23	1:A:78:PHE:HE2	8	2.43
(1,3087)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:265:LYS:H	20	2.41
(1,1999)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:144:PHE:HD2	14	2.41
(1,1985)	1:A:134:PHE:HE1	1:A:177:TYR:HH	18	2.41
(1,1992)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:136:GLY:H	18	2.39
(1,1897)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:177:TYR:HE2	9	2.39
(1,2209)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:160:TRP:HH2	16	2.38
(1,2185)	1:A:144:PHE:HD1	1:A:145:LYS:HA	6	2.37
(1,1897)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:177:TYR:HE2	12	2.37
(1,1466)	1:A:92:TYR:HE2	1:A:96:THR:HA	6	2.37
(1,1999)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:144:PHE:HD2	4	2.36
(1,1904)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HB2	18	2.36
(1,1904)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HB3	18	2.36
(1,1209)	1:A:78:PHE:HE1	1:A:87:PHE:HA	7	2.36
(1,3086)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:264:VAL:H	20	2.35
(1,2223)	1:A:144:PHE:HD2	1:A:173:ILE:HG22	6	2.35
(1,1989)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:143:PRO:HA	18	2.35
(1,1872)	1:A:132:TYR:H	1:A:144:PHE:HE1	16	2.35
(1,1986)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:136:GLY:H	14	2.34
(1,2223)	1:A:144:PHE:HD2	1:A:173:ILE:HG22	17	2.33
(1,1996)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:144:PHE:H	14	2.33
(1,1908)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:177:TYR:HE2	11	2.33
(1,1908)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:177:TYR:HE2	19	2.33
(1,1901)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:133:ASP:HA	13	2.33
(1,2209)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:160:TRP:HH2	5	2.32
(1,2185)	1:A:144:PHE:HD1	1:A:145:LYS:HA	5	2.32
(1,1901)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:133:ASP:HA	7	2.32
(1,3087)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:265:LYS:H	7	2.31
(1,2185)	1:A:144:PHE:HD1	1:A:145:LYS:HA	16	2.31
(1,2185)	1:A:144:PHE:HD1	1:A:145:LYS:HA	17	2.31
(1,1901)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:133:ASP:HA	15	2.31
(1,1901)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:133:ASP:HA	5	2.3
(1,1901)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:133:ASP:HA	20	2.3
(1,2211)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:173:ILE:HG21	17	2.29
(1,1985)	1:A:134:PHE:HE1	1:A:177:TYR:HH	1	2.29
(1,1901)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:133:ASP:HA	11	2.29
(1,1901)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:133:ASP:HA	19	2.29
(1,2211)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:173:ILE:HG21	6	2.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1992)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:136:GLY:H	11	2.28
(1,1908)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:177:TYR:HE2	17	2.28
(1,1906)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:144:PHE:HE1	15	2.28
(1,1897)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:177:TYR:HE2	8	2.28
(1,1999)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:144:PHE:HD2	11	2.27
(1,1996)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:144:PHE:H	4	2.27
(1,1901)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:133:ASP:HA	16	2.27
(1,2187)	1:A:144:PHE:HD1	1:A:147:GLY:H	16	2.26
(1,1897)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:177:TYR:HE2	18	2.26
(1,1904)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HB2	13	2.25
(1,1904)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HB3	13	2.25
(1,1901)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:133:ASP:HA	9	2.25
(1,1901)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:133:ASP:HA	12	2.25
(1,1901)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:133:ASP:HA	14	2.25
(1,3086)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:264:VAL:H	5	2.24
(1,3086)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:264:VAL:H	16	2.24
(1,1988)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:141:ASP:HA	18	2.24
(1,1906)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:144:PHE:HE1	8	2.24
(1,1906)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:144:PHE:HE1	12	2.23
(1,1466)	1:A:92:TYR:HE2	1:A:96:THR:HA	20	2.23
(1,1168)	1:A:73:ILE:HG22	1:A:78:PHE:HE2	8	2.23
(1,1164)	1:A:73:ILE:HG21	1:A:78:PHE:HE2	7	2.23
(1,3086)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:264:VAL:H	7	2.22
(1,1907)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:144:PHE:HZ	9	2.22
(1,1901)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:133:ASP:HA	17	2.22
(1,1886)	1:A:132:TYR:HB2	1:A:144:PHE:HE1	5	2.22
(1,2221)	1:A:144:PHE:HD2	1:A:173:ILE:HA	17	2.21
(1,1993)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:136:GLY:HA3	4	2.21
(1,1901)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:133:ASP:HA	8	2.21
(1,1901)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:133:ASP:HA	18	2.21
(1,1897)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:177:TYR:HE2	15	2.21
(1,1897)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:177:TYR:HE2	16	2.21
(1,1996)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:144:PHE:H	1	2.19
(1,1203)	1:A:78:PHE:HD1	1:A:83:ALA:HB1	7	2.19
(1,1999)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:144:PHE:HD2	18	2.18
(1,1986)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:136:GLY:H	17	2.18
(1,1905)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HD1	12	2.18
(1,1897)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:177:TYR:HE2	14	2.18
(1,2187)	1:A:144:PHE:HD1	1:A:147:GLY:H	5	2.17
(1,1906)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:144:PHE:HE1	7	2.17
(1,1904)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HB2	7	2.17
(1,1904)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HB3	7	2.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1904)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HB2	11	2.17
(1,1904)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HB3	11	2.17
(1,1904)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HB2	8	2.16
(1,1904)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HB3	8	2.16
(1,1886)	1:A:132:TYR:HB2	1:A:144:PHE:HE1	17	2.16
(1,1999)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:144:PHE:HD2	1	2.15
(1,1897)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:177:TYR:HE2	7	2.15
(1,1209)	1:A:78:PHE:HE1	1:A:87:PHE:HA	8	2.15
(1,1993)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:136:GLY:HA3	14	2.14
(1,1986)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:136:GLY:H	4	2.14
(1,1904)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HB2	15	2.14
(1,1904)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HB3	15	2.14
(1,1993)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:136:GLY:HA3	17	2.13
(1,1929)	1:A:133:ASP:HA	1:A:144:PHE:HE1	17	2.13
(1,1906)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:144:PHE:HE1	19	2.13
(1,1904)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HB2	20	2.13
(1,1904)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HB3	20	2.13
(1,2213)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:173:ILE:HG12	5	2.12
(1,2213)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:173:ILE:HG12	16	2.12
(1,1996)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:144:PHE:H	11	2.12
(1,1901)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:133:ASP:HA	4	2.12
(1,1897)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:177:TYR:HE2	20	2.12
(1,1872)	1:A:132:TYR:H	1:A:144:PHE:HE1	17	2.12
(1,1904)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HB2	19	2.1
(1,1904)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HB3	19	2.1
(1,1191)	1:A:77:GLU:HA	1:A:78:PHE:HD2	8	2.1
(1,3087)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:265:LYS:H	10	2.09
(1,1909)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:177:TYR:HD2	9	2.09
(1,1896)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HD1	12	2.09
(1,2222)	1:A:144:PHE:HD2	1:A:173:ILE:HB	6	2.08
(1,1986)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:136:GLY:H	2	2.08
(1,1897)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:177:TYR:HE2	11	2.08
(1,1159)	1:A:73:ILE:HB	1:A:78:PHE:HD2	7	2.08
(1,1996)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:144:PHE:H	18	2.07
(1,1872)	1:A:132:TYR:H	1:A:144:PHE:HE1	5	2.07
(1,2187)	1:A:144:PHE:HD1	1:A:147:GLY:H	17	2.06
(1,1985)	1:A:134:PHE:HE1	1:A:177:TYR:HH	11	2.06
(1,3086)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:264:VAL:H	14	2.05
(1,2213)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:173:ILE:HG12	17	2.05
(1,2000)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:160:TRP:HZ3	17	2.05
(1,1993)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:136:GLY:HA3	1	2.05
(1,1904)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HB2	14	2.05

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1904)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HB3	14	2.05
(1,3972)	1:A:76:GLN:HG2	1:A:169:ARG:HA	12	2.04
(1,3972)	1:A:76:GLN:HG3	1:A:169:ARG:HA	12	2.04
(1,2221)	1:A:144:PHE:HD2	1:A:173:ILE:HA	5	2.04
(1,1986)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:136:GLY:H	1	2.04
(1,1906)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:144:PHE:HE1	18	2.04
(1,1897)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:177:TYR:HE2	13	2.04
(1,1897)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:177:TYR:HE2	5	2.03
(1,1929)	1:A:133:ASP:HA	1:A:144:PHE:HE1	16	2.02
(1,1906)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:144:PHE:HE1	11	2.02
(1,1191)	1:A:77:GLU:HA	1:A:78:PHE:HD2	7	2.02
(1,1929)	1:A:133:ASP:HA	1:A:144:PHE:HE1	6	2.01
(1,1904)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HB2	16	2.01
(1,1904)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HB3	16	2.01
(1,1872)	1:A:132:TYR:H	1:A:144:PHE:HE1	6	2.01
(1,1169)	1:A:73:ILE:HG22	1:A:78:PHE:HD2	7	2.01
(1,2187)	1:A:144:PHE:HD1	1:A:147:GLY:H	6	2.0
(1,1897)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:177:TYR:HE2	19	2.0
(1,1929)	1:A:133:ASP:HA	1:A:144:PHE:HE1	5	1.99
(1,1871)	1:A:132:TYR:H	1:A:144:PHE:HD1	16	1.99
(1,1825)	1:A:130:THR:HB	1:A:144:PHE:HD1	16	1.99
(1,1467)	1:A:92:TYR:HE2	1:A:97:THR:H	6	1.99
(1,3087)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:265:LYS:H	16	1.97
(1,1985)	1:A:134:PHE:HE1	1:A:177:TYR:HH	2	1.97
(1,1993)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:136:GLY:HA3	2	1.96
(1,1471)	1:A:92:TYR:HD2	1:A:96:THR:H	6	1.95
(1,2221)	1:A:144:PHE:HD2	1:A:173:ILE:HA	16	1.94
(1,3087)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:265:LYS:H	5	1.93
(1,1906)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:144:PHE:HE1	14	1.93
(1,1906)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:144:PHE:HE1	20	1.93
(1,1904)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HB2	5	1.93
(1,1904)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HB3	5	1.93
(1,1904)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HB2	12	1.93
(1,1904)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HB3	12	1.93
(1,2222)	1:A:144:PHE:HD2	1:A:173:ILE:HB	17	1.92
(1,1985)	1:A:134:PHE:HE1	1:A:177:TYR:HH	17	1.92
(1,1909)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:177:TYR:HD2	12	1.91
(1,1895)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HB2	9	1.9
(1,1895)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HB3	9	1.9
(1,2213)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:173:ILE:HG12	6	1.88
(1,2188)	1:A:144:PHE:HD1	1:A:148:GLU:H	16	1.88
(1,1861)	1:A:131:LEU:HB2	1:A:132:TYR:HD1	19	1.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,206)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HB2	3	1.87
(1,1825)	1:A:130:THR:HB	1:A:144:PHE:HD1	17	1.87
(1,1211)	1:A:78:PHE:HE1	1:A:87:PHE:HE1	7	1.87
(1,2217)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:174:PRO:HD2	6	1.86
(1,1993)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:136:GLY:HA3	18	1.86
(1,1906)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:144:PHE:HE1	4	1.86
(1,1905)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HD1	1	1.86
(1,1871)	1:A:132:TYR:H	1:A:144:PHE:HD1	5	1.86
(1,2222)	1:A:144:PHE:HD2	1:A:173:ILE:HB	5	1.85
(1,206)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HB2	7	1.85
(1,1986)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:136:GLY:H	11	1.85
(1,1986)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:136:GLY:H	18	1.85
(1,1825)	1:A:130:THR:HB	1:A:144:PHE:HD1	5	1.85
(1,1159)	1:A:73:ILE:HB	1:A:78:PHE:HD2	8	1.85
(1,1990)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:160:TRP:HZ3	17	1.84
(1,1475)	1:A:92:TYR:HD2	1:A:97:THR:H	20	1.84
(1,1226)	1:A:78:PHE:HE2	1:A:88:TYR:HE1	8	1.84
(1,1226)	1:A:78:PHE:HE2	1:A:88:TYR:HE2	8	1.84
(1,1211)	1:A:78:PHE:HE1	1:A:87:PHE:HE1	8	1.84
(1,2212)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:173:ILE:HG23	16	1.83
(1,206)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HB2	1	1.83
(1,1471)	1:A:92:TYR:HD2	1:A:96:THR:H	15	1.83
(1,1998)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:144:PHE:HE2	2	1.82
(1,1981)	1:A:134:PHE:HD1	1:A:177:TYR:HE2	1	1.8
(1,1871)	1:A:132:TYR:H	1:A:144:PHE:HD1	17	1.8
(1,1993)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:136:GLY:HA3	11	1.79
(1,206)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HB2	6	1.77
(1,1909)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:177:TYR:HD2	8	1.77
(1,1909)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:177:TYR:HD2	18	1.77
(1,530)	1:A:35:MET:HA	1:A:36:PHE:HD2	14	1.76
(1,530)	1:A:35:MET:HA	1:A:36:PHE:HD2	18	1.76
(1,2212)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:173:ILE:HG23	5	1.76
(1,1909)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:177:TYR:HD2	19	1.76
(1,1907)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:144:PHE:HZ	12	1.76
(1,1897)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:177:TYR:HE2	4	1.76
(1,1475)	1:A:92:TYR:HD2	1:A:97:THR:H	15	1.76
(1,206)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HB2	4	1.75
(1,1531)	1:A:97:THR:H	1:A:99:ILE:HD13	3	1.75
(1,1531)	1:A:97:THR:H	1:A:99:ILE:HD13	12	1.75
(1,1471)	1:A:92:TYR:HD2	1:A:96:THR:H	20	1.75
(1,3052)	1:A:238:VAL:HA	1:A:239:PHE:HD2	14	1.74
(1,1998)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:144:PHE:HE2	14	1.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1906)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:144:PHE:HE1	13	1.74
(1,530)	1:A:35:MET:HA	1:A:36:PHE:HD2	8	1.73
(1,206)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HB2	14	1.73
(1,1909)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:177:TYR:HD2	15	1.73
(1,1907)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:144:PHE:HZ	8	1.73
(1,1531)	1:A:97:THR:H	1:A:99:ILE:HD13	14	1.73
(1,1531)	1:A:97:THR:H	1:A:99:ILE:HD13	19	1.73
(1,3052)	1:A:238:VAL:HA	1:A:239:PHE:HD2	8	1.72
(1,2222)	1:A:144:PHE:HD2	1:A:173:ILE:HB	16	1.72
(1,2217)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:174:PRO:HD2	17	1.72
(1,1909)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:177:TYR:HD2	16	1.72
(1,1907)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:144:PHE:HZ	19	1.72
(1,1871)	1:A:132:TYR:H	1:A:144:PHE:HD1	6	1.72
(1,2188)	1:A:144:PHE:HD1	1:A:148:GLU:H	6	1.71
(1,1999)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:144:PHE:HD2	17	1.71
(1,1985)	1:A:134:PHE:HE1	1:A:177:TYR:HH	14	1.71
(1,1907)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:144:PHE:HZ	18	1.71
(1,3356)	1:A:253:LYS:HA	1:A:255:ALA:HB2	1	1.7
(1,3087)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:265:LYS:H	14	1.7
(1,2196)	1:A:144:PHE:HE1	1:A:177:TYR:HD2	6	1.7
(1,2196)	1:A:144:PHE:HE1	1:A:177:TYR:HD2	16	1.7
(1,1689)	1:A:127:TYR:HE1	1:A:164:ARG:HE	10	1.7
(1,1861)	1:A:131:LEU:HB2	1:A:132:TYR:HD1	17	1.69
(1,1226)	1:A:78:PHE:HE2	1:A:88:TYR:HE1	7	1.69
(1,1226)	1:A:78:PHE:HE2	1:A:88:TYR:HE2	7	1.69
(1,2188)	1:A:144:PHE:HD1	1:A:148:GLU:H	5	1.68
(1,2188)	1:A:144:PHE:HD1	1:A:148:GLU:H	17	1.68
(1,206)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HB2	12	1.68
(1,1998)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:144:PHE:HE2	4	1.68
(1,1981)	1:A:134:PHE:HD1	1:A:177:TYR:HE2	11	1.68
(1,3356)	1:A:253:LYS:HA	1:A:255:ALA:HB2	16	1.67
(1,2193)	1:A:144:PHE:HE1	1:A:177:TYR:HA	16	1.67
(1,530)	1:A:35:MET:HA	1:A:36:PHE:HD2	16	1.66
(1,3356)	1:A:253:LYS:HA	1:A:255:ALA:HB2	17	1.66
(1,1907)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:144:PHE:HZ	16	1.66
(1,1203)	1:A:78:PHE:HD1	1:A:83:ALA:HB1	8	1.66
(1,530)	1:A:35:MET:HA	1:A:36:PHE:HD2	20	1.65
(1,2196)	1:A:144:PHE:HE1	1:A:177:TYR:HD2	5	1.65
(1,2196)	1:A:144:PHE:HE1	1:A:177:TYR:HD2	17	1.65
(1,1907)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:144:PHE:HZ	15	1.65
(1,1904)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HB2	4	1.65
(1,1904)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HB3	4	1.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1896)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HD1	2	1.65
(1,3328)	1:A:249:CYS:HG	1:A:251:TYR:HE1	19	1.64
(1,1909)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:177:TYR:HD2	7	1.64
(1,1904)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HB2	17	1.64
(1,1904)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HB3	17	1.64
(1,1897)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:177:TYR:HE2	17	1.64
(1,1895)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HB2	18	1.64
(1,1895)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HB3	18	1.64
(1,530)	1:A:35:MET:HA	1:A:36:PHE:HD2	9	1.63
(1,530)	1:A:35:MET:HA	1:A:36:PHE:HD2	2	1.62
(1,530)	1:A:35:MET:HA	1:A:36:PHE:HD2	13	1.62
(1,1165)	1:A:73:ILE:HG21	1:A:78:PHE:HD2	7	1.62
(1,206)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HB2	10	1.61
(1,530)	1:A:35:MET:HA	1:A:36:PHE:HD2	15	1.6
(1,3973)	1:A:94:ASP:HA	1:A:154:GLU:HB2	4	1.6
(1,3973)	1:A:94:ASP:HA	1:A:154:GLU:HB3	4	1.6
(1,3085)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:263:ILE:HD12	14	1.6
(1,2193)	1:A:144:PHE:HE1	1:A:177:TYR:HA	5	1.6
(1,2193)	1:A:144:PHE:HE1	1:A:177:TYR:HA	17	1.6
(1,1981)	1:A:134:PHE:HD1	1:A:177:TYR:HE2	18	1.6
(1,1895)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HB2	11	1.6
(1,1895)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HB3	11	1.6
(1,1861)	1:A:131:LEU:HB2	1:A:132:TYR:HD1	5	1.6
(1,1861)	1:A:131:LEU:HB2	1:A:132:TYR:HD1	13	1.6
(1,3970)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:153:ILE:HD11	10	1.59
(1,3970)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:153:ILE:HD12	10	1.59
(1,3970)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:153:ILE:HD13	10	1.59
(1,1998)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:144:PHE:HE2	11	1.59
(1,3085)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:263:ILE:HD12	10	1.58
(1,1825)	1:A:130:THR:HB	1:A:144:PHE:HD1	6	1.58
(1,1526)	1:A:96:THR:HG1	1:A:99:ILE:HD13	8	1.58
(1,1909)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:177:TYR:HD2	11	1.57
(1,3247)	1:A:243:ILE:HD13	1:A:290:HIS:HA	6	1.56
(1,1861)	1:A:131:LEU:HB2	1:A:132:TYR:HD1	16	1.56
(1,530)	1:A:35:MET:HA	1:A:36:PHE:HD2	4	1.55
(1,2000)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:160:TRP:HZ3	4	1.55
(1,1998)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:144:PHE:HE2	18	1.55
(1,1985)	1:A:134:PHE:HE1	1:A:177:TYR:HH	4	1.55
(1,1895)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HB2	13	1.55
(1,1895)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HB3	13	1.55
(1,3247)	1:A:243:ILE:HD13	1:A:290:HIS:HA	1	1.54
(1,3201)	1:A:242:ALA:HB1	1:A:258:LEU:HD11	10	1.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3327)	1:A:249:CYS:HG	1:A:251:TYR:HD1	19	1.53
(1,3085)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:263:ILE:HD12	5	1.52
(1,3085)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:263:ILE:HD12	8	1.52
(1,1909)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:177:TYR:HD2	20	1.52
(1,1907)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:144:PHE:HZ	11	1.52
(1,3052)	1:A:238:VAL:HA	1:A:239:PHE:HD2	10	1.51
(1,1909)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:177:TYR:HD2	4	1.51
(1,1907)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:144:PHE:HZ	7	1.51
(1,3973)	1:A:94:ASP:HA	1:A:154:GLU:HB2	5	1.5
(1,3973)	1:A:94:ASP:HA	1:A:154:GLU:HB3	5	1.5
(1,1909)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:177:TYR:HD2	14	1.49
(1,1861)	1:A:131:LEU:HB2	1:A:132:TYR:HD1	8	1.49
(1,1861)	1:A:131:LEU:HB2	1:A:132:TYR:HD1	20	1.49
(1,3085)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:263:ILE:HD12	16	1.48
(1,1861)	1:A:131:LEU:HB2	1:A:132:TYR:HD1	7	1.48
(1,206)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HB2	2	1.47
(1,2000)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:160:TRP:HZ3	14	1.47
(1,1898)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:177:TYR:HH	8	1.47
(1,1898)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:177:TYR:HH	18	1.47
(1,1895)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HB2	19	1.47
(1,1895)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HB3	19	1.47
(1,1861)	1:A:131:LEU:HB2	1:A:132:TYR:HD1	4	1.47
(1,3308)	1:A:247:VAL:HA	1:A:257:ALA:HB2	7	1.46
(1,1998)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:144:PHE:HE2	1	1.46
(1,1909)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:177:TYR:HD2	5	1.46
(1,1861)	1:A:131:LEU:HB2	1:A:132:TYR:HD1	18	1.46
(1,1428)	1:A:90:ILE:HA	1:A:92:TYR:HE1	20	1.46
(1,1909)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:177:TYR:HD2	13	1.45
(1,1907)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:144:PHE:HZ	20	1.45
(1,1826)	1:A:130:THR:HB	1:A:144:PHE:HE1	16	1.45
(1,3356)	1:A:253:LYS:HA	1:A:255:ALA:HB2	11	1.44
(1,3308)	1:A:247:VAL:HA	1:A:257:ALA:HB2	4	1.44
(1,3052)	1:A:238:VAL:HA	1:A:239:PHE:HD2	16	1.44
(1,206)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HB2	5	1.44
(1,1907)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:144:PHE:HZ	4	1.44
(1,1907)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:144:PHE:HZ	14	1.44
(1,1898)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:177:TYR:HH	14	1.44
(1,1467)	1:A:92:TYR:HE2	1:A:97:THR:H	20	1.44
(1,2217)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:174:PRO:HD2	5	1.43
(1,2195)	1:A:144:PHE:HE1	1:A:177:TYR:HE2	6	1.43
(1,2000)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:160:TRP:HZ3	11	1.43
(1,1526)	1:A:96:THR:HG1	1:A:99:ILE:HD13	15	1.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1467)	1:A:92:TYR:HE2	1:A:97:THR:H	15	1.43
(1,1208)	1:A:78:PHE:HE1	1:A:87:PHE:H	7	1.43
(1,206)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HB2	8	1.42
(1,206)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HB2	15	1.42
(1,1861)	1:A:131:LEU:HB2	1:A:132:TYR:HD1	14	1.42
(1,129)	1:A:14:TRP:HA	1:A:16:MET:HE3	12	1.42
(1,3203)	1:A:242:ALA:HB1	1:A:258:LEU:HD13	10	1.41
(1,3069)	1:A:239:PHE:H	1:A:239:PHE:HD2	14	1.41
(1,3052)	1:A:238:VAL:HA	1:A:239:PHE:HD2	5	1.41
(1,3052)	1:A:238:VAL:HA	1:A:239:PHE:HD2	7	1.41
(1,1907)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:144:PHE:HZ	5	1.41
(1,148)	1:A:15:TYR:H	1:A:16:MET:HE3	12	1.41
(1,206)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HB2	20	1.4
(1,1826)	1:A:130:THR:HB	1:A:144:PHE:HE1	5	1.4
(1,1907)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:144:PHE:HZ	13	1.39
(1,1895)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HB2	14	1.39
(1,1895)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HB3	14	1.39
(1,1895)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HB2	15	1.39
(1,1895)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HB3	15	1.39
(1,1861)	1:A:131:LEU:HB2	1:A:132:TYR:HD1	15	1.39
(1,1826)	1:A:130:THR:HB	1:A:144:PHE:HE1	17	1.39
(1,1526)	1:A:96:THR:HG1	1:A:99:ILE:HD13	17	1.39
(1,3308)	1:A:247:VAL:HA	1:A:257:ALA:HB2	15	1.38
(1,3201)	1:A:242:ALA:HB1	1:A:258:LEU:HD11	9	1.38
(1,3069)	1:A:239:PHE:H	1:A:239:PHE:HD2	5	1.38
(1,1964)	1:A:134:PHE:HA	1:A:144:PHE:HE1	17	1.38
(1,1861)	1:A:131:LEU:HB2	1:A:132:TYR:HD1	11	1.38
(1,3180)	1:A:242:ALA:H	1:A:263:ILE:HD13	19	1.37
(1,3308)	1:A:247:VAL:HA	1:A:257:ALA:HB2	8	1.36
(1,206)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HB2	9	1.36
(1,1898)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:177:TYR:HH	15	1.36
(1,1895)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HB2	7	1.36
(1,1895)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HB3	7	1.36
(1,1895)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HB2	20	1.36
(1,1895)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HB3	20	1.36
(1,1526)	1:A:96:THR:HG1	1:A:99:ILE:HD13	18	1.36
(1,3308)	1:A:247:VAL:HA	1:A:257:ALA:HB2	17	1.35
(1,206)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HB2	13	1.35
(1,1898)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:177:TYR:HH	13	1.35
(1,1898)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:177:TYR:HH	9	1.34
(1,1526)	1:A:96:THR:HG1	1:A:99:ILE:HD13	20	1.34
(1,3327)	1:A:249:CYS:HG	1:A:251:TYR:HD1	12	1.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3082)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:240:ALA:H	7	1.32
(1,3082)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:240:ALA:H	20	1.32
(1,2217)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:174:PRO:HD2	16	1.32
(1,1981)	1:A:134:PHE:HD1	1:A:177:TYR:HE2	2	1.32
(1,1898)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:177:TYR:HH	16	1.32
(1,3327)	1:A:249:CYS:HG	1:A:251:TYR:HD1	16	1.31
(1,1898)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:177:TYR:HH	12	1.31
(1,1898)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:177:TYR:HH	20	1.31
(1,3202)	1:A:242:ALA:HB1	1:A:258:LEU:HD12	10	1.3
(1,3054)	1:A:238:VAL:HA	1:A:269:MET:HE1	18	1.3
(1,1981)	1:A:134:PHE:HD1	1:A:177:TYR:HE2	14	1.3
(1,1964)	1:A:134:PHE:HA	1:A:144:PHE:HE1	6	1.3
(1,3328)	1:A:249:CYS:HG	1:A:251:TYR:HE1	16	1.29
(1,3308)	1:A:247:VAL:HA	1:A:257:ALA:HB2	20	1.29
(1,3082)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:240:ALA:H	8	1.29
(1,3069)	1:A:239:PHE:H	1:A:239:PHE:HD2	16	1.29
(1,1964)	1:A:134:PHE:HA	1:A:144:PHE:HE1	5	1.29
(1,1895)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HB2	8	1.29
(1,1895)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HB3	8	1.29
(1,3216)	1:A:242:ALA:HB2	1:A:258:LEU:HD23	17	1.28
(1,3052)	1:A:238:VAL:HA	1:A:239:PHE:HD2	20	1.28
(1,204)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HA	1	1.28
(1,1813)	1:A:130:THR:HA	1:A:144:PHE:HD1	16	1.28
(1,3438)	1:A:257:ALA:HB1	1:A:282:ARG:HH11	20	1.27
(1,1990)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:160:TRP:HZ3	14	1.27
(1,1909)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:177:TYR:HD2	17	1.27
(1,1964)	1:A:134:PHE:HA	1:A:144:PHE:HE1	16	1.26
(1,3088)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:265:LYS:HA	8	1.25
(1,3069)	1:A:239:PHE:H	1:A:239:PHE:HD2	7	1.25
(1,206)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HB2	18	1.25
(1,204)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HA	6	1.25
(1,1898)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:177:TYR:HH	7	1.25
(1,3356)	1:A:253:LYS:HA	1:A:255:ALA:HB2	18	1.24
(1,3082)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:240:ALA:H	5	1.24
(1,3069)	1:A:239:PHE:H	1:A:239:PHE:HD2	8	1.24
(1,3069)	1:A:239:PHE:H	1:A:239:PHE:HD2	10	1.24
(1,3054)	1:A:238:VAL:HA	1:A:269:MET:HE1	15	1.24
(1,2998)	1:A:213:THR:H	1:A:214:THR:HB	9	1.24
(1,206)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HB2	11	1.24
(1,204)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HA	3	1.24
(1,1990)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:160:TRP:HZ3	11	1.24
(1,1907)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:144:PHE:HZ	17	1.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1898)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:177:TYR:HH	11	1.24
(1,3090)	1:A:239:PHE:HE1	1:A:265:LYS:HA	20	1.23
(1,3082)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:240:ALA:H	10	1.23
(1,3082)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:240:ALA:H	16	1.23
(1,2195)	1:A:144:PHE:HE1	1:A:177:TYR:HE2	16	1.23
(1,204)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HA	14	1.23
(1,1895)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HB2	12	1.23
(1,1895)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HB3	12	1.23
(1,3973)	1:A:94:ASP:HA	1:A:154:GLU:HB2	6	1.22
(1,3973)	1:A:94:ASP:HA	1:A:154:GLU:HB3	6	1.22
(1,3353)	1:A:253:LYS:H	1:A:255:ALA:HB2	4	1.22
(1,3328)	1:A:249:CYS:HG	1:A:251:TYR:HE1	12	1.22
(1,3054)	1:A:238:VAL:HA	1:A:269:MET:HE1	20	1.22
(1,2998)	1:A:213:THR:H	1:A:214:THR:HB	20	1.22
(1,205)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HB1	1	1.22
(1,1951)	1:A:134:PHE:H	1:A:144:PHE:HD1	17	1.22
(1,3116)	1:A:240:ALA:HB1	1:A:264:VAL:HG22	13	1.21
(1,3085)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:263:ILE:HD12	7	1.21
(1,3069)	1:A:239:PHE:H	1:A:239:PHE:HD2	20	1.21
(1,2576)	1:A:161:TRP:HB2	1:A:163:ALA:HB2	6	1.21
(1,70)	1:A:10:ASP:H	1:A:14:TRP:HD1	10	1.2
(1,206)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HB2	17	1.2
(1,1981)	1:A:134:PHE:HD1	1:A:177:TYR:HE2	17	1.2
(1,3638)	1:A:266:VAL:HG21	1:A:269:MET:HE2	14	1.18
(1,2456)	1:A:156:PRO:HG2	1:A:172:MET:HE3	16	1.18
(1,1895)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HB2	5	1.18
(1,1895)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HB3	5	1.18
(1,129)	1:A:14:TRP:HA	1:A:16:MET:HE3	10	1.18
(1,1208)	1:A:78:PHE:HE1	1:A:87:PHE:H	8	1.18
(1,3054)	1:A:238:VAL:HA	1:A:269:MET:HE1	16	1.17
(1,1895)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HB2	16	1.17
(1,1895)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HB3	16	1.17
(1,148)	1:A:15:TYR:H	1:A:16:MET:HE3	9	1.17
(1,397)	1:A:27:ARG:HH11	1:A:37:LEU:HD23	18	1.16
(1,3356)	1:A:253:LYS:HA	1:A:255:ALA:HB2	5	1.16
(1,2576)	1:A:161:TRP:HB2	1:A:163:ALA:HB2	18	1.16
(1,206)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HB2	16	1.16
(1,1990)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:160:TRP:HZ3	4	1.16
(1,1981)	1:A:134:PHE:HD1	1:A:177:TYR:HE2	4	1.16
(1,1951)	1:A:134:PHE:H	1:A:144:PHE:HD1	6	1.16
(1,1861)	1:A:131:LEU:HB2	1:A:132:TYR:HD1	12	1.16
(1,1813)	1:A:130:THR:HA	1:A:144:PHE:HD1	17	1.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1232)	1:A:78:PHE:HD2	1:A:88:TYR:HE1	8	1.16
(1,1232)	1:A:78:PHE:HD2	1:A:88:TYR:HE2	8	1.16
(1,3205)	1:A:242:ALA:HB1	1:A:258:LEU:HD23	10	1.15
(1,3203)	1:A:242:ALA:HB1	1:A:258:LEU:HD13	9	1.15
(1,3088)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:265:LYS:HA	20	1.15
(1,2427)	1:A:155:LYS:HA	1:A:172:MET:HE3	12	1.15
(1,2224)	1:A:144:PHE:HD2	1:A:174:PRO:HD2	6	1.15
(1,2195)	1:A:144:PHE:HE1	1:A:177:TYR:HE2	5	1.15
(1,2193)	1:A:144:PHE:HE1	1:A:177:TYR:HA	6	1.15
(1,3972)	1:A:76:GLN:HG2	1:A:169:ARG:HA	6	1.14
(1,3972)	1:A:76:GLN:HG3	1:A:169:ARG:HA	6	1.14
(1,3166)	1:A:241:LYS:HA	1:A:263:ILE:HD13	19	1.14
(1,2456)	1:A:156:PRO:HG2	1:A:172:MET:HE3	8	1.14
(1,1898)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:177:TYR:HH	5	1.14
(1,2456)	1:A:156:PRO:HG2	1:A:172:MET:HE3	6	1.13
(1,2447)	1:A:156:PRO:HB2	1:A:172:MET:HE3	8	1.13
(1,2195)	1:A:144:PHE:HE1	1:A:177:TYR:HE2	17	1.13
(1,204)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HA	4	1.13
(1,1951)	1:A:134:PHE:H	1:A:144:PHE:HD1	5	1.13
(1,1951)	1:A:134:PHE:H	1:A:144:PHE:HD1	16	1.13
(1,129)	1:A:14:TRP:HA	1:A:16:MET:HE3	9	1.13
(1,71)	1:A:10:ASP:H	1:A:14:TRP:HE1	10	1.12
(1,3327)	1:A:249:CYS:HG	1:A:251:TYR:HD1	18	1.12
(1,3090)	1:A:239:PHE:HE1	1:A:265:LYS:HA	8	1.12
(1,3088)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:265:LYS:HA	7	1.12
(1,2456)	1:A:156:PRO:HG2	1:A:172:MET:HE3	7	1.12
(1,205)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HB1	3	1.12
(1,205)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HB1	14	1.12
(1,1892)	1:A:132:TYR:HD1	1:A:177:TYR:HA	11	1.12
(1,3353)	1:A:253:LYS:H	1:A:255:ALA:HB2	3	1.11
(1,3327)	1:A:249:CYS:HG	1:A:251:TYR:HD1	2	1.11
(1,3180)	1:A:242:ALA:H	1:A:263:ILE:HD13	18	1.11
(1,2998)	1:A:213:THR:H	1:A:214:THR:HB	5	1.11
(1,204)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HA	7	1.11
(1,1952)	1:A:134:PHE:H	1:A:144:PHE:HE1	17	1.11
(1,1900)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:133:ASP:H	15	1.1
(1,1813)	1:A:130:THR:HA	1:A:144:PHE:HD1	5	1.1
(1,3440)	1:A:257:ALA:HB1	1:A:282:ARG:HH22	15	1.09
(1,3353)	1:A:253:LYS:H	1:A:255:ALA:HB2	20	1.09
(1,3090)	1:A:239:PHE:HE1	1:A:265:LYS:HA	7	1.09
(1,3048)	1:A:238:VAL:H	1:A:269:MET:HE1	4	1.09
(1,1900)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:133:ASP:H	11	1.09

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3116)	1:A:240:ALA:HB1	1:A:264:VAL:HG22	17	1.08
(1,3060)	1:A:238:VAL:HB	1:A:269:MET:HE1	15	1.08
(1,3060)	1:A:238:VAL:HB	1:A:269:MET:HE1	20	1.08
(1,397)	1:A:27:ARG:HH11	1:A:37:LEU:HD23	11	1.07
(1,3247)	1:A:243:ILE:HD13	1:A:290:HIS:HA	8	1.07
(1,3085)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:263:ILE:HD12	20	1.07
(1,204)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HA	15	1.07
(1,1900)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:133:ASP:H	12	1.07
(1,148)	1:A:15:TYR:H	1:A:16:MET:HE3	10	1.07
(1,3201)	1:A:242:ALA:HB1	1:A:258:LEU:HD11	12	1.06
(1,3060)	1:A:238:VAL:HB	1:A:269:MET:HE1	18	1.06
(1,1900)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:133:ASP:H	8	1.06
(1,3973)	1:A:94:ASP:HA	1:A:154:GLU:HB2	18	1.05
(1,3973)	1:A:94:ASP:HA	1:A:154:GLU:HB3	18	1.05
(1,3136)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:294:PHE:H	13	1.05
(1,3082)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:240:ALA:H	14	1.05
(1,3060)	1:A:238:VAL:HB	1:A:269:MET:HE1	4	1.05
(1,1900)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:133:ASP:H	7	1.05
(1,1900)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:133:ASP:H	19	1.05
(1,1760)	1:A:129:ARG:HA	1:A:149:ILE:HD12	20	1.05
(1,3973)	1:A:94:ASP:HA	1:A:154:GLU:HB2	1	1.04
(1,3973)	1:A:94:ASP:HA	1:A:154:GLU:HB3	1	1.04
(1,3497)	1:A:258:LEU:HD23	1:A:264:VAL:HG22	18	1.04
(1,3136)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:294:PHE:H	2	1.04
(1,2224)	1:A:144:PHE:HD2	1:A:174:PRO:HD2	17	1.04
(1,205)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HB1	7	1.04
(1,1900)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:133:ASP:H	13	1.04
(1,1900)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:133:ASP:H	18	1.04
(1,1192)	1:A:78:PHE:H	1:A:78:PHE:HD2	8	1.04
(1,1014)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HD11	8	1.04
(1,1014)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HD12	8	1.04
(1,1014)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HD13	8	1.04
(1,3356)	1:A:253:LYS:HA	1:A:255:ALA:HB2	7	1.03
(1,3060)	1:A:238:VAL:HB	1:A:269:MET:HE1	16	1.03
(1,2456)	1:A:156:PRO:HG2	1:A:172:MET:HE3	4	1.03
(1,2456)	1:A:156:PRO:HG2	1:A:172:MET:HE3	14	1.03
(1,2427)	1:A:155:LYS:HA	1:A:172:MET:HE3	7	1.03
(1,1900)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:133:ASP:H	5	1.03
(1,1900)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:133:ASP:H	9	1.03
(1,3134)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:293:ILE:HA	9	1.02
(1,3134)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:293:ILE:HA	18	1.02
(1,2576)	1:A:161:TRP:HB2	1:A:163:ALA:HB2	11	1.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2456)	1:A:156:PRO:HG2	1:A:172:MET:HE3	15	1.02
(1,2184)	1:A:144:PHE:HD1	1:A:145:LYS:H	17	1.02
(1,2000)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:160:TRP:HZ3	18	1.02
(1,1905)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:134:PHE:HD1	2	1.02
(1,3353)	1:A:253:LYS:H	1:A:255:ALA:HB2	8	1.01
(1,2998)	1:A:213:THR:H	1:A:214:THR:HB	4	1.01
(1,2576)	1:A:161:TRP:HB2	1:A:163:ALA:HB2	5	1.01
(1,2456)	1:A:156:PRO:HG2	1:A:172:MET:HE3	20	1.01
(1,2000)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:160:TRP:HZ3	2	1.01
(1,1900)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:133:ASP:H	20	1.01
(1,1014)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HD11	7	1.01
(1,1014)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HD12	7	1.01
(1,1014)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HD13	7	1.01
(1,3440)	1:A:257:ALA:HB1	1:A:282:ARG:HH22	11	1.0
(1,3328)	1:A:249:CYS:HG	1:A:251:TYR:HE1	2	1.0
(1,3090)	1:A:239:PHE:HE1	1:A:265:LYS:HA	10	1.0
(1,1952)	1:A:134:PHE:H	1:A:144:PHE:HE1	5	1.0
(1,1900)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:133:ASP:H	4	1.0
(1,1900)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:133:ASP:H	14	1.0
(1,1900)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:133:ASP:H	17	1.0
(1,1898)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:177:TYR:HH	4	1.0
(1,1684)	1:A:127:TYR:HD1	1:A:151:VAL:HA	10	1.0
(1,1192)	1:A:78:PHE:H	1:A:78:PHE:HD2	7	1.0
(1,3971)	1:A:75:ASP:HB2	1:A:168:GLY:HA2	5	0.99
(1,3971)	1:A:75:ASP:HB2	1:A:168:GLY:HA3	5	0.99
(1,3327)	1:A:249:CYS:HG	1:A:251:TYR:HD1	3	0.99
(1,3247)	1:A:243:ILE:HD13	1:A:290:HIS:HA	5	0.99
(1,3216)	1:A:242:ALA:HB2	1:A:258:LEU:HD23	6	0.99
(1,3054)	1:A:238:VAL:HA	1:A:269:MET:HE1	4	0.99
(1,3054)	1:A:238:VAL:HA	1:A:269:MET:HE1	14	0.99
(1,2576)	1:A:161:TRP:HB2	1:A:163:ALA:HB2	15	0.99
(1,1900)	1:A:132:TYR:HD2	1:A:133:ASP:H	16	0.99
(1,3497)	1:A:258:LEU:HD23	1:A:264:VAL:HG22	7	0.98
(1,3353)	1:A:253:LYS:H	1:A:255:ALA:HB2	15	0.98
(1,3180)	1:A:242:ALA:H	1:A:263:ILE:HD13	16	0.98
(1,3134)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:293:ILE:HA	12	0.98
(1,3048)	1:A:238:VAL:H	1:A:269:MET:HE1	16	0.98
(1,2576)	1:A:161:TRP:HB2	1:A:163:ALA:HB2	14	0.98
(1,1232)	1:A:78:PHE:HD2	1:A:88:TYR:HE1	7	0.98
(1,1232)	1:A:78:PHE:HD2	1:A:88:TYR:HE2	7	0.98
(1,1169)	1:A:73:ILE:HG22	1:A:78:PHE:HD2	8	0.98
(1,3884)	1:A:288:PHE:HA	1:A:291:VAL:HG21	1	0.97

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3308)	1:A:247:VAL:HA	1:A:257:ALA:HB2	11	0.97
(1,3134)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:293:ILE:HA	2	0.97
(1,2000)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:160:TRP:HZ3	1	0.97
(1,1998)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:144:PHE:HE2	5	0.97
(1,1826)	1:A:130:THR:HB	1:A:144:PHE:HE1	6	0.97
(1,3440)	1:A:257:ALA:HB1	1:A:282:ARG:HH22	17	0.96
(1,3328)	1:A:249:CYS:HG	1:A:251:TYR:HE1	18	0.96
(1,3203)	1:A:242:ALA:HB1	1:A:258:LEU:HD13	12	0.96
(1,3116)	1:A:240:ALA:HB1	1:A:264:VAL:HG22	1	0.96
(1,2576)	1:A:161:TRP:HB2	1:A:163:ALA:HB2	4	0.96
(1,2456)	1:A:156:PRO:HG2	1:A:172:MET:HE3	19	0.96
(1,205)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HB1	12	0.96
(1,1263)	1:A:80:HIS:HD2	1:A:83:ALA:HB2	11	0.96
(1,3353)	1:A:253:LYS:H	1:A:255:ALA:HB2	18	0.95
(1,3308)	1:A:247:VAL:HA	1:A:257:ALA:HB2	13	0.95
(1,3180)	1:A:242:ALA:H	1:A:263:ILE:HD13	14	0.95
(1,2456)	1:A:156:PRO:HG2	1:A:172:MET:HE3	1	0.95
(1,2456)	1:A:156:PRO:HG2	1:A:172:MET:HE3	13	0.95
(1,1861)	1:A:131:LEU:HB2	1:A:132:TYR:HD1	9	0.95
(1,605)	1:A:37:LEU:HA	1:A:102:ALA:HB2	2	0.94
(1,3353)	1:A:253:LYS:H	1:A:255:ALA:HB2	19	0.94
(1,3166)	1:A:241:LYS:HA	1:A:263:ILE:HD13	14	0.94
(1,3060)	1:A:238:VAL:HB	1:A:269:MET:HE1	14	0.94
(1,2576)	1:A:161:TRP:HB2	1:A:163:ALA:HB2	20	0.94
(1,2184)	1:A:144:PHE:HD1	1:A:145:LYS:H	5	0.94
(1,204)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HA	12	0.94
(1,1998)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:144:PHE:HE2	6	0.94
(1,1952)	1:A:134:PHE:H	1:A:144:PHE:HE1	16	0.94
(1,3972)	1:A:76:GLN:HG2	1:A:169:ARG:HA	5	0.93
(1,3972)	1:A:76:GLN:HG3	1:A:169:ARG:HA	5	0.93
(1,3497)	1:A:258:LEU:HD23	1:A:264:VAL:HG22	15	0.93
(1,3440)	1:A:257:ALA:HB1	1:A:282:ARG:HH22	13	0.93
(1,3356)	1:A:253:LYS:HA	1:A:255:ALA:HB2	14	0.93
(1,3200)	1:A:242:ALA:HB1	1:A:258:LEU:HG	10	0.93
(1,3180)	1:A:242:ALA:H	1:A:263:ILE:HD13	4	0.93
(1,3180)	1:A:242:ALA:H	1:A:263:ILE:HD13	7	0.93
(1,2456)	1:A:156:PRO:HG2	1:A:172:MET:HE3	2	0.93
(1,2456)	1:A:156:PRO:HG2	1:A:172:MET:HE3	3	0.93
(1,2456)	1:A:156:PRO:HG2	1:A:172:MET:HE3	5	0.93
(1,2456)	1:A:156:PRO:HG2	1:A:172:MET:HE3	18	0.93
(1,2447)	1:A:156:PRO:HB2	1:A:172:MET:HE3	2	0.93
(1,2427)	1:A:155:LYS:HA	1:A:172:MET:HE3	15	0.93

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,206)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HB2	19	0.93
(1,1999)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:144:PHE:HD2	5	0.93
(1,1263)	1:A:80:HIS:HD2	1:A:83:ALA:HB2	8	0.93
(1,3216)	1:A:242:ALA:HB2	1:A:258:LEU:HD23	16	0.92
(1,3216)	1:A:242:ALA:HB2	1:A:258:LEU:HD23	18	0.92
(1,3202)	1:A:242:ALA:HB1	1:A:258:LEU:HD12	9	0.92
(1,3134)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:293:ILE:HA	11	0.92
(1,3048)	1:A:238:VAL:H	1:A:269:MET:HE1	6	0.92
(1,205)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HB1	4	0.92
(1,1952)	1:A:134:PHE:H	1:A:144:PHE:HE1	6	0.92
(1,1230)	1:A:78:PHE:HD2	1:A:84:LEU:HG	8	0.92
(1,3216)	1:A:242:ALA:HB2	1:A:258:LEU:HD23	15	0.91
(1,3180)	1:A:242:ALA:H	1:A:263:ILE:HD13	8	0.91
(1,3136)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:294:PHE:H	9	0.91
(1,3048)	1:A:238:VAL:H	1:A:269:MET:HE1	18	0.91
(1,2576)	1:A:161:TRP:HB2	1:A:163:ALA:HB2	7	0.91
(1,1428)	1:A:90:ILE:HA	1:A:92:TYR:HE1	15	0.91
(1,3486)	1:A:258:LEU:HD21	1:A:264:VAL:HG13	17	0.9
(1,3116)	1:A:240:ALA:HB1	1:A:264:VAL:HG22	19	0.9
(1,2427)	1:A:155:LYS:HA	1:A:172:MET:HE3	3	0.9
(1,2189)	1:A:144:PHE:HD1	1:A:177:TYR:HD2	6	0.9
(1,205)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HB1	6	0.9
(1,1681)	1:A:127:TYR:HD1	1:A:128:VAL:H	10	0.9
(1,605)	1:A:37:LEU:HA	1:A:102:ALA:HB2	9	0.89
(1,3353)	1:A:253:LYS:H	1:A:255:ALA:HB2	13	0.89
(1,3327)	1:A:249:CYS:HG	1:A:251:TYR:HD1	20	0.89
(1,3180)	1:A:242:ALA:H	1:A:263:ILE:HD13	11	0.89
(1,3166)	1:A:241:LYS:HA	1:A:263:ILE:HD13	11	0.89
(1,3166)	1:A:241:LYS:HA	1:A:263:ILE:HD13	18	0.89
(1,205)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HB1	15	0.89
(1,1999)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:144:PHE:HD2	6	0.89
(1,1760)	1:A:129:ARG:HA	1:A:149:ILE:HD12	4	0.89
(1,155)	1:A:15:TYR:HA	1:A:16:MET:HE3	17	0.89
(1,3440)	1:A:257:ALA:HB1	1:A:282:ARG:HH22	7	0.88
(1,3356)	1:A:253:LYS:HA	1:A:255:ALA:HB2	2	0.88
(1,3356)	1:A:253:LYS:HA	1:A:255:ALA:HB2	6	0.88
(1,3088)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:265:LYS:HA	10	0.88
(1,2576)	1:A:161:TRP:HB2	1:A:163:ALA:HB2	19	0.88
(1,204)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HA	10	0.88
(1,1760)	1:A:129:ARG:HA	1:A:149:ILE:HD12	1	0.88
(1,1470)	1:A:92:TYR:HD2	1:A:95:THR:HA	20	0.88
(1,42)	1:A:7:ASP:H	1:A:13:ALA:HB1	1	0.87

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,397)	1:A:27:ARG:HH11	1:A:37:LEU:HD23	16	0.87
(1,3180)	1:A:242:ALA:H	1:A:263:ILE:HD13	5	0.87
(1,3166)	1:A:241:LYS:HA	1:A:263:ILE:HD13	16	0.87
(1,3134)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:293:ILE:HA	13	0.87
(1,3133)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:293:ILE:H	12	0.87
(1,3116)	1:A:240:ALA:HB1	1:A:264:VAL:HG22	20	0.87
(1,2576)	1:A:161:TRP:HB2	1:A:163:ALA:HB2	16	0.87
(1,2427)	1:A:155:LYS:HA	1:A:172:MET:HE3	19	0.87
(1,1892)	1:A:132:TYR:HD1	1:A:177:TYR:HA	19	0.87
(1,1760)	1:A:129:ARG:HA	1:A:149:ILE:HD12	19	0.87
(1,155)	1:A:15:TYR:HA	1:A:16:MET:HE3	12	0.87
(1,1231)	1:A:78:PHE:HD2	1:A:84:LEU:HD11	8	0.87
(1,1231)	1:A:78:PHE:HD2	1:A:84:LEU:HD12	8	0.87
(1,1231)	1:A:78:PHE:HD2	1:A:84:LEU:HD13	8	0.87
(1,1231)	1:A:78:PHE:HD2	1:A:84:LEU:HD21	8	0.87
(1,1231)	1:A:78:PHE:HD2	1:A:84:LEU:HD22	8	0.87
(1,1231)	1:A:78:PHE:HD2	1:A:84:LEU:HD23	8	0.87
(1,3216)	1:A:242:ALA:HB2	1:A:258:LEU:HD23	1	0.86
(1,3134)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:293:ILE:HA	10	0.86
(1,3048)	1:A:238:VAL:H	1:A:269:MET:HE1	14	0.86
(1,1998)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:144:PHE:HE2	16	0.86
(1,1813)	1:A:130:THR:HA	1:A:144:PHE:HD1	6	0.86
(1,1681)	1:A:127:TYR:HD1	1:A:128:VAL:H	9	0.86
(1,148)	1:A:15:TYR:H	1:A:16:MET:HE3	17	0.86
(1,709)	1:A:43:THR:HG1	1:A:62:ILE:HD11	15	0.85
(1,3090)	1:A:239:PHE:HE1	1:A:265:LYS:HA	16	0.85
(1,3060)	1:A:238:VAL:HB	1:A:269:MET:HE1	6	0.85
(1,3048)	1:A:238:VAL:H	1:A:269:MET:HE1	2	0.85
(1,2427)	1:A:155:LYS:HA	1:A:172:MET:HE3	9	0.85
(1,2427)	1:A:155:LYS:HA	1:A:172:MET:HE3	10	0.85
(1,2427)	1:A:155:LYS:HA	1:A:172:MET:HE3	13	0.85
(1,2001)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:160:TRP:HH2	17	0.85
(1,1999)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:144:PHE:HD2	16	0.85
(1,1990)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:160:TRP:HZ3	2	0.85
(1,1260)	1:A:80:HIS:HD1	1:A:83:ALA:HB2	9	0.85
(1,3054)	1:A:238:VAL:HA	1:A:269:MET:HE1	19	0.84
(1,1998)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:144:PHE:HE2	17	0.84
(1,1990)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:160:TRP:HZ3	1	0.84
(1,1687)	1:A:127:TYR:HE1	1:A:151:VAL:HA	10	0.84
(1,3202)	1:A:242:ALA:HB1	1:A:258:LEU:HD12	12	0.83
(1,3148)	1:A:241:LYS:H	1:A:263:ILE:HD13	14	0.83
(1,3088)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:265:LYS:HA	16	0.83

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2998)	1:A:213:THR:H	1:A:214:THR:HB	19	0.83
(1,1895)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HB2	17	0.83
(1,1895)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HB3	17	0.83
(1,1689)	1:A:127:TYR:HE1	1:A:164:ARG:HE	9	0.83
(1,3327)	1:A:249:CYS:HG	1:A:251:TYR:HD1	17	0.82
(1,3180)	1:A:242:ALA:H	1:A:263:ILE:HD13	15	0.82
(1,3166)	1:A:241:LYS:HA	1:A:263:ILE:HD13	7	0.82
(1,3136)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:294:PHE:H	3	0.82
(1,3134)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:293:ILE:HA	15	0.82
(1,3134)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:293:ILE:HA	20	0.82
(1,2576)	1:A:161:TRP:HB2	1:A:163:ALA:HB2	17	0.82
(1,2427)	1:A:155:LYS:HA	1:A:172:MET:HE3	4	0.82
(1,2427)	1:A:155:LYS:HA	1:A:172:MET:HE3	6	0.82
(1,2229)	1:A:145:LYS:H	1:A:146:LYS:HD2	9	0.82
(1,2189)	1:A:144:PHE:HD1	1:A:177:TYR:HD2	16	0.82
(1,1230)	1:A:78:PHE:HD2	1:A:84:LEU:HG	7	0.82
(1,3970)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:153:ILE:HD11	16	0.81
(1,3970)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:153:ILE:HD12	16	0.81
(1,3970)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:153:ILE:HD13	16	0.81
(1,3328)	1:A:249:CYS:HG	1:A:251:TYR:HE1	3	0.81
(1,324)	1:A:23:GLU:HA	1:A:26:THR:HG23	14	0.81
(1,3180)	1:A:242:ALA:H	1:A:263:ILE:HD13	17	0.81
(1,2545)	1:A:160:TRP:HB2	1:A:172:MET:HE1	9	0.81
(1,2545)	1:A:160:TRP:HB2	1:A:172:MET:HE1	12	0.81
(1,2427)	1:A:155:LYS:HA	1:A:172:MET:HE3	18	0.81
(1,2189)	1:A:144:PHE:HD1	1:A:177:TYR:HD2	5	0.81
(1,1895)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HB2	4	0.81
(1,1895)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:134:PHE:HB3	4	0.81
(1,148)	1:A:15:TYR:H	1:A:16:MET:HE3	20	0.81
(1,3134)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:293:ILE:HA	7	0.8
(1,2595)	1:A:162:SER:H	1:A:172:MET:HE3	19	0.8
(1,2595)	1:A:162:SER:H	1:A:172:MET:HE3	20	0.8
(1,2576)	1:A:161:TRP:HB2	1:A:163:ALA:HB2	2	0.8
(1,2576)	1:A:161:TRP:HB2	1:A:163:ALA:HB2	3	0.8
(1,1991)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:160:TRP:HH2	17	0.8
(1,1201)	1:A:78:PHE:HA	1:A:83:ALA:HB1	12	0.8
(1,616)	1:A:37:LEU:HG	1:A:102:ALA:HB2	2	0.79
(1,3166)	1:A:241:LYS:HA	1:A:263:ILE:HD13	9	0.79
(1,2618)	1:A:162:SER:HB2	1:A:172:MET:HE3	7	0.79
(1,2576)	1:A:161:TRP:HB2	1:A:163:ALA:HB2	13	0.79
(1,1760)	1:A:129:ARG:HA	1:A:149:ILE:HD12	6	0.79
(1,3353)	1:A:253:LYS:H	1:A:255:ALA:HB2	6	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3205)	1:A:242:ALA:HB1	1:A:258:LEU:HD23	17	0.78
(1,3180)	1:A:242:ALA:H	1:A:263:ILE:HD13	6	0.78
(1,3134)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:293:ILE:HA	6	0.78
(1,2224)	1:A:144:PHE:HD2	1:A:174:PRO:HD2	5	0.78
(1,2189)	1:A:144:PHE:HD1	1:A:177:TYR:HD2	17	0.78
(1,2184)	1:A:144:PHE:HD1	1:A:145:LYS:H	6	0.78
(1,1368)	1:A:87:PHE:HD1	1:A:90:ILE:HD13	17	0.78
(1,605)	1:A:37:LEU:HA	1:A:102:ALA:HB2	10	0.77
(1,605)	1:A:37:LEU:HA	1:A:102:ALA:HB2	17	0.77
(1,3497)	1:A:258:LEU:HD23	1:A:264:VAL:HG22	5	0.77
(1,3488)	1:A:258:LEU:HD21	1:A:279:VAL:HB	10	0.77
(1,3134)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:293:ILE:HA	4	0.77
(1,3134)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:293:ILE:HA	16	0.77
(1,3133)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:293:ILE:H	9	0.77
(1,3116)	1:A:240:ALA:HB1	1:A:264:VAL:HG22	6	0.77
(1,3048)	1:A:238:VAL:H	1:A:269:MET:HE1	17	0.77
(1,2546)	1:A:160:TRP:HB2	1:A:172:MET:HE2	8	0.77
(1,2427)	1:A:155:LYS:HA	1:A:172:MET:HE3	16	0.77
(1,148)	1:A:15:TYR:H	1:A:16:MET:HE3	5	0.77
(1,3497)	1:A:258:LEU:HD23	1:A:264:VAL:HG22	14	0.76
(1,3219)	1:A:242:ALA:HB2	1:A:261:GLY:H	1	0.76
(1,3166)	1:A:241:LYS:HA	1:A:263:ILE:HD13	8	0.76
(1,2714)	1:A:169:ARG:H	1:A:169:ARG:HB2	10	0.76
(1,2595)	1:A:162:SER:H	1:A:172:MET:HE3	13	0.76
(1,2595)	1:A:162:SER:H	1:A:172:MET:HE3	15	0.76
(1,2456)	1:A:156:PRO:HG2	1:A:172:MET:HE3	10	0.76
(1,205)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HB1	10	0.76
(1,1892)	1:A:132:TYR:HD1	1:A:177:TYR:HA	17	0.76
(1,1684)	1:A:127:TYR:HD1	1:A:151:VAL:HA	9	0.76
(1,155)	1:A:15:TYR:HA	1:A:16:MET:HE3	20	0.76
(1,148)	1:A:15:TYR:H	1:A:16:MET:HE3	8	0.76
(1,148)	1:A:15:TYR:H	1:A:16:MET:HE3	13	0.76
(1,1260)	1:A:80:HIS:HD1	1:A:83:ALA:HB2	12	0.76
(1,1036)	1:A:65:SER:HA	1:A:66:LEU:HD23	7	0.76
(1,3329)	1:A:249:CYS:HG	1:A:251:TYR:HH	9	0.75
(1,3327)	1:A:249:CYS:HG	1:A:251:TYR:HD1	5	0.75
(1,3180)	1:A:242:ALA:H	1:A:263:ILE:HD13	20	0.75
(1,3166)	1:A:241:LYS:HA	1:A:263:ILE:HD13	4	0.75
(1,249)	1:A:20:SER:H	1:A:23:GLU:H	12	0.75
(1,2160)	1:A:143:PRO:HG2	1:A:165:ASN:HB2	12	0.75
(1,1760)	1:A:129:ARG:HA	1:A:149:ILE:HD12	14	0.75
(1,1760)	1:A:129:ARG:HA	1:A:149:ILE:HD12	17	0.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,605)	1:A:37:LEU:HA	1:A:102:ALA:HB2	5	0.74
(1,3973)	1:A:94:ASP:HA	1:A:154:GLU:HB2	2	0.74
(1,3973)	1:A:94:ASP:HA	1:A:154:GLU:HB3	2	0.74
(1,3552)	1:A:263:ILE:HD11	1:A:294:PHE:HE2	12	0.74
(1,3216)	1:A:242:ALA:HB2	1:A:258:LEU:HD23	20	0.74
(1,3148)	1:A:241:LYS:H	1:A:263:ILE:HD13	9	0.74
(1,3136)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:294:PHE:H	4	0.74
(1,3134)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:293:ILE:HA	14	0.74
(1,3088)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:265:LYS:HA	5	0.74
(1,3048)	1:A:238:VAL:H	1:A:269:MET:HE1	1	0.74
(1,1212)	1:A:78:PHE:HE1	1:A:87:PHE:HZ	8	0.74
(1,3356)	1:A:253:LYS:HA	1:A:255:ALA:HB2	3	0.73
(1,324)	1:A:23:GLU:HA	1:A:26:THR:HG23	7	0.73
(1,3216)	1:A:242:ALA:HB2	1:A:258:LEU:HD23	3	0.73
(1,3216)	1:A:242:ALA:HB2	1:A:258:LEU:HD23	14	0.73
(1,3136)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:294:PHE:H	18	0.73
(1,3116)	1:A:240:ALA:HB1	1:A:264:VAL:HG22	11	0.73
(1,2618)	1:A:162:SER:HB2	1:A:172:MET:HE3	19	0.73
(1,2595)	1:A:162:SER:H	1:A:172:MET:HE3	3	0.73
(1,2595)	1:A:162:SER:H	1:A:172:MET:HE3	18	0.73
(1,605)	1:A:37:LEU:HA	1:A:102:ALA:HB2	11	0.72
(1,3638)	1:A:266:VAL:HG21	1:A:269:MET:HE2	20	0.72
(1,3488)	1:A:258:LEU:HD21	1:A:279:VAL:HB	17	0.72
(1,3216)	1:A:242:ALA:HB2	1:A:258:LEU:HD23	4	0.72
(1,3133)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:293:ILE:H	11	0.72
(1,3048)	1:A:238:VAL:H	1:A:269:MET:HE1	15	0.72
(1,2618)	1:A:162:SER:HB2	1:A:172:MET:HE3	12	0.72
(1,2184)	1:A:144:PHE:HD1	1:A:145:LYS:H	16	0.72
(1,155)	1:A:15:TYR:HA	1:A:16:MET:HE3	9	0.72
(1,605)	1:A:37:LEU:HA	1:A:102:ALA:HB2	13	0.71
(1,3971)	1:A:75:ASP:HB2	1:A:168:GLY:HA2	8	0.71
(1,3971)	1:A:75:ASP:HB2	1:A:168:GLY:HA3	8	0.71
(1,3134)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:293:ILE:HA	1	0.71
(1,2998)	1:A:213:THR:H	1:A:214:THR:HB	7	0.71
(1,2546)	1:A:160:TRP:HB2	1:A:172:MET:HE2	2	0.71
(1,1892)	1:A:132:TYR:HD1	1:A:177:TYR:HA	13	0.71
(1,1760)	1:A:129:ARG:HA	1:A:149:ILE:HD12	11	0.71
(1,1585)	1:A:101:PRO:HA	1:A:102:ALA:HB2	11	0.71
(1,1511)	1:A:95:THR:HG22	1:A:96:THR:HB	8	0.71
(1,1212)	1:A:78:PHE:HE1	1:A:87:PHE:HZ	7	0.71
(1,616)	1:A:37:LEU:HG	1:A:102:ALA:HB2	11	0.7
(1,3136)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:294:PHE:H	15	0.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3133)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:293:ILE:H	1	0.7
(1,3133)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:293:ILE:H	6	0.7
(1,2595)	1:A:162:SER:H	1:A:172:MET:HE3	14	0.7
(1,3488)	1:A:258:LEU:HD21	1:A:279:VAL:HB	16	0.69
(1,3353)	1:A:253:LYS:H	1:A:255:ALA:HB2	11	0.69
(1,3328)	1:A:249:CYS:HG	1:A:251:TYR:HE1	20	0.69
(1,3180)	1:A:242:ALA:H	1:A:263:ILE:HD13	3	0.69
(1,3180)	1:A:242:ALA:H	1:A:263:ILE:HD13	9	0.69
(1,3090)	1:A:239:PHE:HE1	1:A:265:LYS:HA	5	0.69
(1,2998)	1:A:213:THR:H	1:A:214:THR:HB	12	0.69
(1,2595)	1:A:162:SER:H	1:A:172:MET:HE3	16	0.69
(1,2521)	1:A:160:TRP:H	1:A:172:MET:HE1	9	0.69
(1,2456)	1:A:156:PRO:HG2	1:A:172:MET:HE3	12	0.69
(1,2427)	1:A:155:LYS:HA	1:A:172:MET:HE3	1	0.69
(1,2427)	1:A:155:LYS:HA	1:A:172:MET:HE3	5	0.69
(1,2275)	1:A:149:ILE:HA	1:A:149:ILE:HD12	19	0.69
(1,2229)	1:A:145:LYS:H	1:A:146:LYS:HD2	10	0.69
(1,2216)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:174:PRO:HG2	6	0.69
(1,1943)	1:A:133:ASP:HB2	1:A:147:GLY:H	1	0.69
(1,1796)	1:A:130:THR:H	1:A:144:PHE:HD1	16	0.69
(1,1234)	1:A:79:ASP:H	1:A:83:ALA:HB1	12	0.69
(1,709)	1:A:43:THR:HG1	1:A:62:ILE:HD11	7	0.68
(1,3497)	1:A:258:LEU:HD23	1:A:264:VAL:HG22	2	0.68
(1,3497)	1:A:258:LEU:HD23	1:A:264:VAL:HG22	3	0.68
(1,3440)	1:A:257:ALA:HB1	1:A:282:ARG:HH22	4	0.68
(1,3247)	1:A:243:ILE:HD13	1:A:290:HIS:HA	12	0.68
(1,3226)	1:A:242:ALA:HB3	1:A:291:VAL:HG13	3	0.68
(1,3136)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:294:PHE:H	12	0.68
(1,2998)	1:A:213:THR:H	1:A:214:THR:HB	8	0.68
(1,2595)	1:A:162:SER:H	1:A:172:MET:HE3	4	0.68
(1,205)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HB1	2	0.68
(1,204)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HA	11	0.68
(1,1990)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:160:TRP:HZ3	18	0.68
(1,155)	1:A:15:TYR:HA	1:A:16:MET:HE3	10	0.68
(1,148)	1:A:15:TYR:H	1:A:16:MET:HE3	2	0.68
(1,806)	1:A:50:LEU:HG	1:A:63:ILE:HD12	8	0.67
(1,605)	1:A:37:LEU:HA	1:A:102:ALA:HB2	12	0.67
(1,605)	1:A:37:LEU:HA	1:A:102:ALA:HB2	20	0.67
(1,3973)	1:A:94:ASP:HA	1:A:154:GLU:HB2	7	0.67
(1,3973)	1:A:94:ASP:HA	1:A:154:GLU:HB3	7	0.67
(1,3226)	1:A:242:ALA:HB3	1:A:291:VAL:HG13	6	0.67
(1,3216)	1:A:242:ALA:HB2	1:A:258:LEU:HD23	5	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3216)	1:A:242:ALA:HB2	1:A:258:LEU:HD23	11	0.67
(1,3166)	1:A:241:LYS:HA	1:A:263:ILE:HD13	5	0.67
(1,3166)	1:A:241:LYS:HA	1:A:263:ILE:HD13	6	0.67
(1,3136)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:294:PHE:H	10	0.67
(1,2595)	1:A:162:SER:H	1:A:172:MET:HE3	5	0.67
(1,1960)	1:A:134:PHE:HA	1:A:134:PHE:HD1	18	0.67
(1,187)	1:A:16:MET:H	1:A:16:MET:HE3	8	0.67
(1,1585)	1:A:101:PRO:HA	1:A:102:ALA:HB2	19	0.67
(1,1424)	1:A:90:ILE:H	1:A:97:THR:HG22	10	0.67
(1,1231)	1:A:78:PHE:HD2	1:A:84:LEU:HD11	7	0.67
(1,1231)	1:A:78:PHE:HD2	1:A:84:LEU:HD12	7	0.67
(1,1231)	1:A:78:PHE:HD2	1:A:84:LEU:HD13	7	0.67
(1,1231)	1:A:78:PHE:HD2	1:A:84:LEU:HD21	7	0.67
(1,1231)	1:A:78:PHE:HD2	1:A:84:LEU:HD22	7	0.67
(1,1231)	1:A:78:PHE:HD2	1:A:84:LEU:HD23	7	0.67
(1,806)	1:A:50:LEU:HG	1:A:63:ILE:HD12	7	0.66
(1,3972)	1:A:76:GLN:HG2	1:A:169:ARG:HA	13	0.66
(1,3972)	1:A:76:GLN:HG3	1:A:169:ARG:HA	13	0.66
(1,3356)	1:A:253:LYS:HA	1:A:255:ALA:HB2	4	0.66
(1,3329)	1:A:249:CYS:HG	1:A:251:TYR:HH	10	0.66
(1,2621)	1:A:162:SER:HG	1:A:172:MET:HE3	7	0.66
(1,2618)	1:A:162:SER:HB2	1:A:172:MET:HE3	10	0.66
(1,2618)	1:A:162:SER:HB2	1:A:172:MET:HE3	14	0.66
(1,204)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HA	9	0.66
(1,148)	1:A:15:TYR:H	1:A:16:MET:HE3	18	0.66
(1,3360)	1:A:254:THR:H	1:A:255:ALA:HB2	12	0.65
(1,3327)	1:A:249:CYS:HG	1:A:251:TYR:HD1	15	0.65
(1,3226)	1:A:242:ALA:HB3	1:A:291:VAL:HG13	18	0.65
(1,3216)	1:A:242:ALA:HB2	1:A:258:LEU:HD23	13	0.65
(1,2618)	1:A:162:SER:HB2	1:A:172:MET:HE3	9	0.65
(1,2576)	1:A:161:TRP:HB2	1:A:163:ALA:HB2	1	0.65
(1,2456)	1:A:156:PRO:HG2	1:A:172:MET:HE3	9	0.65
(1,203)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:H	1	0.65
(1,1960)	1:A:134:PHE:HA	1:A:134:PHE:HD1	2	0.65
(1,155)	1:A:15:TYR:HA	1:A:16:MET:HE3	8	0.65
(1,148)	1:A:15:TYR:H	1:A:16:MET:HE3	19	0.65
(1,1036)	1:A:65:SER:HA	1:A:66:LEU:HD23	1	0.65
(1,1036)	1:A:65:SER:HA	1:A:66:LEU:HD23	13	0.65
(1,71)	1:A:10:ASP:H	1:A:14:TRP:HE1	12	0.64
(1,3973)	1:A:94:ASP:HA	1:A:154:GLU:HB2	12	0.64
(1,3973)	1:A:94:ASP:HA	1:A:154:GLU:HB3	12	0.64
(1,3970)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:153:ILE:HD11	9	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3970)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:153:ILE:HD12	9	0.64
(1,3970)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:153:ILE:HD13	9	0.64
(1,3356)	1:A:253:LYS:HA	1:A:255:ALA:HB2	13	0.64
(1,3356)	1:A:253:LYS:HA	1:A:255:ALA:HB2	20	0.64
(1,3136)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:294:PHE:H	11	0.64
(1,3133)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:293:ILE:H	18	0.64
(1,3060)	1:A:238:VAL:HB	1:A:269:MET:HE1	2	0.64
(1,2995)	1:A:211:GLN:HB2	1:A:212:THR:HA	15	0.64
(1,2427)	1:A:155:LYS:HA	1:A:172:MET:HE3	14	0.64
(1,2427)	1:A:155:LYS:HA	1:A:172:MET:HE3	20	0.64
(1,1796)	1:A:130:THR:H	1:A:144:PHE:HD1	17	0.64
(1,1263)	1:A:80:HIS:HD2	1:A:83:ALA:HB2	12	0.64
(1,3134)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:293:ILE:HA	17	0.63
(1,2618)	1:A:162:SER:HB2	1:A:172:MET:HE3	15	0.63
(1,2576)	1:A:161:TRP:HB2	1:A:163:ALA:HB2	8	0.63
(1,148)	1:A:15:TYR:H	1:A:16:MET:HE3	16	0.63
(1,1470)	1:A:92:TYR:HD2	1:A:95:THR:HA	6	0.63
(1,806)	1:A:50:LEU:HG	1:A:63:ILE:HD12	5	0.62
(1,605)	1:A:37:LEU:HA	1:A:102:ALA:HB2	8	0.62
(1,3973)	1:A:94:ASP:HA	1:A:154:GLU:HB2	19	0.62
(1,3973)	1:A:94:ASP:HA	1:A:154:GLU:HB3	19	0.62
(1,3226)	1:A:242:ALA:HB3	1:A:291:VAL:HG13	11	0.62
(1,3216)	1:A:242:ALA:HB2	1:A:258:LEU:HD23	8	0.62
(1,3133)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:293:ILE:H	10	0.62
(1,2618)	1:A:162:SER:HB2	1:A:172:MET:HE3	13	0.62
(1,2275)	1:A:149:ILE:HA	1:A:149:ILE:HD12	11	0.62
(1,204)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HA	2	0.62
(1,1796)	1:A:130:THR:H	1:A:144:PHE:HD1	5	0.62
(1,1586)	1:A:102:ALA:H	1:A:102:ALA:HB2	13	0.62
(1,1585)	1:A:101:PRO:HA	1:A:102:ALA:HB2	18	0.62
(1,155)	1:A:15:TYR:HA	1:A:16:MET:HE3	2	0.62
(1,1428)	1:A:90:ILE:HA	1:A:92:TYR:HE1	6	0.62
(1,3486)	1:A:258:LEU:HD21	1:A:264:VAL:HG13	15	0.61
(1,3321)	1:A:249:CYS:H	1:A:255:ALA:HB2	18	0.61
(1,3287)	1:A:246:ARG:HE	1:A:290:HIS:HD1	12	0.61
(1,3226)	1:A:242:ALA:HB3	1:A:291:VAL:HG13	14	0.61
(1,3148)	1:A:241:LYS:H	1:A:263:ILE:HD13	11	0.61
(1,3134)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:293:ILE:HA	3	0.61
(1,2595)	1:A:162:SER:H	1:A:172:MET:HE3	1	0.61
(1,2521)	1:A:160:TRP:H	1:A:172:MET:HE1	12	0.61
(1,204)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HA	20	0.61
(1,1586)	1:A:102:ALA:H	1:A:102:ALA:HB2	9	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1586)	1:A:102:ALA:H	1:A:102:ALA:HB2	10	0.61
(1,1586)	1:A:102:ALA:H	1:A:102:ALA:HB2	11	0.61
(1,1586)	1:A:102:ALA:H	1:A:102:ALA:HB2	19	0.61
(1,1585)	1:A:101:PRO:HA	1:A:102:ALA:HB2	15	0.61
(1,155)	1:A:15:TYR:HA	1:A:16:MET:HE3	5	0.61
(1,155)	1:A:15:TYR:HA	1:A:16:MET:HE3	13	0.61
(1,1234)	1:A:79:ASP:H	1:A:83:ALA:HB1	7	0.61
(1,616)	1:A:37:LEU:HG	1:A:102:ALA:HB2	16	0.6
(1,563)	1:A:36:PHE:HA	1:A:102:ALA:HB2	9	0.6
(1,3973)	1:A:94:ASP:HA	1:A:154:GLU:HB2	11	0.6
(1,3973)	1:A:94:ASP:HA	1:A:154:GLU:HB3	11	0.6
(1,3680)	1:A:269:MET:HE3	1:A:286:PHE:HZ	9	0.6
(1,3486)	1:A:258:LEU:HD21	1:A:264:VAL:HG13	1	0.6
(1,3485)	1:A:258:LEU:HD21	1:A:264:VAL:HB	17	0.6
(1,3440)	1:A:257:ALA:HB1	1:A:282:ARG:HH22	8	0.6
(1,3180)	1:A:242:ALA:H	1:A:263:ILE:HD13	1	0.6
(1,2595)	1:A:162:SER:H	1:A:172:MET:HE3	6	0.6
(1,2530)	1:A:160:TRP:HA	1:A:172:MET:HE2	8	0.6
(1,2224)	1:A:144:PHE:HD2	1:A:174:PRO:HD2	16	0.6
(1,203)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:H	14	0.6
(1,1898)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:177:TYR:HH	17	0.6
(1,1892)	1:A:132:TYR:HD1	1:A:177:TYR:HA	14	0.6
(1,1586)	1:A:102:ALA:H	1:A:102:ALA:HB2	1	0.6
(1,1586)	1:A:102:ALA:H	1:A:102:ALA:HB2	2	0.6
(1,1586)	1:A:102:ALA:H	1:A:102:ALA:HB2	3	0.6
(1,1586)	1:A:102:ALA:H	1:A:102:ALA:HB2	4	0.6
(1,1586)	1:A:102:ALA:H	1:A:102:ALA:HB2	7	0.6
(1,1586)	1:A:102:ALA:H	1:A:102:ALA:HB2	14	0.6
(1,1586)	1:A:102:ALA:H	1:A:102:ALA:HB2	15	0.6
(1,1586)	1:A:102:ALA:H	1:A:102:ALA:HB2	16	0.6
(1,1586)	1:A:102:ALA:H	1:A:102:ALA:HB2	20	0.6
(1,1585)	1:A:101:PRO:HA	1:A:102:ALA:HB2	3	0.6
(1,1585)	1:A:101:PRO:HA	1:A:102:ALA:HB2	20	0.6
(1,1036)	1:A:65:SER:HA	1:A:66:LEU:HD23	5	0.6
(1,3327)	1:A:249:CYS:HG	1:A:251:TYR:HD1	1	0.59
(1,3216)	1:A:242:ALA:HB2	1:A:258:LEU:HD23	19	0.59
(1,3180)	1:A:242:ALA:H	1:A:263:ILE:HD13	10	0.59
(1,3180)	1:A:242:ALA:H	1:A:263:ILE:HD13	12	0.59
(1,3134)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:293:ILE:HA	8	0.59
(1,2989)	1:A:204:ALA:H	1:A:204:ALA:HB1	18	0.59
(1,2938)	1:A:185:SER:H	1:A:185:SER:HG	2	0.59
(1,274)	1:A:21:ARG:HA	1:A:39:ARG:HH21	9	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2530)	1:A:160:TRP:HA	1:A:172:MET:HE2	2	0.59
(1,1608)	1:A:120:THR:H	1:A:120:THR:HB	7	0.59
(1,1586)	1:A:102:ALA:H	1:A:102:ALA:HB2	5	0.59
(1,1586)	1:A:102:ALA:H	1:A:102:ALA:HB2	6	0.59
(1,1586)	1:A:102:ALA:H	1:A:102:ALA:HB2	12	0.59
(1,1586)	1:A:102:ALA:H	1:A:102:ALA:HB2	17	0.59
(1,1585)	1:A:101:PRO:HA	1:A:102:ALA:HB2	1	0.59
(1,1585)	1:A:101:PRO:HA	1:A:102:ALA:HB2	16	0.59
(1,1260)	1:A:80:HIS:HD1	1:A:83:ALA:HB2	10	0.59
(1,605)	1:A:37:LEU:HA	1:A:102:ALA:HB2	3	0.58
(1,605)	1:A:37:LEU:HA	1:A:102:ALA:HB2	6	0.58
(1,605)	1:A:37:LEU:HA	1:A:102:ALA:HB2	18	0.58
(1,563)	1:A:36:PHE:HA	1:A:102:ALA:HB2	11	0.58
(1,3973)	1:A:94:ASP:HA	1:A:154:GLU:HB2	20	0.58
(1,3973)	1:A:94:ASP:HA	1:A:154:GLU:HB3	20	0.58
(1,3861)	1:A:286:PHE:HZ	1:A:291:VAL:HG21	1	0.58
(1,3226)	1:A:242:ALA:HB3	1:A:291:VAL:HG13	15	0.58
(1,3216)	1:A:242:ALA:HB2	1:A:258:LEU:HD23	7	0.58
(1,3166)	1:A:241:LYS:HA	1:A:263:ILE:HD13	3	0.58
(1,2618)	1:A:162:SER:HB2	1:A:172:MET:HE3	20	0.58
(1,2595)	1:A:162:SER:H	1:A:172:MET:HE3	7	0.58
(1,1586)	1:A:102:ALA:H	1:A:102:ALA:HB2	8	0.58
(1,1586)	1:A:102:ALA:H	1:A:102:ALA:HB2	18	0.58
(1,1585)	1:A:101:PRO:HA	1:A:102:ALA:HB2	4	0.58
(1,1585)	1:A:101:PRO:HA	1:A:102:ALA:HB2	10	0.58
(1,605)	1:A:37:LEU:HA	1:A:102:ALA:HB2	14	0.57
(1,3136)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:294:PHE:H	20	0.57
(1,3133)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:293:ILE:H	14	0.57
(1,2618)	1:A:162:SER:HB2	1:A:172:MET:HE3	3	0.57
(1,205)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HB1	5	0.57
(1,1960)	1:A:134:PHE:HA	1:A:134:PHE:HD1	11	0.57
(1,1867)	1:A:131:LEU:HD11	1:A:179:GLU:HG2	4	0.57
(1,1867)	1:A:131:LEU:HD12	1:A:179:GLU:HG2	4	0.57
(1,1867)	1:A:131:LEU:HD13	1:A:179:GLU:HG2	4	0.57
(1,1867)	1:A:131:LEU:HD21	1:A:179:GLU:HG2	4	0.57
(1,1867)	1:A:131:LEU:HD22	1:A:179:GLU:HG2	4	0.57
(1,1867)	1:A:131:LEU:HD23	1:A:179:GLU:HG2	4	0.57
(1,1625)	1:A:122:GLU:HB2	1:A:123:ASP:HA	3	0.57
(1,1585)	1:A:101:PRO:HA	1:A:102:ALA:HB2	6	0.57
(1,1585)	1:A:101:PRO:HA	1:A:102:ALA:HB2	13	0.57
(1,1585)	1:A:101:PRO:HA	1:A:102:ALA:HB2	14	0.57
(1,1585)	1:A:101:PRO:HA	1:A:102:ALA:HB2	17	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,148)	1:A:15:TYR:H	1:A:16:MET:HE3	4	0.57
(1,1476)	1:A:92:TYR:HD2	1:A:97:THR:HA	6	0.57
(1,1304)	1:A:83:ALA:HB1	1:A:84:LEU:HA	12	0.57
(1,129)	1:A:14:TRP:HA	1:A:16:MET:HE3	3	0.57
(1,1263)	1:A:80:HIS:HD2	1:A:83:ALA:HB2	16	0.57
(1,114)	1:A:13:ALA:HB1	1:A:14:TRP:HA	10	0.57
(1,3287)	1:A:246:ARG:HE	1:A:290:HIS:HD1	10	0.56
(1,3247)	1:A:243:ILE:HD13	1:A:290:HIS:HA	14	0.56
(1,3166)	1:A:241:LYS:HA	1:A:263:ILE:HD13	15	0.56
(1,3136)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:294:PHE:H	16	0.56
(1,3048)	1:A:238:VAL:H	1:A:269:MET:HE1	20	0.56
(1,2945)	1:A:185:SER:HB2	1:A:186:PRO:HA	13	0.56
(1,2545)	1:A:160:TRP:HB2	1:A:172:MET:HE1	17	0.56
(1,249)	1:A:20:SER:H	1:A:23:GLU:H	10	0.56
(1,1760)	1:A:129:ARG:HA	1:A:149:ILE:HD12	16	0.56
(1,1585)	1:A:101:PRO:HA	1:A:102:ALA:HB2	12	0.56
(1,129)	1:A:14:TRP:HA	1:A:16:MET:HE3	1	0.56
(1,129)	1:A:14:TRP:HA	1:A:16:MET:HE3	4	0.56
(1,129)	1:A:14:TRP:HA	1:A:16:MET:HE3	7	0.56
(1,1263)	1:A:80:HIS:HD2	1:A:83:ALA:HB2	19	0.56
(1,1214)	1:A:78:PHE:HE1	1:A:87:PHE:HD2	7	0.56
(1,1036)	1:A:65:SER:HA	1:A:66:LEU:HD23	3	0.56
(1,605)	1:A:37:LEU:HA	1:A:102:ALA:HB2	7	0.55
(1,3640)	1:A:266:VAL:HG21	1:A:286:PHE:HZ	3	0.55
(1,3552)	1:A:263:ILE:HD11	1:A:294:PHE:HE2	5	0.55
(1,3308)	1:A:247:VAL:HA	1:A:257:ALA:HB2	9	0.55
(1,3136)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:294:PHE:H	17	0.55
(1,3060)	1:A:238:VAL:HB	1:A:269:MET:HE1	19	0.55
(1,2998)	1:A:213:THR:H	1:A:214:THR:HB	16	0.55
(1,2214)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:173:ILE:HD11	6	0.55
(1,2214)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:173:ILE:HD12	6	0.55
(1,2214)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:173:ILE:HD13	6	0.55
(1,201)	1:A:16:MET:HE1	1:A:37:LEU:HD23	3	0.55
(1,1960)	1:A:134:PHE:HA	1:A:134:PHE:HD1	1	0.55
(1,1960)	1:A:134:PHE:HA	1:A:134:PHE:HD1	14	0.55
(1,1611)	1:A:120:THR:HA	1:A:121:ALA:H	19	0.55
(1,1585)	1:A:101:PRO:HA	1:A:102:ALA:HB2	2	0.55
(1,1585)	1:A:101:PRO:HA	1:A:102:ALA:HB2	7	0.55
(1,129)	1:A:14:TRP:HA	1:A:16:MET:HE3	6	0.55
(1,129)	1:A:14:TRP:HA	1:A:16:MET:HE3	13	0.55
(1,129)	1:A:14:TRP:HA	1:A:16:MET:HE3	14	0.55
(1,129)	1:A:14:TRP:HA	1:A:16:MET:HE3	16	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,129)	1:A:14:TRP:HA	1:A:16:MET:HE3	20	0.55
(1,1227)	1:A:78:PHE:HE2	1:A:88:TYR:HD1	8	0.55
(1,1227)	1:A:78:PHE:HE2	1:A:88:TYR:HD2	8	0.55
(1,1203)	1:A:78:PHE:HD1	1:A:83:ALA:HB1	12	0.55
(1,605)	1:A:37:LEU:HA	1:A:102:ALA:HB2	4	0.54
(1,3970)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:153:ILE:HD11	6	0.54
(1,3970)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:153:ILE:HD12	6	0.54
(1,3970)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:153:ILE:HD13	6	0.54
(1,3488)	1:A:258:LEU:HD21	1:A:279:VAL:HB	7	0.54
(1,3353)	1:A:253:LYS:H	1:A:255:ALA:HB2	2	0.54
(1,3226)	1:A:242:ALA:HB3	1:A:291:VAL:HG13	2	0.54
(1,3200)	1:A:242:ALA:HB1	1:A:258:LEU:HG	9	0.54
(1,3166)	1:A:241:LYS:HA	1:A:263:ILE:HD13	20	0.54
(1,3004)	1:A:223:PRO:HA	1:A:224:GLY:H	13	0.54
(1,2945)	1:A:185:SER:HB2	1:A:186:PRO:HA	15	0.54
(1,205)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HB1	9	0.54
(1,2001)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:160:TRP:HH2	4	0.54
(1,187)	1:A:16:MET:H	1:A:16:MET:HE3	19	0.54
(1,1611)	1:A:120:THR:HA	1:A:121:ALA:H	2	0.54
(1,1585)	1:A:101:PRO:HA	1:A:102:ALA:HB2	8	0.54
(1,1585)	1:A:101:PRO:HA	1:A:102:ALA:HB2	9	0.54
(1,129)	1:A:14:TRP:HA	1:A:16:MET:HE3	5	0.54
(1,129)	1:A:14:TRP:HA	1:A:16:MET:HE3	17	0.54
(1,129)	1:A:14:TRP:HA	1:A:16:MET:HE3	19	0.54
(1,1201)	1:A:78:PHE:HA	1:A:83:ALA:HB1	10	0.54
(1,758)	1:A:49:VAL:H	1:A:63:ILE:HD13	4	0.53
(1,42)	1:A:7:ASP:H	1:A:13:ALA:HB1	17	0.53
(1,3205)	1:A:242:ALA:HB1	1:A:258:LEU:HD23	12	0.53
(1,3148)	1:A:241:LYS:H	1:A:263:ILE:HD13	7	0.53
(1,3030)	1:A:233:THR:HG1	1:A:235:ASN:HD22	5	0.53
(1,3004)	1:A:223:PRO:HA	1:A:224:GLY:H	8	0.53
(1,3002)	1:A:221:GLY:HA2	1:A:222:SER:H	3	0.53
(1,2989)	1:A:204:ALA:H	1:A:204:ALA:HB1	14	0.53
(1,2618)	1:A:162:SER:HB2	1:A:172:MET:HE3	5	0.53
(1,204)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HA	5	0.53
(1,203)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:H	15	0.53
(1,2001)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:160:TRP:HH2	14	0.53
(1,1960)	1:A:134:PHE:HA	1:A:134:PHE:HD1	17	0.53
(1,1892)	1:A:132:TYR:HD1	1:A:177:TYR:HA	5	0.53
(1,1687)	1:A:127:TYR:HE1	1:A:151:VAL:HA	9	0.53
(1,1626)	1:A:123:ASP:H	1:A:123:ASP:HB2	1	0.53
(1,1611)	1:A:120:THR:HA	1:A:121:ALA:H	3	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1585)	1:A:101:PRO:HA	1:A:102:ALA:HB2	5	0.53
(1,155)	1:A:15:TYR:HA	1:A:16:MET:HE3	18	0.53
(1,1304)	1:A:83:ALA:HB1	1:A:84:LEU:HA	10	0.53
(1,129)	1:A:14:TRP:HA	1:A:16:MET:HE3	15	0.53
(1,1201)	1:A:78:PHE:HA	1:A:83:ALA:HB1	16	0.53
(1,758)	1:A:49:VAL:H	1:A:63:ILE:HD13	8	0.52
(1,3429)	1:A:257:ALA:H	1:A:258:LEU:HD22	12	0.52
(1,3226)	1:A:242:ALA:HB3	1:A:291:VAL:HG13	5	0.52
(1,3205)	1:A:242:ALA:HB1	1:A:258:LEU:HD23	9	0.52
(1,3030)	1:A:233:THR:HG1	1:A:235:ASN:HD22	4	0.52
(1,2656)	1:A:164:ARG:HA	1:A:165:ASN:HB2	9	0.52
(1,2275)	1:A:149:ILE:HA	1:A:149:ILE:HD12	4	0.52
(1,205)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HB1	16	0.52
(1,2002)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:174:PRO:HD2	2	0.52
(1,187)	1:A:16:MET:H	1:A:16:MET:HE3	13	0.52
(1,1611)	1:A:120:THR:HA	1:A:121:ALA:H	10	0.52
(1,148)	1:A:15:TYR:H	1:A:16:MET:HE3	11	0.52
(1,129)	1:A:14:TRP:HA	1:A:16:MET:HE3	8	0.52
(1,540)	1:A:36:PHE:H	1:A:36:PHE:HD2	14	0.51
(1,3973)	1:A:94:ASP:HA	1:A:154:GLU:HB2	17	0.51
(1,3973)	1:A:94:ASP:HA	1:A:154:GLU:HB3	17	0.51
(1,3552)	1:A:263:ILE:HD11	1:A:294:PHE:HE2	3	0.51
(1,3328)	1:A:249:CYS:HG	1:A:251:TYR:HE1	17	0.51
(1,3248)	1:A:243:ILE:HD13	1:A:291:VAL:HA	8	0.51
(1,3137)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:294:PHE:HD1	17	0.51
(1,3060)	1:A:238:VAL:HB	1:A:269:MET:HE1	17	0.51
(1,3024)	1:A:233:THR:HB	1:A:234:GLN:HA	14	0.51
(1,3002)	1:A:221:GLY:HA2	1:A:222:SER:H	2	0.51
(1,3002)	1:A:221:GLY:HA2	1:A:222:SER:H	6	0.51
(1,2610)	1:A:162:SER:HA	1:A:172:MET:HE3	5	0.51
(1,2610)	1:A:162:SER:HA	1:A:172:MET:HE3	12	0.51
(1,214)	1:A:16:MET:HE3	1:A:38:VAL:H	17	0.51
(1,155)	1:A:15:TYR:HA	1:A:16:MET:HE3	19	0.51
(1,148)	1:A:15:TYR:H	1:A:16:MET:HE3	6	0.51
(1,148)	1:A:15:TYR:H	1:A:16:MET:HE3	7	0.51
(1,1304)	1:A:83:ALA:HB1	1:A:84:LEU:HA	9	0.51
(1,1263)	1:A:80:HIS:HD2	1:A:83:ALA:HB2	4	0.51
(1,114)	1:A:13:ALA:HB1	1:A:14:TRP:HA	12	0.51
(1,1061)	1:A:66:LEU:HA	1:A:66:LEU:HD23	3	0.51
(1,1036)	1:A:65:SER:HA	1:A:66:LEU:HD23	16	0.51
(1,1036)	1:A:65:SER:HA	1:A:66:LEU:HD23	18	0.51
(1,758)	1:A:49:VAL:H	1:A:63:ILE:HD13	13	0.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,605)	1:A:37:LEU:HA	1:A:102:ALA:HB2	16	0.5
(1,3969)	1:A:55:ASN:HD21	1:A:155:LYS:HD2	8	0.5
(1,3969)	1:A:55:ASN:HD21	1:A:155:LYS:HD3	8	0.5
(1,3969)	1:A:55:ASN:HD22	1:A:155:LYS:HD2	8	0.5
(1,3969)	1:A:55:ASN:HD22	1:A:155:LYS:HD3	8	0.5
(1,3356)	1:A:253:LYS:HA	1:A:255:ALA:HB2	8	0.5
(1,3247)	1:A:243:ILE:HD13	1:A:290:HIS:HA	19	0.5
(1,3205)	1:A:242:ALA:HB1	1:A:258:LEU:HD23	18	0.5
(1,2945)	1:A:185:SER:HB2	1:A:186:PRO:HA	2	0.5
(1,2618)	1:A:162:SER:HB2	1:A:172:MET:HE3	1	0.5
(1,2618)	1:A:162:SER:HB2	1:A:172:MET:HE3	18	0.5
(1,205)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HB1	8	0.5
(1,205)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HB1	11	0.5
(1,205)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HB1	20	0.5
(1,1982)	1:A:134:PHE:HD1	1:A:177:TYR:HD2	11	0.5
(1,1626)	1:A:123:ASP:H	1:A:123:ASP:HB2	16	0.5
(1,148)	1:A:15:TYR:H	1:A:16:MET:HE3	15	0.5
(1,129)	1:A:14:TRP:HA	1:A:16:MET:HE3	18	0.5
(1,1234)	1:A:79:ASP:H	1:A:83:ALA:HB1	4	0.5
(1,563)	1:A:36:PHE:HA	1:A:102:ALA:HB2	19	0.49
(1,521)	1:A:34:GLY:HA2	1:A:99:ILE:HD13	19	0.49
(1,42)	1:A:7:ASP:H	1:A:13:ALA:HB1	2	0.49
(1,3351)	1:A:252:ASP:HA	1:A:255:ALA:HB2	19	0.49
(1,3148)	1:A:241:LYS:H	1:A:263:ILE:HD13	16	0.49
(1,3137)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:294:PHE:HD1	12	0.49
(1,3136)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:294:PHE:H	14	0.49
(1,2985)	1:A:198:TYR:HB2	1:A:199:GLY:HA3	8	0.49
(1,2621)	1:A:162:SER:HG	1:A:172:MET:HE3	12	0.49
(1,2610)	1:A:162:SER:HA	1:A:172:MET:HE3	13	0.49
(1,2610)	1:A:162:SER:HA	1:A:172:MET:HE3	15	0.49
(1,2545)	1:A:160:TRP:HB2	1:A:172:MET:HE1	10	0.49
(1,2216)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:174:PRO:HG2	17	0.49
(1,201)	1:A:16:MET:HE1	1:A:37:LEU:HD23	8	0.49
(1,1611)	1:A:120:THR:HA	1:A:121:ALA:H	1	0.49
(1,1598)	1:A:112:SER:HA	1:A:113:VAL:H	16	0.49
(1,1597)	1:A:112:SER:HA	1:A:112:SER:HG	20	0.49
(1,1424)	1:A:90:ILE:H	1:A:97:THR:HG22	9	0.49
(1,1061)	1:A:66:LEU:HA	1:A:66:LEU:HD23	1	0.49
(1,616)	1:A:37:LEU:HG	1:A:102:ALA:HB2	20	0.48
(1,3488)	1:A:258:LEU:HD21	1:A:279:VAL:HB	12	0.48
(1,3205)	1:A:242:ALA:HB1	1:A:258:LEU:HD23	6	0.48
(1,3136)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:294:PHE:H	7	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3060)	1:A:238:VAL:HB	1:A:269:MET:HE1	12	0.48
(1,2610)	1:A:162:SER:HA	1:A:172:MET:HE3	3	0.48
(1,210)	1:A:16:MET:HE2	1:A:104:ARG:HA	10	0.48
(1,1960)	1:A:134:PHE:HA	1:A:134:PHE:HD1	4	0.48
(1,1611)	1:A:120:THR:HA	1:A:121:ALA:H	7	0.48
(1,1476)	1:A:92:TYR:HD2	1:A:97:THR:HA	20	0.48
(1,1234)	1:A:79:ASP:H	1:A:83:ALA:HB1	9	0.48
(1,1050)	1:A:66:LEU:H	1:A:66:LEU:HD23	7	0.48
(1,1014)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HD11	11	0.48
(1,1014)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HD12	11	0.48
(1,1014)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HD13	11	0.48
(1,616)	1:A:37:LEU:HG	1:A:102:ALA:HB2	5	0.47
(1,563)	1:A:36:PHE:HA	1:A:102:ALA:HB2	3	0.47
(1,42)	1:A:7:ASP:H	1:A:13:ALA:HB1	3	0.47
(1,42)	1:A:7:ASP:H	1:A:13:ALA:HB1	18	0.47
(1,3439)	1:A:257:ALA:HB1	1:A:282:ARG:HH12	8	0.47
(1,3226)	1:A:242:ALA:HB3	1:A:291:VAL:HG13	8	0.47
(1,3226)	1:A:242:ALA:HB3	1:A:291:VAL:HG13	20	0.47
(1,3219)	1:A:242:ALA:HB2	1:A:261:GLY:H	9	0.47
(1,3136)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:294:PHE:H	6	0.47
(1,3133)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:293:ILE:H	20	0.47
(1,3046)	1:A:238:VAL:H	1:A:266:VAL:HG13	17	0.47
(1,2610)	1:A:162:SER:HA	1:A:172:MET:HE3	1	0.47
(1,2610)	1:A:162:SER:HA	1:A:172:MET:HE3	19	0.47
(1,187)	1:A:16:MET:H	1:A:16:MET:HE3	18	0.47
(1,1036)	1:A:65:SER:HA	1:A:66:LEU:HD23	6	0.47
(1,540)	1:A:36:PHE:H	1:A:36:PHE:HD2	8	0.46
(1,3680)	1:A:269:MET:HE3	1:A:286:PHE:HZ	10	0.46
(1,3587)	1:A:264:VAL:HG13	1:A:279:VAL:HG23	4	0.46
(1,3351)	1:A:252:ASP:HA	1:A:255:ALA:HB2	13	0.46
(1,3133)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:293:ILE:H	2	0.46
(1,3133)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:293:ILE:H	15	0.46
(1,203)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:H	3	0.46
(1,202)	1:A:16:MET:HE1	1:A:101:PRO:HA	15	0.46
(1,2002)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:174:PRO:HD2	17	0.46
(1,187)	1:A:16:MET:H	1:A:16:MET:HE3	2	0.46
(1,148)	1:A:15:TYR:H	1:A:16:MET:HE3	3	0.46
(1,397)	1:A:27:ARG:HH11	1:A:37:LEU:HD23	15	0.45
(1,3587)	1:A:264:VAL:HG13	1:A:279:VAL:HG23	3	0.45
(1,3488)	1:A:258:LEU:HD21	1:A:279:VAL:HB	8	0.45
(1,3351)	1:A:252:ASP:HA	1:A:255:ALA:HB2	15	0.45
(1,3217)	1:A:242:ALA:HB2	1:A:259:GLU:H	9	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3133)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:293:ILE:H	8	0.45
(1,3006)	1:A:226:ALA:HA	1:A:227:ILE:H	8	0.45
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD11	11	0.45
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD12	11	0.45
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD13	11	0.45
(1,2618)	1:A:162:SER:HB2	1:A:172:MET:HE3	16	0.45
(1,2610)	1:A:162:SER:HA	1:A:172:MET:HE3	4	0.45
(1,2610)	1:A:162:SER:HA	1:A:172:MET:HE3	9	0.45
(1,2610)	1:A:162:SER:HA	1:A:172:MET:HE3	10	0.45
(1,2610)	1:A:162:SER:HA	1:A:172:MET:HE3	18	0.45
(1,2546)	1:A:160:TRP:HB2	1:A:172:MET:HE2	6	0.45
(1,2275)	1:A:149:ILE:HA	1:A:149:ILE:HD12	14	0.45
(1,1882)	1:A:132:TYR:HB2	1:A:132:TYR:HD1	7	0.45
(1,1882)	1:A:132:TYR:HB2	1:A:132:TYR:HD1	20	0.45
(1,187)	1:A:16:MET:H	1:A:16:MET:HE3	5	0.45
(1,187)	1:A:16:MET:H	1:A:16:MET:HE3	20	0.45
(1,115)	1:A:13:ALA:HB1	1:A:14:TRP:HD1	7	0.45
(1,1036)	1:A:65:SER:HA	1:A:66:LEU:HD23	14	0.45
(1,758)	1:A:49:VAL:H	1:A:63:ILE:HD13	17	0.44
(1,397)	1:A:27:ARG:HH11	1:A:37:LEU:HD23	17	0.44
(1,3440)	1:A:257:ALA:HB1	1:A:282:ARG:HH22	6	0.44
(1,3356)	1:A:253:LYS:HA	1:A:255:ALA:HB2	15	0.44
(1,3321)	1:A:249:CYS:H	1:A:255:ALA:HB2	7	0.44
(1,3205)	1:A:242:ALA:HB1	1:A:258:LEU:HD23	15	0.44
(1,3085)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:263:ILE:HD12	13	0.44
(1,274)	1:A:21:ARG:HA	1:A:39:ARG:HH21	12	0.44
(1,2656)	1:A:164:ARG:HA	1:A:165:ASN:HB2	12	0.44
(1,2618)	1:A:162:SER:HB2	1:A:172:MET:HE3	4	0.44
(1,2595)	1:A:162:SER:H	1:A:172:MET:HE3	10	0.44
(1,2595)	1:A:162:SER:H	1:A:172:MET:HE3	12	0.44
(1,2546)	1:A:160:TRP:HB2	1:A:172:MET:HE2	14	0.44
(1,2545)	1:A:160:TRP:HB2	1:A:172:MET:HE1	1	0.44
(1,2462)	1:A:156:PRO:HD2	1:A:172:MET:HG2	12	0.44
(1,2286)	1:A:149:ILE:HD12	1:A:150:LEU:H	19	0.44
(1,214)	1:A:16:MET:HE3	1:A:38:VAL:H	12	0.44
(1,204)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HA	16	0.44
(1,1882)	1:A:132:TYR:HB2	1:A:132:TYR:HD1	5	0.44
(1,1882)	1:A:132:TYR:HB2	1:A:132:TYR:HD1	13	0.44
(1,155)	1:A:15:TYR:HA	1:A:16:MET:HE3	11	0.44
(1,155)	1:A:15:TYR:HA	1:A:16:MET:HE3	16	0.44
(1,1263)	1:A:80:HIS:HD2	1:A:83:ALA:HB2	13	0.44
(1,1061)	1:A:66:LEU:HA	1:A:66:LEU:HD23	14	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1036)	1:A:65:SER:HA	1:A:66:LEU:HD23	15	0.44
(1,758)	1:A:49:VAL:H	1:A:63:ILE:HD13	2	0.43
(1,758)	1:A:49:VAL:H	1:A:63:ILE:HD13	15	0.43
(1,605)	1:A:37:LEU:HA	1:A:102:ALA:HB2	15	0.43
(1,605)	1:A:37:LEU:HA	1:A:102:ALA:HB2	19	0.43
(1,540)	1:A:36:PHE:H	1:A:36:PHE:HD2	18	0.43
(1,521)	1:A:34:GLY:HA2	1:A:99:ILE:HD13	9	0.43
(1,521)	1:A:34:GLY:HA2	1:A:99:ILE:HD13	15	0.43
(1,3552)	1:A:263:ILE:HD11	1:A:294:PHE:HE2	10	0.43
(1,3351)	1:A:252:ASP:HA	1:A:255:ALA:HB2	3	0.43
(1,3139)	1:A:240:ALA:HB3	1:A:264:VAL:H	19	0.43
(1,3054)	1:A:238:VAL:HA	1:A:269:MET:HE1	12	0.43
(1,3048)	1:A:238:VAL:H	1:A:269:MET:HE1	13	0.43
(1,2610)	1:A:162:SER:HA	1:A:172:MET:HE3	7	0.43
(1,2610)	1:A:162:SER:HA	1:A:172:MET:HE3	14	0.43
(1,2570)	1:A:161:TRP:HA	1:A:172:MET:HE2	11	0.43
(1,2545)	1:A:160:TRP:HB2	1:A:172:MET:HE1	3	0.43
(1,2545)	1:A:160:TRP:HB2	1:A:172:MET:HE1	5	0.43
(1,214)	1:A:16:MET:HE3	1:A:38:VAL:H	18	0.43
(1,205)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HB1	13	0.43
(1,1898)	1:A:132:TYR:HE2	1:A:177:TYR:HH	19	0.43
(1,1882)	1:A:132:TYR:HB2	1:A:132:TYR:HD1	15	0.43
(1,1882)	1:A:132:TYR:HB2	1:A:132:TYR:HD1	16	0.43
(1,1882)	1:A:132:TYR:HB2	1:A:132:TYR:HD1	17	0.43
(1,1476)	1:A:92:TYR:HD2	1:A:97:THR:HA	15	0.43
(1,1263)	1:A:80:HIS:HD2	1:A:83:ALA:HB2	5	0.43
(1,1227)	1:A:78:PHE:HE2	1:A:88:TYR:HD1	7	0.43
(1,1227)	1:A:78:PHE:HE2	1:A:88:TYR:HD2	7	0.43
(1,1061)	1:A:66:LEU:HA	1:A:66:LEU:HD23	10	0.43
(1,1050)	1:A:66:LEU:H	1:A:66:LEU:HD23	5	0.43
(1,563)	1:A:36:PHE:HA	1:A:102:ALA:HB2	1	0.42
(1,521)	1:A:34:GLY:HA2	1:A:99:ILE:HD13	10	0.42
(1,3677)	1:A:269:MET:HE3	1:A:275:TRP:HZ3	9	0.42
(1,3378)	1:A:255:ALA:H	1:A:255:ALA:HB2	17	0.42
(1,3205)	1:A:242:ALA:HB1	1:A:258:LEU:HD23	1	0.42
(1,3166)	1:A:241:LYS:HA	1:A:263:ILE:HD13	12	0.42
(1,3060)	1:A:238:VAL:HB	1:A:269:MET:HE1	1	0.42
(1,3006)	1:A:226:ALA:HA	1:A:227:ILE:H	17	0.42
(1,2917)	1:A:182:VAL:HA	1:A:182:VAL:HG13	1	0.42
(1,2610)	1:A:162:SER:HA	1:A:172:MET:HE3	20	0.42
(1,204)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HA	18	0.42
(1,201)	1:A:16:MET:HE1	1:A:37:LEU:HD23	1	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1882)	1:A:132:TYR:HB2	1:A:132:TYR:HD1	8	0.42
(1,1882)	1:A:132:TYR:HB2	1:A:132:TYR:HD1	9	0.42
(1,1882)	1:A:132:TYR:HB2	1:A:132:TYR:HD1	19	0.42
(1,1796)	1:A:130:THR:H	1:A:144:PHE:HD1	6	0.42
(1,1626)	1:A:123:ASP:H	1:A:123:ASP:HB2	8	0.42
(1,148)	1:A:15:TYR:H	1:A:16:MET:HE3	14	0.42
(1,129)	1:A:14:TRP:HA	1:A:16:MET:HE3	2	0.42
(1,1061)	1:A:66:LEU:HA	1:A:66:LEU:HD23	7	0.42
(1,1050)	1:A:66:LEU:H	1:A:66:LEU:HD23	18	0.42
(1,1036)	1:A:65:SER:HA	1:A:66:LEU:HD23	2	0.42
(1,77)	1:A:10:ASP:HA	1:A:14:TRP:HE1	10	0.41
(1,758)	1:A:49:VAL:H	1:A:63:ILE:HD13	5	0.41
(1,758)	1:A:49:VAL:H	1:A:63:ILE:HD13	20	0.41
(1,540)	1:A:36:PHE:H	1:A:36:PHE:HD2	20	0.41
(1,3378)	1:A:255:ALA:H	1:A:255:ALA:HB2	11	0.41
(1,3351)	1:A:252:ASP:HA	1:A:255:ALA:HB2	4	0.41
(1,3308)	1:A:247:VAL:HA	1:A:257:ALA:HB2	18	0.41
(1,3004)	1:A:223:PRO:HA	1:A:224:GLY:H	12	0.41
(1,2914)	1:A:182:VAL:H	1:A:182:VAL:HG21	14	0.41
(1,2594)	1:A:162:SER:H	1:A:172:MET:HE2	11	0.41
(1,2546)	1:A:160:TRP:HB2	1:A:172:MET:HE2	9	0.41
(1,2521)	1:A:160:TRP:H	1:A:172:MET:HE1	1	0.41
(1,2274)	1:A:149:ILE:H	1:A:166:LYS:HE2	12	0.41
(1,2220)	1:A:144:PHE:HD2	1:A:150:LEU:HD11	6	0.41
(1,2220)	1:A:144:PHE:HD2	1:A:150:LEU:HD12	6	0.41
(1,2220)	1:A:144:PHE:HD2	1:A:150:LEU:HD13	6	0.41
(1,2220)	1:A:144:PHE:HD2	1:A:150:LEU:HD21	6	0.41
(1,2220)	1:A:144:PHE:HD2	1:A:150:LEU:HD22	6	0.41
(1,2220)	1:A:144:PHE:HD2	1:A:150:LEU:HD23	6	0.41
(1,204)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HA	13	0.41
(1,1892)	1:A:132:TYR:HD1	1:A:177:TYR:HA	4	0.41
(1,1882)	1:A:132:TYR:HB2	1:A:132:TYR:HD1	11	0.41
(1,1882)	1:A:132:TYR:HB2	1:A:132:TYR:HD1	14	0.41
(1,1243)	1:A:80:HIS:H	1:A:83:ALA:HB1	7	0.41
(1,1214)	1:A:78:PHE:HE1	1:A:87:PHE:HD2	8	0.41
(1,1050)	1:A:66:LEU:H	1:A:66:LEU:HD23	13	0.41
(1,1050)	1:A:66:LEU:H	1:A:66:LEU:HD23	20	0.41
(1,1036)	1:A:65:SER:HA	1:A:66:LEU:HD23	11	0.41
(1,1036)	1:A:65:SER:HA	1:A:66:LEU:HD23	20	0.41
(1,70)	1:A:10:ASP:H	1:A:14:TRP:HD1	12	0.4
(1,616)	1:A:37:LEU:HG	1:A:102:ALA:HB2	8	0.4
(1,540)	1:A:36:PHE:H	1:A:36:PHE:HD2	2	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,540)	1:A:36:PHE:H	1:A:36:PHE:HD2	15	0.4
(1,3678)	1:A:269:MET:HE3	1:A:275:TRP:HZ2	10	0.4
(1,3677)	1:A:269:MET:HE3	1:A:275:TRP:HZ3	10	0.4
(1,3351)	1:A:252:ASP:HA	1:A:255:ALA:HB2	7	0.4
(1,3200)	1:A:242:ALA:HB1	1:A:258:LEU:HG	12	0.4
(1,3166)	1:A:241:LYS:HA	1:A:263:ILE:HD13	10	0.4
(1,3166)	1:A:241:LYS:HA	1:A:263:ILE:HD13	17	0.4
(1,3004)	1:A:223:PRO:HA	1:A:224:GLY:H	15	0.4
(1,2995)	1:A:211:GLN:HB2	1:A:212:THR:HA	17	0.4
(1,2621)	1:A:162:SER:HG	1:A:172:MET:HE3	19	0.4
(1,2545)	1:A:160:TRP:HB2	1:A:172:MET:HE1	18	0.4
(1,2545)	1:A:160:TRP:HB2	1:A:172:MET:HE1	19	0.4
(1,2275)	1:A:149:ILE:HA	1:A:149:ILE:HD12	17	0.4
(1,214)	1:A:16:MET:HE3	1:A:38:VAL:H	9	0.4
(1,202)	1:A:16:MET:HE1	1:A:101:PRO:HA	1	0.4
(1,1882)	1:A:132:TYR:HB2	1:A:132:TYR:HD1	4	0.4
(1,1882)	1:A:132:TYR:HB2	1:A:132:TYR:HD1	12	0.4
(1,1882)	1:A:132:TYR:HB2	1:A:132:TYR:HD1	18	0.4
(1,1618)	1:A:122:GLU:H	1:A:122:GLU:HB2	15	0.4
(1,1617)	1:A:121:ALA:H	1:A:122:GLU:HB2	4	0.4
(1,1617)	1:A:121:ALA:H	1:A:122:GLU:HB3	4	0.4
(1,1605)	1:A:115:ALA:H	1:A:115:ALA:HB1	9	0.4
(1,1234)	1:A:79:ASP:H	1:A:83:ALA:HB1	17	0.4
(1,1050)	1:A:66:LEU:H	1:A:66:LEU:HD23	16	0.4
(1,3677)	1:A:269:MET:HE3	1:A:275:TRP:HZ3	12	0.39
(1,3497)	1:A:258:LEU:HD23	1:A:264:VAL:HG22	4	0.39
(1,3497)	1:A:258:LEU:HD23	1:A:264:VAL:HG22	8	0.39
(1,3308)	1:A:247:VAL:HA	1:A:257:ALA:HB2	2	0.39
(1,3216)	1:A:242:ALA:HB2	1:A:258:LEU:HD23	2	0.39
(1,3137)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:294:PHE:HD1	3	0.39
(1,3088)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:265:LYS:HA	14	0.39
(1,3030)	1:A:233:THR:HG1	1:A:235:ASN:HD22	1	0.39
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD11	7	0.39
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD12	7	0.39
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD13	7	0.39
(1,2521)	1:A:160:TRP:H	1:A:172:MET:HE1	20	0.39
(1,2364)	1:A:152:ILE:HA	1:A:163:ALA:HB2	2	0.39
(1,2275)	1:A:149:ILE:HA	1:A:149:ILE:HD12	20	0.39
(1,214)	1:A:16:MET:HE3	1:A:38:VAL:H	10	0.39
(1,204)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HA	17	0.39
(1,1982)	1:A:134:PHE:HD1	1:A:177:TYR:HD2	1	0.39
(1,1243)	1:A:80:HIS:H	1:A:83:ALA:HB1	11	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1234)	1:A:79:ASP:H	1:A:83:ALA:HB1	3	0.39
(1,1234)	1:A:79:ASP:H	1:A:83:ALA:HB1	6	0.39
(1,1061)	1:A:66:LEU:HA	1:A:66:LEU:HD23	4	0.39
(1,1050)	1:A:66:LEU:H	1:A:66:LEU:HD23	3	0.39
(1,1050)	1:A:66:LEU:H	1:A:66:LEU:HD23	14	0.39
(1,1036)	1:A:65:SER:HA	1:A:66:LEU:HD23	4	0.39
(1,758)	1:A:49:VAL:H	1:A:63:ILE:HD13	1	0.38
(1,605)	1:A:37:LEU:HA	1:A:102:ALA:HB2	1	0.38
(1,540)	1:A:36:PHE:H	1:A:36:PHE:HD2	16	0.38
(1,3867)	1:A:286:PHE:HE2	1:A:291:VAL:HG23	6	0.38
(1,3496)	1:A:258:LEU:HD23	1:A:264:VAL:HA	13	0.38
(1,3488)	1:A:258:LEU:HD21	1:A:279:VAL:HB	15	0.38
(1,3378)	1:A:255:ALA:H	1:A:255:ALA:HB2	12	0.38
(1,3217)	1:A:242:ALA:HB2	1:A:259:GLU:H	17	0.38
(1,3148)	1:A:241:LYS:H	1:A:263:ILE:HD13	6	0.38
(1,307)	1:A:22:GLN:H	1:A:22:GLN:HE21	20	0.38
(1,3001)	1:A:220:SER:HA	1:A:221:GLY:H	12	0.38
(1,2983)	1:A:198:TYR:H	1:A:198:TYR:HB2	6	0.38
(1,2521)	1:A:160:TRP:H	1:A:172:MET:HE1	19	0.38
(1,2364)	1:A:152:ILE:HA	1:A:163:ALA:HB2	7	0.38
(1,2286)	1:A:149:ILE:HD12	1:A:150:LEU:H	11	0.38
(1,1991)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:160:TRP:HH2	14	0.38
(1,1942)	1:A:133:ASP:HB2	1:A:146:LYS:HG2	1	0.38
(1,1243)	1:A:80:HIS:H	1:A:83:ALA:HB1	8	0.38
(1,1234)	1:A:79:ASP:H	1:A:83:ALA:HB1	10	0.38
(1,1061)	1:A:66:LEU:HA	1:A:66:LEU:HD23	5	0.38
(1,1061)	1:A:66:LEU:HA	1:A:66:LEU:HD23	12	0.38
(1,540)	1:A:36:PHE:H	1:A:36:PHE:HD2	4	0.37
(1,3972)	1:A:76:GLN:HG2	1:A:169:ARG:HA	20	0.37
(1,3972)	1:A:76:GLN:HG3	1:A:169:ARG:HA	20	0.37
(1,3378)	1:A:255:ALA:H	1:A:255:ALA:HB2	3	0.37
(1,3378)	1:A:255:ALA:H	1:A:255:ALA:HB2	16	0.37
(1,3353)	1:A:253:LYS:H	1:A:255:ALA:HB2	5	0.37
(1,3219)	1:A:242:ALA:HB2	1:A:261:GLY:H	4	0.37
(1,3219)	1:A:242:ALA:HB2	1:A:261:GLY:H	12	0.37
(1,3210)	1:A:242:ALA:HB1	1:A:291:VAL:HB	9	0.37
(1,3199)	1:A:242:ALA:HB1	1:A:244:GLN:H	7	0.37
(1,3133)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:293:ILE:H	16	0.37
(1,3133)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:293:ILE:H	17	0.37
(1,3048)	1:A:238:VAL:H	1:A:269:MET:HE1	12	0.37
(1,2610)	1:A:162:SER:HA	1:A:172:MET:HE3	16	0.37
(1,2595)	1:A:162:SER:H	1:A:172:MET:HE3	9	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2545)	1:A:160:TRP:HB2	1:A:172:MET:HE1	13	0.37
(1,2364)	1:A:152:ILE:HA	1:A:163:ALA:HB2	20	0.37
(1,2345)	1:A:151:VAL:HB	1:A:164:ARG:HG2	9	0.37
(1,2229)	1:A:145:LYS:H	1:A:146:LYS:HD2	3	0.37
(1,2215)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:174:PRO:HB2	6	0.37
(1,2215)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:174:PRO:HB3	6	0.37
(1,187)	1:A:16:MET:H	1:A:16:MET:HE3	12	0.37
(1,148)	1:A:15:TYR:H	1:A:16:MET:HE3	1	0.37
(1,1447)	1:A:92:TYR:H	1:A:97:THR:HG22	10	0.37
(1,1036)	1:A:65:SER:HA	1:A:66:LEU:HD23	19	0.37
(1,758)	1:A:49:VAL:H	1:A:63:ILE:HD13	3	0.36
(1,758)	1:A:49:VAL:H	1:A:63:ILE:HD13	11	0.36
(1,709)	1:A:43:THR:HG1	1:A:62:ILE:HD11	18	0.36
(1,3485)	1:A:258:LEU:HD21	1:A:264:VAL:HB	1	0.36
(1,3378)	1:A:255:ALA:H	1:A:255:ALA:HB2	1	0.36
(1,3378)	1:A:255:ALA:H	1:A:255:ALA:HB2	5	0.36
(1,3360)	1:A:254:THR:H	1:A:255:ALA:HB2	7	0.36
(1,3360)	1:A:254:THR:H	1:A:255:ALA:HB2	14	0.36
(1,3351)	1:A:252:ASP:HA	1:A:255:ALA:HB2	11	0.36
(1,3328)	1:A:249:CYS:HG	1:A:251:TYR:HE1	5	0.36
(1,3308)	1:A:247:VAL:HA	1:A:257:ALA:HB2	19	0.36
(1,3137)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:294:PHE:HD1	13	0.36
(1,3136)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:294:PHE:H	8	0.36
(1,3133)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:293:ILE:H	4	0.36
(1,3090)	1:A:239:PHE:HE1	1:A:265:LYS:HA	14	0.36
(1,3054)	1:A:238:VAL:HA	1:A:269:MET:HE1	9	0.36
(1,3004)	1:A:223:PRO:HA	1:A:224:GLY:H	18	0.36
(1,2992)	1:A:207:TYR:HA	1:A:207:TYR:HD1	9	0.36
(1,2983)	1:A:198:TYR:H	1:A:198:TYR:HB2	10	0.36
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD11	14	0.36
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD12	14	0.36
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD13	14	0.36
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD11	15	0.36
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD12	15	0.36
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD13	15	0.36
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD11	16	0.36
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD12	16	0.36
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD13	16	0.36
(1,204)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HA	8	0.36
(1,1263)	1:A:80:HIS:HD2	1:A:83:ALA:HB2	18	0.36
(1,11)	1:A:4:ALA:HA	1:A:99:ILE:HD12	11	0.36
(1,1061)	1:A:66:LEU:HA	1:A:66:LEU:HD23	2	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1061)	1:A:66:LEU:HA	1:A:66:LEU:HD23	8	0.36
(1,1061)	1:A:66:LEU:HA	1:A:66:LEU:HD23	15	0.36
(1,1050)	1:A:66:LEU:H	1:A:66:LEU:HD23	11	0.36
(1,616)	1:A:37:LEU:HG	1:A:102:ALA:HB2	1	0.35
(1,540)	1:A:36:PHE:H	1:A:36:PHE:HD2	13	0.35
(1,3695)	1:A:270:ASN:HA	1:A:273:GLY:H	9	0.35
(1,3440)	1:A:257:ALA:HB1	1:A:282:ARG:HH22	19	0.35
(1,3378)	1:A:255:ALA:H	1:A:255:ALA:HB2	2	0.35
(1,3133)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:293:ILE:H	3	0.35
(1,3133)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:293:ILE:H	7	0.35
(1,3054)	1:A:238:VAL:HA	1:A:269:MET:HE1	2	0.35
(1,2621)	1:A:162:SER:HG	1:A:172:MET:HE3	10	0.35
(1,2545)	1:A:160:TRP:HB2	1:A:172:MET:HE1	20	0.35
(1,2374)	1:A:152:ILE:HD11	1:A:163:ALA:HB3	9	0.35
(1,2374)	1:A:152:ILE:HD12	1:A:163:ALA:HB3	9	0.35
(1,2374)	1:A:152:ILE:HD13	1:A:163:ALA:HB3	9	0.35
(1,2364)	1:A:152:ILE:HA	1:A:163:ALA:HB2	19	0.35
(1,201)	1:A:16:MET:HE1	1:A:37:LEU:HD23	20	0.35
(1,1061)	1:A:66:LEU:HA	1:A:66:LEU:HD23	6	0.35
(1,1061)	1:A:66:LEU:HA	1:A:66:LEU:HD23	9	0.35
(1,1061)	1:A:66:LEU:HA	1:A:66:LEU:HD23	16	0.35
(1,1061)	1:A:66:LEU:HA	1:A:66:LEU:HD23	17	0.35
(1,1061)	1:A:66:LEU:HA	1:A:66:LEU:HD23	18	0.35
(1,758)	1:A:49:VAL:H	1:A:63:ILE:HD13	16	0.34
(1,3971)	1:A:75:ASP:HB2	1:A:168:GLY:HA2	17	0.34
(1,3971)	1:A:75:ASP:HB2	1:A:168:GLY:HA3	17	0.34
(1,3488)	1:A:258:LEU:HD21	1:A:279:VAL:HB	2	0.34
(1,3488)	1:A:258:LEU:HD21	1:A:279:VAL:HB	9	0.34
(1,3414)	1:A:256:LEU:HD11	1:A:279:VAL:HB	9	0.34
(1,3414)	1:A:256:LEU:HD12	1:A:279:VAL:HB	9	0.34
(1,3414)	1:A:256:LEU:HD13	1:A:279:VAL:HB	9	0.34
(1,3414)	1:A:256:LEU:HD21	1:A:279:VAL:HB	9	0.34
(1,3414)	1:A:256:LEU:HD22	1:A:279:VAL:HB	9	0.34
(1,3414)	1:A:256:LEU:HD23	1:A:279:VAL:HB	9	0.34
(1,3378)	1:A:255:ALA:H	1:A:255:ALA:HB2	4	0.34
(1,3002)	1:A:221:GLY:HA2	1:A:222:SER:H	1	0.34
(1,2993)	1:A:210:PRO:HA	1:A:211:GLN:H	13	0.34
(1,2961)	1:A:187:HIS:HB2	1:A:187:HIS:HD1	11	0.34
(1,274)	1:A:21:ARG:HA	1:A:39:ARG:HH21	10	0.34
(1,2546)	1:A:160:TRP:HB2	1:A:172:MET:HE2	12	0.34
(1,2545)	1:A:160:TRP:HB2	1:A:172:MET:HE1	4	0.34
(1,2364)	1:A:152:ILE:HA	1:A:163:ALA:HB2	13	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,201)	1:A:16:MET:HE1	1:A:37:LEU:HD23	7	0.34
(1,1626)	1:A:123:ASP:H	1:A:123:ASP:HB2	13	0.34
(1,1596)	1:A:112:SER:H	1:A:112:SER:HB2	5	0.34
(1,1260)	1:A:80:HIS:HD1	1:A:83:ALA:HB2	17	0.34
(1,1243)	1:A:80:HIS:H	1:A:83:ALA:HB1	4	0.34
(1,1234)	1:A:79:ASP:H	1:A:83:ALA:HB1	2	0.34
(1,1234)	1:A:79:ASP:H	1:A:83:ALA:HB1	8	0.34
(1,1061)	1:A:66:LEU:HA	1:A:66:LEU:HD23	13	0.34
(1,1050)	1:A:66:LEU:H	1:A:66:LEU:HD23	2	0.34
(1,806)	1:A:50:LEU:HG	1:A:63:ILE:HD12	11	0.33
(1,616)	1:A:37:LEU:HG	1:A:102:ALA:HB2	3	0.33
(1,616)	1:A:37:LEU:HG	1:A:102:ALA:HB2	13	0.33
(1,563)	1:A:36:PHE:HA	1:A:102:ALA:HB2	10	0.33
(1,3973)	1:A:94:ASP:HA	1:A:154:GLU:HB2	14	0.33
(1,3973)	1:A:94:ASP:HA	1:A:154:GLU:HB3	14	0.33
(1,3970)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:153:ILE:HD11	4	0.33
(1,3970)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:153:ILE:HD12	4	0.33
(1,3970)	1:A:74:GLY:HA2	1:A:153:ILE:HD13	4	0.33
(1,397)	1:A:27:ARG:HH11	1:A:37:LEU:HD23	19	0.33
(1,3440)	1:A:257:ALA:HB1	1:A:282:ARG:HH22	14	0.33
(1,3429)	1:A:257:ALA:H	1:A:258:LEU:HD22	9	0.33
(1,3378)	1:A:255:ALA:H	1:A:255:ALA:HB2	18	0.33
(1,3356)	1:A:253:LYS:HA	1:A:255:ALA:HB2	12	0.33
(1,3148)	1:A:241:LYS:H	1:A:263:ILE:HD13	18	0.33
(1,3137)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:294:PHE:HD1	10	0.33
(1,3072)	1:A:239:PHE:HA	1:A:239:PHE:HD1	20	0.33
(1,3060)	1:A:238:VAL:HB	1:A:269:MET:HE1	3	0.33
(1,2993)	1:A:210:PRO:HA	1:A:211:GLN:H	2	0.33
(1,2993)	1:A:210:PRO:HA	1:A:211:GLN:H	3	0.33
(1,2993)	1:A:210:PRO:HA	1:A:211:GLN:H	18	0.33
(1,2992)	1:A:207:TYR:HA	1:A:207:TYR:HD1	4	0.33
(1,2710)	1:A:167:ASP:H	1:A:167:ASP:HB2	9	0.33
(1,2621)	1:A:162:SER:HG	1:A:172:MET:HE3	15	0.33
(1,2546)	1:A:160:TRP:HB2	1:A:172:MET:HE2	1	0.33
(1,2364)	1:A:152:ILE:HA	1:A:163:ALA:HB2	6	0.33
(1,2364)	1:A:152:ILE:HA	1:A:163:ALA:HB2	9	0.33
(1,2275)	1:A:149:ILE:HA	1:A:149:ILE:HD12	12	0.33
(1,1892)	1:A:132:TYR:HD1	1:A:177:TYR:HA	18	0.33
(1,1877)	1:A:132:TYR:HA	1:A:132:TYR:HD1	4	0.33
(1,1626)	1:A:123:ASP:H	1:A:123:ASP:HB2	4	0.33
(1,1622)	1:A:122:GLU:HA	1:A:123:ASP:HB2	5	0.33
(1,1622)	1:A:122:GLU:HA	1:A:123:ASP:HB3	5	0.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1620)	1:A:122:GLU:HA	1:A:123:ASP:H	9	0.33
(1,1620)	1:A:122:GLU:HA	1:A:123:ASP:H	10	0.33
(1,1596)	1:A:112:SER:H	1:A:112:SER:HB2	4	0.33
(1,1596)	1:A:112:SER:H	1:A:112:SER:HB2	13	0.33
(1,1243)	1:A:80:HIS:H	1:A:83:ALA:HB1	17	0.33
(1,1234)	1:A:79:ASP:H	1:A:83:ALA:HB1	1	0.33
(1,1234)	1:A:79:ASP:H	1:A:83:ALA:HB1	13	0.33
(1,1234)	1:A:79:ASP:H	1:A:83:ALA:HB1	16	0.33
(1,1203)	1:A:78:PHE:HD1	1:A:83:ALA:HB1	9	0.33
(1,114)	1:A:13:ALA:HB1	1:A:14:TRP:HA	6	0.33
(1,114)	1:A:13:ALA:HB1	1:A:14:TRP:HA	17	0.33
(1,1061)	1:A:66:LEU:HA	1:A:66:LEU:HD23	11	0.33
(1,1061)	1:A:66:LEU:HA	1:A:66:LEU:HD23	20	0.33
(1,1036)	1:A:65:SER:HA	1:A:66:LEU:HD23	9	0.33
(1,1036)	1:A:65:SER:HA	1:A:66:LEU:HD23	12	0.33
(1,1014)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HD11	16	0.33
(1,1014)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HD12	16	0.33
(1,1014)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HD13	16	0.33
(1,758)	1:A:49:VAL:H	1:A:63:ILE:HD13	7	0.32
(1,521)	1:A:34:GLY:HA2	1:A:99:ILE:HD13	6	0.32
(1,3973)	1:A:94:ASP:HA	1:A:154:GLU:HB2	16	0.32
(1,3973)	1:A:94:ASP:HA	1:A:154:GLU:HB3	16	0.32
(1,3552)	1:A:263:ILE:HD11	1:A:294:PHE:HE2	17	0.32
(1,3494)	1:A:258:LEU:HD22	1:A:279:VAL:HG11	8	0.32
(1,3490)	1:A:258:LEU:HD21	1:A:279:VAL:HG22	19	0.32
(1,3441)	1:A:257:ALA:HB2	1:A:258:LEU:H	9	0.32
(1,3438)	1:A:257:ALA:HB1	1:A:282:ARG:HH11	17	0.32
(1,3247)	1:A:243:ILE:HD13	1:A:290:HIS:HA	15	0.32
(1,3205)	1:A:242:ALA:HB1	1:A:258:LEU:HD23	20	0.32
(1,3148)	1:A:241:LYS:H	1:A:263:ILE:HD13	5	0.32
(1,3136)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:294:PHE:H	5	0.32
(1,3072)	1:A:239:PHE:HA	1:A:239:PHE:HD1	7	0.32
(1,3048)	1:A:238:VAL:H	1:A:269:MET:HE1	19	0.32
(1,3001)	1:A:220:SER:HA	1:A:221:GLY:H	5	0.32
(1,2993)	1:A:210:PRO:HA	1:A:211:GLN:H	19	0.32
(1,2983)	1:A:198:TYR:H	1:A:198:TYR:HB2	12	0.32
(1,2963)	1:A:187:HIS:HB2	1:A:188:GLY:HA2	4	0.32
(1,2546)	1:A:160:TRP:HB2	1:A:172:MET:HE2	7	0.32
(1,2545)	1:A:160:TRP:HB2	1:A:172:MET:HE1	15	0.32
(1,204)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HA	19	0.32
(1,201)	1:A:16:MET:HE1	1:A:37:LEU:HD23	16	0.32
(1,187)	1:A:16:MET:H	1:A:16:MET:HE3	16	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1625)	1:A:122:GLU:HB2	1:A:123:ASP:HA	20	0.32
(1,1618)	1:A:122:GLU:H	1:A:122:GLU:HB2	18	0.32
(1,1596)	1:A:112:SER:H	1:A:112:SER:HB2	1	0.32
(1,114)	1:A:13:ALA:HB1	1:A:14:TRP:HA	15	0.32
(1,1061)	1:A:66:LEU:HA	1:A:66:LEU:HD23	19	0.32
(1,563)	1:A:36:PHE:HA	1:A:102:ALA:HB2	12	0.31
(1,540)	1:A:36:PHE:H	1:A:36:PHE:HD2	9	0.31
(1,3552)	1:A:263:ILE:HD11	1:A:294:PHE:HE2	6	0.31
(1,3488)	1:A:258:LEU:HD21	1:A:279:VAL:HB	4	0.31
(1,3486)	1:A:258:LEU:HD21	1:A:264:VAL:HG13	12	0.31
(1,3378)	1:A:255:ALA:H	1:A:255:ALA:HB2	8	0.31
(1,3378)	1:A:255:ALA:H	1:A:255:ALA:HB2	20	0.31
(1,3351)	1:A:252:ASP:HA	1:A:255:ALA:HB2	18	0.31
(1,3328)	1:A:249:CYS:HG	1:A:251:TYR:HE1	15	0.31
(1,3321)	1:A:249:CYS:H	1:A:255:ALA:HB2	5	0.31
(1,3300)	1:A:247:VAL:H	1:A:247:VAL:HG23	10	0.31
(1,3287)	1:A:246:ARG:HE	1:A:290:HIS:HD1	9	0.31
(1,3002)	1:A:221:GLY:HA2	1:A:222:SER:H	8	0.31
(1,2992)	1:A:207:TYR:HA	1:A:207:TYR:HD1	16	0.31
(1,2621)	1:A:162:SER:HG	1:A:172:MET:HE3	16	0.31
(1,2546)	1:A:160:TRP:HB2	1:A:172:MET:HE2	18	0.31
(1,2374)	1:A:152:ILE:HD11	1:A:163:ALA:HB3	10	0.31
(1,2374)	1:A:152:ILE:HD12	1:A:163:ALA:HB3	10	0.31
(1,2374)	1:A:152:ILE:HD13	1:A:163:ALA:HB3	10	0.31
(1,2374)	1:A:152:ILE:HD11	1:A:163:ALA:HB3	12	0.31
(1,2374)	1:A:152:ILE:HD12	1:A:163:ALA:HB3	12	0.31
(1,2374)	1:A:152:ILE:HD13	1:A:163:ALA:HB3	12	0.31
(1,202)	1:A:16:MET:HE1	1:A:101:PRO:HA	14	0.31
(1,2002)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:174:PRO:HD2	14	0.31
(1,2001)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:160:TRP:HH2	11	0.31
(1,1673)	1:A:127:TYR:HB2	1:A:127:TYR:HD2	9	0.31
(1,1673)	1:A:127:TYR:HB2	1:A:127:TYR:HD2	10	0.31
(1,1620)	1:A:122:GLU:HA	1:A:123:ASP:H	5	0.31
(1,1620)	1:A:122:GLU:HA	1:A:123:ASP:H	17	0.31
(1,1014)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HD11	1	0.31
(1,1014)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HD12	1	0.31
(1,1014)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HD13	1	0.31
(1,1014)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HD11	20	0.31
(1,1014)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HD12	20	0.31
(1,1014)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HD13	20	0.31
(1,3378)	1:A:255:ALA:H	1:A:255:ALA:HB2	13	0.3
(1,3358)	1:A:254:THR:H	1:A:254:THR:HG22	17	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3308)	1:A:247:VAL:HA	1:A:257:ALA:HB2	16	0.3
(1,3248)	1:A:243:ILE:HD13	1:A:291:VAL:HA	6	0.3
(1,3217)	1:A:242:ALA:HB2	1:A:259:GLU:H	18	0.3
(1,3205)	1:A:242:ALA:HB1	1:A:258:LEU:HD23	16	0.3
(1,3136)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:294:PHE:H	1	0.3
(1,2995)	1:A:211:GLN:HB2	1:A:212:THR:HA	1	0.3
(1,2985)	1:A:198:TYR:HB2	1:A:199:GLY:HA3	2	0.3
(1,2983)	1:A:198:TYR:H	1:A:198:TYR:HB2	9	0.3
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD11	4	0.3
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD12	4	0.3
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD13	4	0.3
(1,2546)	1:A:160:TRP:HB2	1:A:172:MET:HE2	16	0.3
(1,2428)	1:A:155:LYS:HB2	1:A:155:LYS:HD2	9	0.3
(1,2286)	1:A:149:ILE:HD12	1:A:150:LEU:H	4	0.3
(1,2285)	1:A:149:ILE:HB	1:A:166:LYS:HB2	9	0.3
(1,2214)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:173:ILE:HD11	17	0.3
(1,2214)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:173:ILE:HD12	17	0.3
(1,2214)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:173:ILE:HD13	17	0.3
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD11	19	0.3
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD12	19	0.3
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD13	19	0.3
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD21	19	0.3
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD22	19	0.3
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD23	19	0.3
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD11	19	0.3
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD12	19	0.3
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD13	19	0.3
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD21	19	0.3
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD22	19	0.3
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD23	19	0.3
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD11	19	0.3
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD12	19	0.3
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD13	19	0.3
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD21	19	0.3
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD22	19	0.3
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD23	19	0.3
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD11	19	0.3
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD12	19	0.3
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD13	19	0.3
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD21	19	0.3
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD22	19	0.3
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD23	19	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD11	19	0.3
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD12	19	0.3
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD13	19	0.3
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD21	19	0.3
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD22	19	0.3
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD23	19	0.3
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD11	19	0.3
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD12	19	0.3
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD13	19	0.3
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD21	19	0.3
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD22	19	0.3
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD23	19	0.3
(1,207)	1:A:16:MET:HE1	1:A:104:ARG:HA	10	0.3
(1,1829)	1:A:130:THR:HB	1:A:177:TYR:HB2	19	0.3
(1,1611)	1:A:120:THR:HA	1:A:121:ALA:H	9	0.3
(1,1424)	1:A:90:ILE:H	1:A:97:THR:HG22	3	0.3
(1,1424)	1:A:90:ILE:H	1:A:97:THR:HG22	12	0.3
(1,1260)	1:A:80:HIS:HD1	1:A:83:ALA:HB2	15	0.3
(1,563)	1:A:36:PHE:HA	1:A:102:ALA:HB2	20	0.29
(1,3971)	1:A:75:ASP:HB2	1:A:168:GLY:HA2	11	0.29
(1,3971)	1:A:75:ASP:HB2	1:A:168:GLY:HA3	11	0.29
(1,3757)	1:A:275:TRP:HE3	1:A:291:VAL:HG21	5	0.29
(1,3710)	1:A:272:ASN:H	1:A:273:GLY:H	19	0.29
(1,3441)	1:A:257:ALA:HB2	1:A:258:LEU:H	12	0.29
(1,3378)	1:A:255:ALA:H	1:A:255:ALA:HB2	6	0.29
(1,3378)	1:A:255:ALA:H	1:A:255:ALA:HB2	7	0.29
(1,3378)	1:A:255:ALA:H	1:A:255:ALA:HB2	14	0.29
(1,3378)	1:A:255:ALA:H	1:A:255:ALA:HB2	15	0.29
(1,3351)	1:A:252:ASP:HA	1:A:255:ALA:HB2	2	0.29
(1,3219)	1:A:242:ALA:HB2	1:A:261:GLY:H	6	0.29
(1,3210)	1:A:242:ALA:HB1	1:A:291:VAL:HB	10	0.29
(1,3180)	1:A:242:ALA:H	1:A:263:ILE:HD13	13	0.29
(1,3133)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:293:ILE:H	13	0.29
(1,3060)	1:A:238:VAL:HB	1:A:269:MET:HE1	13	0.29
(1,3054)	1:A:238:VAL:HA	1:A:269:MET:HE1	3	0.29
(1,3048)	1:A:238:VAL:H	1:A:269:MET:HE1	3	0.29
(1,3001)	1:A:220:SER:HA	1:A:221:GLY:H	7	0.29
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD11	18	0.29
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD12	18	0.29
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD13	18	0.29
(1,2621)	1:A:162:SER:HG	1:A:172:MET:HE3	13	0.29
(1,2618)	1:A:162:SER:HB2	1:A:172:MET:HE3	6	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2546)	1:A:160:TRP:HB2	1:A:172:MET:HE2	3	0.29
(1,2364)	1:A:152:ILE:HA	1:A:163:ALA:HB2	10	0.29
(1,201)	1:A:16:MET:HE1	1:A:37:LEU:HD23	4	0.29
(1,1892)	1:A:132:TYR:HD1	1:A:177:TYR:HA	9	0.29
(1,187)	1:A:16:MET:H	1:A:16:MET:HE3	11	0.29
(1,1608)	1:A:120:THR:H	1:A:120:THR:HB	18	0.29
(1,1260)	1:A:80:HIS:HD1	1:A:83:ALA:HB2	1	0.29
(1,1243)	1:A:80:HIS:H	1:A:83:ALA:HB1	2	0.29
(1,1201)	1:A:78:PHE:HA	1:A:83:ALA:HB1	4	0.29
(1,1050)	1:A:66:LEU:H	1:A:66:LEU:HD23	15	0.29
(1,1036)	1:A:65:SER:HA	1:A:66:LEU:HD23	17	0.29
(1,1014)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HD11	4	0.29
(1,1014)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HD12	4	0.29
(1,1014)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HD13	4	0.29
(1,77)	1:A:10:ASP:HA	1:A:14:TRP:HE1	12	0.28
(1,563)	1:A:36:PHE:HA	1:A:102:ALA:HB2	14	0.28
(1,515)	1:A:34:GLY:HA2	1:A:96:THR:HG22	2	0.28
(1,3675)	1:A:269:MET:HE2	1:A:275:TRP:HE3	19	0.28
(1,3587)	1:A:264:VAL:HG13	1:A:279:VAL:HG23	2	0.28
(1,3497)	1:A:258:LEU:HD23	1:A:264:VAL:HG22	16	0.28
(1,3440)	1:A:257:ALA:HB1	1:A:282:ARG:HH22	16	0.28
(1,3331)	1:A:250:ALA:H	1:A:251:TYR:H	12	0.28
(1,3328)	1:A:249:CYS:HG	1:A:251:TYR:HE1	1	0.28
(1,3284)	1:A:246:ARG:HE	1:A:255:ALA:HB1	11	0.28
(1,2621)	1:A:162:SER:HG	1:A:172:MET:HE3	9	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD11	5	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD12	5	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD13	5	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD21	5	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD22	5	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD23	5	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD11	5	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD12	5	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD13	5	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD21	5	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD22	5	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD23	5	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD11	5	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD12	5	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD13	5	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD21	5	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD22	5	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD23	5	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD11	5	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD12	5	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD13	5	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD21	5	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD22	5	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD23	5	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD11	5	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD12	5	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD13	5	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD21	5	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD22	5	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD23	5	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD11	5	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD12	5	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD13	5	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD21	5	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD22	5	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD23	5	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD11	11	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD12	11	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD13	11	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD21	11	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD22	11	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD23	11	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD11	11	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD12	11	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD13	11	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD21	11	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD22	11	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD23	11	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD11	11	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD12	11	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD13	11	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD21	11	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD22	11	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD23	11	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD11	11	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD12	11	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD13	11	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD21	11	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD22	11	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD23	11	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD11	11	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD12	11	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD13	11	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD21	11	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD22	11	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD23	11	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD11	11	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD12	11	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD13	11	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD21	11	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD22	11	0.28
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD23	11	0.28
(1,205)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HB1	17	0.28
(1,2037)	1:A:137:ASN:HA	1:A:143:PRO:HG2	9	0.28
(1,1638)	1:A:125:LEU:HA	1:A:152:ILE:HB	13	0.28
(1,1618)	1:A:122:GLU:H	1:A:122:GLU:HB2	19	0.28
(1,1617)	1:A:121:ALA:H	1:A:122:GLU:HB2	9	0.28
(1,1617)	1:A:121:ALA:H	1:A:122:GLU:HB3	9	0.28
(1,1605)	1:A:115:ALA:H	1:A:115:ALA:HB1	10	0.28
(1,1604)	1:A:114:SER:HG	1:A:115:ALA:H	13	0.28
(1,155)	1:A:15:TYR:HA	1:A:16:MET:HE3	15	0.28
(1,1243)	1:A:80:HIS:H	1:A:83:ALA:HB1	13	0.28
(1,114)	1:A:13:ALA:HB1	1:A:14:TRP:HA	1	0.28
(1,1050)	1:A:66:LEU:H	1:A:66:LEU:HD23	1	0.28
(1,90)	1:A:11:ARG:HA	1:A:14:TRP:HE3	12	0.27
(1,806)	1:A:50:LEU:HG	1:A:63:ILE:HD12	15	0.27
(1,806)	1:A:50:LEU:HG	1:A:63:ILE:HD12	17	0.27
(1,404)	1:A:28:LEU:H	1:A:28:LEU:HD21	15	0.27
(1,3552)	1:A:263:ILE:HD11	1:A:294:PHE:HE2	11	0.27
(1,3493)	1:A:258:LEU:HD22	1:A:279:VAL:HB	16	0.27
(1,3488)	1:A:258:LEU:HD21	1:A:279:VAL:HB	11	0.27
(1,3360)	1:A:254:THR:H	1:A:255:ALA:HB2	3	0.27
(1,3351)	1:A:252:ASP:HA	1:A:255:ALA:HB2	14	0.27
(1,3308)	1:A:247:VAL:HA	1:A:257:ALA:HB2	10	0.27
(1,3180)	1:A:242:ALA:H	1:A:263:ILE:HD13	2	0.27
(1,3003)	1:A:222:SER:H	1:A:222:SER:HB2	16	0.27
(1,2998)	1:A:213:THR:H	1:A:214:THR:HB	13	0.27
(1,2983)	1:A:198:TYR:H	1:A:198:TYR:HB2	18	0.27
(1,2546)	1:A:160:TRP:HB2	1:A:172:MET:HE2	5	0.27
(1,2521)	1:A:160:TRP:H	1:A:172:MET:HE1	3	0.27
(1,2214)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:173:ILE:HD11	5	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2214)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:173:ILE:HD12	5	0.27
(1,2214)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:173:ILE:HD13	5	0.27
(1,214)	1:A:16:MET:HE3	1:A:38:VAL:H	19	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD11	3	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD12	3	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD13	3	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD21	3	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD22	3	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD23	3	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD11	3	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD12	3	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD13	3	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD21	3	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD22	3	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD23	3	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD11	3	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD12	3	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD13	3	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD21	3	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD22	3	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD23	3	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD11	3	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD12	3	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD13	3	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD21	3	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD22	3	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD23	3	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD11	3	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD12	3	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD13	3	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD21	3	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD22	3	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD23	3	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD11	3	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD12	3	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD13	3	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD21	3	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD22	3	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD23	3	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD11	6	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD12	6	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD13	6	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD21	6	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD22	6	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD23	6	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD11	6	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD12	6	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD13	6	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD21	6	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD22	6	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD23	6	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD11	6	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD12	6	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD13	6	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD21	6	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD22	6	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD23	6	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD11	6	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD12	6	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD13	6	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD21	6	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD22	6	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD23	6	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD11	6	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD12	6	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD13	6	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD21	6	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD22	6	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD23	6	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD11	6	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD12	6	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD13	6	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD21	6	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD22	6	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD23	6	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD11	7	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD12	7	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD13	7	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD21	7	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD22	7	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD23	7	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD11	7	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD12	7	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD13	7	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD21	7	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD22	7	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD23	7	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD11	7	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD12	7	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD13	7	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD21	7	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD22	7	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD23	7	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD11	7	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD12	7	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD13	7	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD21	7	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD22	7	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD23	7	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD11	7	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD12	7	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD13	7	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD21	7	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD22	7	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD23	7	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD11	7	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD12	7	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD13	7	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD21	7	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD22	7	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD23	7	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD11	13	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD12	13	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD13	13	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD21	13	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD22	13	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD23	13	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD11	13	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD12	13	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD13	13	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD21	13	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD22	13	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD23	13	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD11	13	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD12	13	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD13	13	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD21	13	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD22	13	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD23	13	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD11	13	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD12	13	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD13	13	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD21	13	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD22	13	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD23	13	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD11	13	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD12	13	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD13	13	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD21	13	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD22	13	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD23	13	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD11	13	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD12	13	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD13	13	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD21	13	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD22	13	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD23	13	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD11	14	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD12	14	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD13	14	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD21	14	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD22	14	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD23	14	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD11	14	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD12	14	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD13	14	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD21	14	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD22	14	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD23	14	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD11	14	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD12	14	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD13	14	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD21	14	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD22	14	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD23	14	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD11	14	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD12	14	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD13	14	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD21	14	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD22	14	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD23	14	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD11	14	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD12	14	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD13	14	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD21	14	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD22	14	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD23	14	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD11	14	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD12	14	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD13	14	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD21	14	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD22	14	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD23	14	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD11	17	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD12	17	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD13	17	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD21	17	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD22	17	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD23	17	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD11	17	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD12	17	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD13	17	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD21	17	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD22	17	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD23	17	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD11	17	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD12	17	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD13	17	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD21	17	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD22	17	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD23	17	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD11	17	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD12	17	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD13	17	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD21	17	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD22	17	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD23	17	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD11	17	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD12	17	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD13	17	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD21	17	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD22	17	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD23	17	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD11	17	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD12	17	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD13	17	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD21	17	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD22	17	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD23	17	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD11	20	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD12	20	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD13	20	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD21	20	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD22	20	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD23	20	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD11	20	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD12	20	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD13	20	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD21	20	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD22	20	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD23	20	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD11	20	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD12	20	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD13	20	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD21	20	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD22	20	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD23	20	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD11	20	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD12	20	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD13	20	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD21	20	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD22	20	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD23	20	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD11	20	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD12	20	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD13	20	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD21	20	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD22	20	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD23	20	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD11	20	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD12	20	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD13	20	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD21	20	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD22	20	0.27
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD23	20	0.27
(1,1877)	1:A:132:TYR:HA	1:A:132:TYR:HD1	18	0.27
(1,1620)	1:A:122:GLU:HA	1:A:123:ASP:H	2	0.27
(1,1617)	1:A:121:ALA:H	1:A:122:GLU:HB2	10	0.27
(1,1617)	1:A:121:ALA:H	1:A:122:GLU:HB3	10	0.27
(1,155)	1:A:15:TYR:HA	1:A:16:MET:HE3	4	0.27
(1,1446)	1:A:92:TYR:H	1:A:97:THR:HG21	10	0.27
(1,1224)	1:A:78:PHE:HE2	1:A:84:LEU:HD11	8	0.27
(1,1224)	1:A:78:PHE:HE2	1:A:84:LEU:HD12	8	0.27
(1,1224)	1:A:78:PHE:HE2	1:A:84:LEU:HD13	8	0.27
(1,1224)	1:A:78:PHE:HE2	1:A:84:LEU:HD21	8	0.27
(1,1224)	1:A:78:PHE:HE2	1:A:84:LEU:HD22	8	0.27
(1,1224)	1:A:78:PHE:HE2	1:A:84:LEU:HD23	8	0.27
(1,1201)	1:A:78:PHE:HA	1:A:83:ALA:HB1	9	0.27
(1,114)	1:A:13:ALA:HB1	1:A:14:TRP:HA	3	0.27
(1,114)	1:A:13:ALA:HB1	1:A:14:TRP:HA	8	0.27
(1,1085)	1:A:67:PRO:HA	1:A:69:ARG:HE	10	0.27
(1,1050)	1:A:66:LEU:H	1:A:66:LEU:HD23	8	0.27
(1,806)	1:A:50:LEU:HG	1:A:63:ILE:HD12	14	0.26
(1,806)	1:A:50:LEU:HG	1:A:63:ILE:HD12	16	0.26
(1,806)	1:A:50:LEU:HG	1:A:63:ILE:HD12	18	0.26
(1,758)	1:A:49:VAL:H	1:A:63:ILE:HD13	6	0.26
(1,563)	1:A:36:PHE:HA	1:A:102:ALA:HB2	5	0.26
(1,510)	1:A:34:GLY:H	1:A:96:THR:HG23	17	0.26
(1,404)	1:A:28:LEU:H	1:A:28:LEU:HD21	1	0.26
(1,3496)	1:A:258:LEU:HD23	1:A:264:VAL:HA	20	0.26
(1,3429)	1:A:257:ALA:H	1:A:258:LEU:HD22	10	0.26
(1,3351)	1:A:252:ASP:HA	1:A:255:ALA:HB2	8	0.26
(1,2465)	1:A:156:PRO:HD2	1:A:172:MET:HE3	8	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD11	2	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD12	2	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD13	2	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD21	2	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD22	2	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD23	2	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD11	2	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD12	2	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD13	2	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD21	2	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD22	2	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD23	2	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD11	2	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD12	2	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD13	2	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD21	2	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD22	2	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD23	2	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD11	2	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD12	2	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD13	2	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD21	2	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD22	2	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD23	2	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD11	2	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD12	2	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD13	2	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD21	2	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD22	2	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD23	2	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD11	2	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD12	2	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD13	2	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD21	2	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD22	2	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD23	2	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD11	4	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD12	4	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD13	4	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD21	4	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD22	4	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD23	4	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD11	4	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD12	4	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD13	4	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD21	4	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD22	4	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD23	4	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD11	4	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD12	4	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD13	4	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD21	4	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD22	4	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD23	4	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD11	4	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD12	4	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD13	4	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD21	4	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD22	4	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD23	4	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD11	4	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD12	4	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD13	4	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD21	4	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD22	4	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD23	4	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD11	4	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD12	4	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD13	4	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD21	4	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD22	4	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD23	4	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD11	8	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD12	8	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD13	8	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD21	8	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD22	8	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD23	8	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD11	8	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD12	8	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD13	8	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD21	8	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD22	8	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD23	8	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD11	8	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD12	8	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD13	8	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD21	8	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD22	8	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD23	8	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD11	8	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD12	8	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD13	8	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD21	8	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD22	8	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD23	8	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD11	8	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD12	8	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD13	8	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD21	8	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD22	8	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD23	8	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD11	8	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD12	8	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD13	8	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD21	8	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD22	8	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD23	8	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD11	15	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD12	15	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD13	15	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD21	15	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD22	15	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD23	15	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD11	15	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD12	15	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD13	15	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD21	15	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD22	15	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD23	15	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD11	15	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD12	15	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD13	15	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD21	15	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD22	15	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD23	15	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD11	15	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD12	15	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD13	15	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD21	15	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD22	15	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD23	15	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD11	15	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD12	15	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD13	15	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD21	15	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD22	15	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD23	15	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD11	15	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD12	15	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD13	15	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD21	15	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD22	15	0.26
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD23	15	0.26
(1,203)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:H	6	0.26
(1,2002)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:174:PRO:HD2	18	0.26
(1,1892)	1:A:132:TYR:HD1	1:A:177:TYR:HA	8	0.26
(1,1641)	1:A:125:LEU:HB2	1:A:152:ILE:HB	9	0.26
(1,1620)	1:A:122:GLU:HA	1:A:123:ASP:H	8	0.26
(1,1606)	1:A:115:ALA:H	1:A:116:PRO:HD2	16	0.26
(1,129)	1:A:14:TRP:HA	1:A:16:MET:HE3	11	0.26
(1,1207)	1:A:78:PHE:HE1	1:A:84:LEU:HA	7	0.26
(1,114)	1:A:13:ALA:HB1	1:A:14:TRP:HA	16	0.26
(1,1050)	1:A:66:LEU:H	1:A:66:LEU:HD23	6	0.26
(1,1050)	1:A:66:LEU:H	1:A:66:LEU:HD23	12	0.26
(1,1036)	1:A:65:SER:HA	1:A:66:LEU:HD23	8	0.26
(1,1014)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HD11	15	0.26
(1,1014)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HD12	15	0.26
(1,1014)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HD13	15	0.26
(1,616)	1:A:37:LEU:HG	1:A:102:ALA:HB2	17	0.25
(1,455)	1:A:32:ARG:H	1:A:32:ARG:HE	12	0.25
(1,3862)	1:A:286:PHE:HZ	1:A:291:VAL:HG23	6	0.25
(1,3701)	1:A:271:ILE:H	1:A:272:ASN:H	3	0.25
(1,3493)	1:A:258:LEU:HD22	1:A:279:VAL:HB	7	0.25
(1,3378)	1:A:255:ALA:H	1:A:255:ALA:HB2	19	0.25
(1,3219)	1:A:242:ALA:HB2	1:A:261:GLY:H	19	0.25
(1,3054)	1:A:238:VAL:HA	1:A:269:MET:HE1	6	0.25
(1,3048)	1:A:238:VAL:H	1:A:269:MET:HE1	5	0.25
(1,2983)	1:A:198:TYR:H	1:A:198:TYR:HB2	4	0.25
(1,2522)	1:A:160:TRP:H	1:A:172:MET:HE2	8	0.25
(1,2465)	1:A:156:PRO:HD2	1:A:172:MET:HE3	12	0.25
(1,2364)	1:A:152:ILE:HA	1:A:163:ALA:HB2	5	0.25
(1,2364)	1:A:152:ILE:HA	1:A:163:ALA:HB2	8	0.25
(1,2364)	1:A:152:ILE:HA	1:A:163:ALA:HB2	12	0.25
(1,2364)	1:A:152:ILE:HA	1:A:163:ALA:HB2	18	0.25
(1,2172)	1:A:144:PHE:HA	1:A:148:GLU:HB2	9	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD11	16	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD12	16	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD13	16	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD21	16	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD22	16	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD23	16	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD11	16	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD12	16	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD13	16	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD21	16	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD22	16	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD23	16	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD11	16	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD12	16	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD13	16	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD21	16	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD22	16	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD23	16	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD11	16	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD12	16	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD13	16	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD21	16	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD22	16	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD23	16	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD11	16	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD12	16	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD13	16	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD21	16	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD22	16	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD23	16	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD11	16	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD12	16	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD13	16	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD21	16	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD22	16	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD23	16	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD11	18	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD12	18	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD13	18	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD21	18	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD22	18	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD23	18	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD11	18	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD12	18	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD13	18	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD21	18	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD22	18	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD23	18	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD11	18	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD12	18	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD13	18	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD21	18	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD22	18	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD23	18	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD11	18	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD12	18	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD13	18	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD21	18	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD22	18	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD23	18	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD11	18	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD12	18	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD13	18	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD21	18	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD22	18	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD23	18	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD11	18	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD12	18	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD13	18	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD21	18	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD22	18	0.25
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD23	18	0.25
(1,1991)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:160:TRP:HH2	11	0.25
(1,1877)	1:A:132:TYR:HA	1:A:132:TYR:HD1	12	0.25
(1,187)	1:A:16:MET:H	1:A:16:MET:HE3	17	0.25
(1,1606)	1:A:115:ALA:H	1:A:116:PRO:HD2	8	0.25
(1,114)	1:A:13:ALA:HB1	1:A:14:TRP:HA	4	0.25
(1,114)	1:A:13:ALA:HB1	1:A:14:TRP:HA	7	0.25
(1,1014)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HD11	18	0.25
(1,1014)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HD12	18	0.25
(1,1014)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HD13	18	0.25
(1,90)	1:A:11:ARG:HA	1:A:14:TRP:HE3	10	0.24
(1,563)	1:A:36:PHE:HA	1:A:102:ALA:HB2	2	0.24
(1,397)	1:A:27:ARG:HH11	1:A:37:LEU:HD23	20	0.24
(1,3675)	1:A:269:MET:HE2	1:A:275:TRP:HE3	18	0.24
(1,3488)	1:A:258:LEU:HD21	1:A:279:VAL:HB	20	0.24
(1,3474)	1:A:258:LEU:HD12	1:A:291:VAL:HG12	17	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3441)	1:A:257:ALA:HB2	1:A:258:LEU:H	10	0.24
(1,3360)	1:A:254:THR:H	1:A:255:ALA:HB2	2	0.24
(1,3321)	1:A:249:CYS:H	1:A:255:ALA:HB2	16	0.24
(1,3216)	1:A:242:ALA:HB2	1:A:258:LEU:HD23	10	0.24
(1,3072)	1:A:239:PHE:HA	1:A:239:PHE:HD1	8	0.24
(1,3002)	1:A:221:GLY:HA2	1:A:222:SER:H	14	0.24
(1,2995)	1:A:211:GLN:HB2	1:A:212:THR:HA	3	0.24
(1,2963)	1:A:187:HIS:HB2	1:A:188:GLY:HA2	15	0.24
(1,2945)	1:A:185:SER:HB2	1:A:186:PRO:HA	11	0.24
(1,2913)	1:A:182:VAL:H	1:A:182:VAL:HG11	19	0.24
(1,2679)	1:A:165:ASN:H	1:A:165:ASN:HB2	12	0.24
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD11	5	0.24
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD12	5	0.24
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD13	5	0.24
(1,2621)	1:A:162:SER:HG	1:A:172:MET:HE3	14	0.24
(1,2595)	1:A:162:SER:H	1:A:172:MET:HE3	11	0.24
(1,2545)	1:A:160:TRP:HB2	1:A:172:MET:HE1	14	0.24
(1,2508)	1:A:159:GLN:H	1:A:159:GLN:HG2	14	0.24
(1,2275)	1:A:149:ILE:HA	1:A:149:ILE:HD12	5	0.24
(1,2220)	1:A:144:PHE:HD2	1:A:150:LEU:HD11	16	0.24
(1,2220)	1:A:144:PHE:HD2	1:A:150:LEU:HD12	16	0.24
(1,2220)	1:A:144:PHE:HD2	1:A:150:LEU:HD13	16	0.24
(1,2220)	1:A:144:PHE:HD2	1:A:150:LEU:HD21	16	0.24
(1,2220)	1:A:144:PHE:HD2	1:A:150:LEU:HD22	16	0.24
(1,2220)	1:A:144:PHE:HD2	1:A:150:LEU:HD23	16	0.24
(1,203)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:H	7	0.24
(1,1940)	1:A:133:ASP:HB2	1:A:145:LYS:HA	9	0.24
(1,1867)	1:A:131:LEU:HD11	1:A:179:GLU:HG2	3	0.24
(1,1867)	1:A:131:LEU:HD12	1:A:179:GLU:HG2	3	0.24
(1,1867)	1:A:131:LEU:HD13	1:A:179:GLU:HG2	3	0.24
(1,1867)	1:A:131:LEU:HD21	1:A:179:GLU:HG2	3	0.24
(1,1867)	1:A:131:LEU:HD22	1:A:179:GLU:HG2	3	0.24
(1,1867)	1:A:131:LEU:HD23	1:A:179:GLU:HG2	3	0.24
(1,1617)	1:A:121:ALA:H	1:A:122:GLU:HB2	19	0.24
(1,1617)	1:A:121:ALA:H	1:A:122:GLU:HB3	19	0.24
(1,1608)	1:A:120:THR:H	1:A:120:THR:HB	4	0.24
(1,1424)	1:A:90:ILE:H	1:A:97:THR:HG22	19	0.24
(1,1260)	1:A:80:HIS:HD1	1:A:83:ALA:HB2	20	0.24
(1,1243)	1:A:80:HIS:H	1:A:83:ALA:HB1	6	0.24
(1,1234)	1:A:79:ASP:H	1:A:83:ALA:HB1	11	0.24
(1,1013)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HB	8	0.24
(1,806)	1:A:50:LEU:HG	1:A:63:ILE:HD12	4	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,758)	1:A:49:VAL:H	1:A:63:ILE:HD13	14	0.23
(1,521)	1:A:34:GLY:HA2	1:A:99:ILE:HD13	20	0.23
(1,404)	1:A:28:LEU:H	1:A:28:LEU:HD21	17	0.23
(1,3494)	1:A:258:LEU:HD22	1:A:279:VAL:HG11	3	0.23
(1,3488)	1:A:258:LEU:HD21	1:A:279:VAL:HB	5	0.23
(1,3441)	1:A:257:ALA:HB2	1:A:258:LEU:H	19	0.23
(1,3429)	1:A:257:ALA:H	1:A:258:LEU:HD22	8	0.23
(1,3414)	1:A:256:LEU:HD11	1:A:279:VAL:HB	12	0.23
(1,3414)	1:A:256:LEU:HD12	1:A:279:VAL:HB	12	0.23
(1,3414)	1:A:256:LEU:HD13	1:A:279:VAL:HB	12	0.23
(1,3414)	1:A:256:LEU:HD21	1:A:279:VAL:HB	12	0.23
(1,3414)	1:A:256:LEU:HD22	1:A:279:VAL:HB	12	0.23
(1,3414)	1:A:256:LEU:HD23	1:A:279:VAL:HB	12	0.23
(1,3360)	1:A:254:THR:H	1:A:255:ALA:HB2	15	0.23
(1,3308)	1:A:247:VAL:HA	1:A:257:ALA:HB2	5	0.23
(1,3085)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:263:ILE:HD12	2	0.23
(1,3058)	1:A:238:VAL:HB	1:A:266:VAL:HG12	19	0.23
(1,3000)	1:A:217:PRO:HA	1:A:218:ALA:H	16	0.23
(1,2995)	1:A:211:GLN:HB2	1:A:212:THR:HA	5	0.23
(1,2995)	1:A:211:GLN:HB2	1:A:212:THR:HA	18	0.23
(1,2989)	1:A:204:ALA:H	1:A:204:ALA:HB1	2	0.23
(1,2986)	1:A:199:GLY:H	1:A:200:ILE:H	8	0.23
(1,2679)	1:A:165:ASN:H	1:A:165:ASN:HB2	9	0.23
(1,2646)	1:A:163:ALA:HB3	1:A:164:ARG:HA	17	0.23
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD11	6	0.23
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD12	6	0.23
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD13	6	0.23
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD11	8	0.23
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD12	8	0.23
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD13	8	0.23
(1,2521)	1:A:160:TRP:H	1:A:172:MET:HE1	4	0.23
(1,2364)	1:A:152:ILE:HA	1:A:163:ALA:HB2	17	0.23
(1,2286)	1:A:149:ILE:HD12	1:A:150:LEU:H	14	0.23
(1,2275)	1:A:149:ILE:HA	1:A:149:ILE:HD12	6	0.23
(1,205)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HB1	19	0.23
(1,1664)	1:A:127:TYR:HA	1:A:150:LEU:H	10	0.23
(1,1598)	1:A:112:SER:HA	1:A:113:VAL:H	2	0.23
(1,1596)	1:A:112:SER:H	1:A:112:SER:HB2	2	0.23
(1,1596)	1:A:112:SER:H	1:A:112:SER:HB2	8	0.23
(1,1596)	1:A:112:SER:H	1:A:112:SER:HB2	19	0.23
(1,114)	1:A:13:ALA:HB1	1:A:14:TRP:HA	5	0.23
(1,1050)	1:A:66:LEU:H	1:A:66:LEU:HD23	17	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1013)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HB	7	0.23
(1,806)	1:A:50:LEU:HG	1:A:63:ILE:HD12	6	0.22
(1,806)	1:A:50:LEU:HG	1:A:63:ILE:HD12	19	0.22
(1,455)	1:A:32:ARG:H	1:A:32:ARG:HE	10	0.22
(1,42)	1:A:7:ASP:H	1:A:13:ALA:HB1	5	0.22
(1,404)	1:A:28:LEU:H	1:A:28:LEU:HD21	14	0.22
(1,3675)	1:A:269:MET:HE2	1:A:275:TRP:HE3	14	0.22
(1,3441)	1:A:257:ALA:HB2	1:A:258:LEU:H	8	0.22
(1,3205)	1:A:242:ALA:HB1	1:A:258:LEU:HD23	13	0.22
(1,3166)	1:A:241:LYS:HA	1:A:263:ILE:HD13	1	0.22
(1,3148)	1:A:241:LYS:H	1:A:263:ILE:HD13	8	0.22
(1,3140)	1:A:240:ALA:HB3	1:A:264:VAL:HB	19	0.22
(1,3000)	1:A:217:PRO:HA	1:A:218:ALA:H	10	0.22
(1,2993)	1:A:210:PRO:HA	1:A:211:GLN:H	8	0.22
(1,2989)	1:A:204:ALA:H	1:A:204:ALA:HB1	16	0.22
(1,2646)	1:A:163:ALA:HB3	1:A:164:ARG:HA	2	0.22
(1,2364)	1:A:152:ILE:HA	1:A:163:ALA:HB2	3	0.22
(1,2316)	1:A:150:LEU:HD11	1:A:165:ASN:HA	12	0.22
(1,2316)	1:A:150:LEU:HD12	1:A:165:ASN:HA	12	0.22
(1,2316)	1:A:150:LEU:HD13	1:A:165:ASN:HA	12	0.22
(1,2316)	1:A:150:LEU:HD21	1:A:165:ASN:HA	12	0.22
(1,2316)	1:A:150:LEU:HD22	1:A:165:ASN:HA	12	0.22
(1,2316)	1:A:150:LEU:HD23	1:A:165:ASN:HA	12	0.22
(1,2002)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:174:PRO:HD2	11	0.22
(1,187)	1:A:16:MET:H	1:A:16:MET:HE3	10	0.22
(1,1626)	1:A:123:ASP:H	1:A:123:ASP:HB2	5	0.22
(1,1430)	1:A:90:ILE:HA	1:A:97:THR:HG22	10	0.22
(1,1259)	1:A:80:HIS:HD1	1:A:83:ALA:HB1	1	0.22
(1,1201)	1:A:78:PHE:HA	1:A:83:ALA:HB1	7	0.22
(1,115)	1:A:13:ALA:HB1	1:A:14:TRP:HD1	4	0.22
(1,114)	1:A:13:ALA:HB1	1:A:14:TRP:HA	9	0.22
(1,1014)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HD11	6	0.22
(1,1014)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HD12	6	0.22
(1,1014)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HD13	6	0.22
(1,510)	1:A:34:GLY:H	1:A:96:THR:HG23	12	0.21
(1,404)	1:A:28:LEU:H	1:A:28:LEU:HD21	20	0.21
(1,3882)	1:A:288:PHE:HA	1:A:290:HIS:H	6	0.21
(1,3488)	1:A:258:LEU:HD21	1:A:279:VAL:HB	1	0.21
(1,3299)	1:A:247:VAL:H	1:A:247:VAL:HG21	10	0.21
(1,3205)	1:A:242:ALA:HB1	1:A:258:LEU:HD23	11	0.21
(1,3148)	1:A:241:LYS:H	1:A:263:ILE:HD13	3	0.21
(1,3048)	1:A:238:VAL:H	1:A:269:MET:HE1	7	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3000)	1:A:217:PRO:HA	1:A:218:ALA:H	3	0.21
(1,3000)	1:A:217:PRO:HA	1:A:218:ALA:H	7	0.21
(1,3000)	1:A:217:PRO:HA	1:A:218:ALA:H	15	0.21
(1,2807)	1:A:174:PRO:HB2	1:A:177:TYR:HB2	19	0.21
(1,2807)	1:A:174:PRO:HB3	1:A:177:TYR:HB2	19	0.21
(1,2646)	1:A:163:ALA:HB3	1:A:164:ARG:HA	1	0.21
(1,2621)	1:A:162:SER:HG	1:A:172:MET:HE3	3	0.21
(1,2610)	1:A:162:SER:HA	1:A:172:MET:HE3	17	0.21
(1,2521)	1:A:160:TRP:H	1:A:172:MET:HE1	5	0.21
(1,24)	1:A:6:PHE:H	1:A:6:PHE:HD1	8	0.21
(1,24)	1:A:6:PHE:H	1:A:6:PHE:HD2	8	0.21
(1,2316)	1:A:150:LEU:HD11	1:A:165:ASN:HA	9	0.21
(1,2316)	1:A:150:LEU:HD12	1:A:165:ASN:HA	9	0.21
(1,2316)	1:A:150:LEU:HD13	1:A:165:ASN:HA	9	0.21
(1,2316)	1:A:150:LEU:HD21	1:A:165:ASN:HA	9	0.21
(1,2316)	1:A:150:LEU:HD22	1:A:165:ASN:HA	9	0.21
(1,2316)	1:A:150:LEU:HD23	1:A:165:ASN:HA	9	0.21
(1,2316)	1:A:150:LEU:HD11	1:A:165:ASN:HA	20	0.21
(1,2316)	1:A:150:LEU:HD12	1:A:165:ASN:HA	20	0.21
(1,2316)	1:A:150:LEU:HD13	1:A:165:ASN:HA	20	0.21
(1,2316)	1:A:150:LEU:HD21	1:A:165:ASN:HA	20	0.21
(1,2316)	1:A:150:LEU:HD22	1:A:165:ASN:HA	20	0.21
(1,2316)	1:A:150:LEU:HD23	1:A:165:ASN:HA	20	0.21
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD11	1	0.21
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD12	1	0.21
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD13	1	0.21
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD21	1	0.21
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD22	1	0.21
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD23	1	0.21
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD11	1	0.21
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD12	1	0.21
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD13	1	0.21
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD21	1	0.21
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD22	1	0.21
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD23	1	0.21
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD11	1	0.21
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD12	1	0.21
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD13	1	0.21
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD21	1	0.21
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD22	1	0.21
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD23	1	0.21
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD11	1	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD12	1	0.21
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD13	1	0.21
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD21	1	0.21
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD22	1	0.21
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD23	1	0.21
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD11	1	0.21
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD12	1	0.21
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD13	1	0.21
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD21	1	0.21
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD22	1	0.21
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD23	1	0.21
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD11	1	0.21
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD12	1	0.21
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD13	1	0.21
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD21	1	0.21
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD22	1	0.21
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD23	1	0.21
(1,190)	1:A:16:MET:H	1:A:19:VAL:HB	9	0.21
(1,1877)	1:A:132:TYR:HA	1:A:132:TYR:HD1	11	0.21
(1,1867)	1:A:131:LEU:HD11	1:A:179:GLU:HG2	11	0.21
(1,1867)	1:A:131:LEU:HD12	1:A:179:GLU:HG2	11	0.21
(1,1867)	1:A:131:LEU:HD13	1:A:179:GLU:HG2	11	0.21
(1,1867)	1:A:131:LEU:HD21	1:A:179:GLU:HG2	11	0.21
(1,1867)	1:A:131:LEU:HD22	1:A:179:GLU:HG2	11	0.21
(1,1867)	1:A:131:LEU:HD23	1:A:179:GLU:HG2	11	0.21
(1,1760)	1:A:129:ARG:HA	1:A:149:ILE:HD12	12	0.21
(1,1625)	1:A:122:GLU:HB2	1:A:123:ASP:HA	17	0.21
(1,1620)	1:A:122:GLU:HA	1:A:123:ASP:H	7	0.21
(1,1606)	1:A:115:ALA:H	1:A:116:PRO:HD2	3	0.21
(1,1605)	1:A:115:ALA:H	1:A:115:ALA:HB1	11	0.21
(1,155)	1:A:15:TYR:HA	1:A:16:MET:HE3	6	0.21
(1,1259)	1:A:80:HIS:HD1	1:A:83:ALA:HB1	20	0.21
(1,994)	1:A:63:ILE:HB	1:A:63:ILE:HD13	13	0.2
(1,806)	1:A:50:LEU:HG	1:A:63:ILE:HD12	20	0.2
(1,616)	1:A:37:LEU:HG	1:A:102:ALA:HB2	7	0.2
(1,616)	1:A:37:LEU:HG	1:A:102:ALA:HB2	14	0.2
(1,563)	1:A:36:PHE:HA	1:A:102:ALA:HB2	13	0.2
(1,563)	1:A:36:PHE:HA	1:A:102:ALA:HB2	15	0.2
(1,404)	1:A:28:LEU:H	1:A:28:LEU:HD21	18	0.2
(1,3582)	1:A:264:VAL:HG12	1:A:286:PHE:HE2	17	0.2
(1,3441)	1:A:257:ALA:HB2	1:A:258:LEU:H	15	0.2
(1,3360)	1:A:254:THR:H	1:A:255:ALA:HB2	11	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3360)	1:A:254:THR:H	1:A:255:ALA:HB2	19	0.2
(1,31)	1:A:6:PHE:HE1	1:A:100:GLU:HA	9	0.2
(1,31)	1:A:6:PHE:HE2	1:A:100:GLU:HA	9	0.2
(1,3098)	1:A:240:ALA:H	1:A:264:VAL:HG22	6	0.2
(1,3072)	1:A:239:PHE:HA	1:A:239:PHE:HD1	5	0.2
(1,3072)	1:A:239:PHE:HA	1:A:239:PHE:HD1	10	0.2
(1,3030)	1:A:233:THR:HG1	1:A:235:ASN:HD22	15	0.2
(1,3005)	1:A:225:ALA:H	1:A:225:ALA:HB1	4	0.2
(1,3000)	1:A:217:PRO:HA	1:A:218:ALA:H	6	0.2
(1,3000)	1:A:217:PRO:HA	1:A:218:ALA:H	8	0.2
(1,2989)	1:A:204:ALA:H	1:A:204:ALA:HB1	9	0.2
(1,2646)	1:A:163:ALA:HB3	1:A:164:ARG:HA	3	0.2
(1,2646)	1:A:163:ALA:HB3	1:A:164:ARG:HA	13	0.2
(1,2610)	1:A:162:SER:HA	1:A:172:MET:HE3	6	0.2
(1,2521)	1:A:160:TRP:H	1:A:172:MET:HE1	10	0.2
(1,2521)	1:A:160:TRP:H	1:A:172:MET:HE1	17	0.2
(1,2364)	1:A:152:ILE:HA	1:A:163:ALA:HB2	1	0.2
(1,2364)	1:A:152:ILE:HA	1:A:163:ALA:HB2	16	0.2
(1,2286)	1:A:149:ILE:HD12	1:A:150:LEU:H	17	0.2
(1,2232)	1:A:145:LYS:H	1:A:148:GLU:HA	9	0.2
(1,1892)	1:A:132:TYR:HD1	1:A:177:TYR:HA	12	0.2
(1,1877)	1:A:132:TYR:HA	1:A:132:TYR:HD1	9	0.2
(1,1680)	1:A:127:TYR:HB2	1:A:182:VAL:H	14	0.2
(1,1617)	1:A:121:ALA:H	1:A:122:GLU:HB2	7	0.2
(1,1617)	1:A:121:ALA:H	1:A:122:GLU:HB3	7	0.2
(1,155)	1:A:15:TYR:HA	1:A:16:MET:HE3	7	0.2
(1,155)	1:A:15:TYR:HA	1:A:16:MET:HE3	14	0.2
(1,1420)	1:A:90:ILE:H	1:A:90:ILE:HD12	17	0.2
(1,1243)	1:A:80:HIS:H	1:A:83:ALA:HB1	1	0.2
(1,1204)	1:A:78:PHE:HD1	1:A:84:LEU:HA	7	0.2
(1,1050)	1:A:66:LEU:H	1:A:66:LEU:HD23	9	0.2
(1,1018)	1:A:64:ASN:H	1:A:64:ASN:HD21	14	0.2
(1,994)	1:A:63:ILE:HB	1:A:63:ILE:HD13	5	0.19
(1,563)	1:A:36:PHE:HA	1:A:102:ALA:HB2	8	0.19
(1,456)	1:A:32:ARG:H	1:A:33:HIS:H	16	0.19
(1,3876)	1:A:287:PRO:HA	1:A:290:HIS:H	6	0.19
(1,3360)	1:A:254:THR:H	1:A:255:ALA:HB2	4	0.19
(1,3360)	1:A:254:THR:H	1:A:255:ALA:HB2	13	0.19
(1,3219)	1:A:242:ALA:HB2	1:A:261:GLY:H	8	0.19
(1,3136)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:294:PHE:H	19	0.19
(1,3134)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:293:ILE:HA	5	0.19
(1,3072)	1:A:239:PHE:HA	1:A:239:PHE:HD1	16	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3060)	1:A:238:VAL:HB	1:A:269:MET:HE1	7	0.19
(1,3060)	1:A:238:VAL:HB	1:A:269:MET:HE1	9	0.19
(1,3034)	1:A:235:ASN:HA	1:A:235:ASN:HD21	14	0.19
(1,3001)	1:A:220:SER:HA	1:A:221:GLY:H	9	0.19
(1,2886)	1:A:178:VAL:HG13	1:A:178:VAL:HG21	20	0.19
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD11	17	0.19
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD12	17	0.19
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD13	17	0.19
(1,2621)	1:A:162:SER:HG	1:A:172:MET:HE3	4	0.19
(1,2621)	1:A:162:SER:HG	1:A:172:MET:HE3	5	0.19
(1,2609)	1:A:162:SER:HA	1:A:172:MET:HE2	11	0.19
(1,2497)	1:A:158:GLU:H	1:A:158:GLU:HB2	20	0.19
(1,2465)	1:A:156:PRO:HD2	1:A:172:MET:HE3	19	0.19
(1,2462)	1:A:156:PRO:HD2	1:A:172:MET:HG2	9	0.19
(1,2286)	1:A:149:ILE:HD12	1:A:150:LEU:H	20	0.19
(1,2070)	1:A:140:GLU:H	1:A:142:LEU:HA	12	0.19
(1,203)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:H	4	0.19
(1,1941)	1:A:133:ASP:HB2	1:A:145:LYS:HB2	12	0.19
(1,1892)	1:A:132:TYR:HD1	1:A:177:TYR:HA	15	0.19
(1,1892)	1:A:132:TYR:HD1	1:A:177:TYR:HA	20	0.19
(1,1877)	1:A:132:TYR:HA	1:A:132:TYR:HD1	14	0.19
(1,1467)	1:A:92:TYR:HE2	1:A:97:THR:H	12	0.19
(1,806)	1:A:50:LEU:HG	1:A:63:ILE:HD12	2	0.18
(1,758)	1:A:49:VAL:H	1:A:63:ILE:HD13	19	0.18
(1,72)	1:A:10:ASP:H	1:A:14:TRP:HZ2	10	0.18
(1,616)	1:A:37:LEU:HG	1:A:102:ALA:HB2	4	0.18
(1,563)	1:A:36:PHE:HA	1:A:102:ALA:HB2	17	0.18
(1,521)	1:A:34:GLY:HA2	1:A:99:ILE:HD13	1	0.18
(1,42)	1:A:7:ASP:H	1:A:13:ALA:HB1	8	0.18
(1,404)	1:A:28:LEU:H	1:A:28:LEU:HD21	3	0.18
(1,3678)	1:A:269:MET:HE3	1:A:275:TRP:HZ2	9	0.18
(1,3441)	1:A:257:ALA:HB2	1:A:258:LEU:H	7	0.18
(1,3321)	1:A:249:CYS:H	1:A:255:ALA:HB2	1	0.18
(1,3291)	1:A:246:ARG:HH12	1:A:290:HIS:HE1	9	0.18
(1,3210)	1:A:242:ALA:HB1	1:A:291:VAL:HB	12	0.18
(1,3205)	1:A:242:ALA:HB1	1:A:258:LEU:HD23	14	0.18
(1,3137)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:294:PHE:HD1	11	0.18
(1,3060)	1:A:238:VAL:HB	1:A:269:MET:HE1	5	0.18
(1,3048)	1:A:238:VAL:H	1:A:269:MET:HE1	11	0.18
(1,2989)	1:A:204:ALA:H	1:A:204:ALA:HB1	8	0.18
(1,2989)	1:A:204:ALA:H	1:A:204:ALA:HB1	12	0.18
(1,2886)	1:A:178:VAL:HG13	1:A:178:VAL:HG21	13	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2788)	1:A:173:ILE:HD11	1:A:178:VAL:HG12	6	0.18
(1,2788)	1:A:173:ILE:HD12	1:A:178:VAL:HG12	6	0.18
(1,2788)	1:A:173:ILE:HD13	1:A:178:VAL:HG12	6	0.18
(1,2610)	1:A:162:SER:HA	1:A:172:MET:HE3	11	0.18
(1,2581)	1:A:161:TRP:HB2	1:A:175:VAL:HG21	7	0.18
(1,2216)	1:A:144:PHE:HE2	1:A:174:PRO:HG2	5	0.18
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:143:PRO:HD2	9	0.18
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:143:PRO:HD3	9	0.18
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:143:PRO:HD2	9	0.18
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:143:PRO:HD3	9	0.18
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:143:PRO:HD2	9	0.18
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:143:PRO:HD3	9	0.18
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:143:PRO:HD2	9	0.18
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:143:PRO:HD3	9	0.18
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:143:PRO:HD2	9	0.18
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:143:PRO:HD3	9	0.18
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:143:PRO:HD2	9	0.18
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:143:PRO:HD3	9	0.18
(1,1877)	1:A:132:TYR:HA	1:A:132:TYR:HD1	8	0.18
(1,1597)	1:A:112:SER:HA	1:A:112:SER:HG	6	0.18
(1,1260)	1:A:80:HIS:HD1	1:A:83:ALA:HB2	2	0.18
(1,1201)	1:A:78:PHE:HA	1:A:83:ALA:HB1	19	0.18
(1,1014)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HD11	17	0.18
(1,1014)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HD12	17	0.18
(1,1014)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HD13	17	0.18
(1,994)	1:A:63:ILE:HB	1:A:63:ILE:HD13	4	0.17
(1,994)	1:A:63:ILE:HB	1:A:63:ILE:HD13	17	0.17
(1,806)	1:A:50:LEU:HG	1:A:63:ILE:HD12	3	0.17
(1,616)	1:A:37:LEU:HG	1:A:102:ALA:HB2	15	0.17
(1,510)	1:A:34:GLY:H	1:A:96:THR:HG23	11	0.17
(1,455)	1:A:32:ARG:H	1:A:32:ARG:HE	9	0.17
(1,422)	1:A:28:LEU:HG	1:A:102:ALA:HB2	11	0.17
(1,3496)	1:A:258:LEU:HD23	1:A:264:VAL:HA	1	0.17
(1,3441)	1:A:257:ALA:HB2	1:A:258:LEU:H	18	0.17
(1,3360)	1:A:254:THR:H	1:A:255:ALA:HB2	6	0.17
(1,3199)	1:A:242:ALA:HB1	1:A:244:GLN:H	5	0.17
(1,3000)	1:A:217:PRO:HA	1:A:218:ALA:H	9	0.17
(1,2995)	1:A:211:GLN:HB2	1:A:212:THR:HA	13	0.17
(1,2986)	1:A:199:GLY:H	1:A:200:ILE:H	19	0.17
(1,2971)	1:A:189:LYS:H	1:A:190:HIS:H	4	0.17
(1,2919)	1:A:182:VAL:HB	1:A:183:ARG:H	11	0.17
(1,2646)	1:A:163:ALA:HB3	1:A:164:ARG:HA	5	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2646)	1:A:163:ALA:HB3	1:A:164:ARG:HA	20	0.17
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD11	2	0.17
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD12	2	0.17
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD13	2	0.17
(1,2521)	1:A:160:TRP:H	1:A:172:MET:HE1	18	0.17
(1,2465)	1:A:156:PRO:HD2	1:A:172:MET:HE3	15	0.17
(1,2316)	1:A:150:LEU:HD11	1:A:165:ASN:HA	16	0.17
(1,2316)	1:A:150:LEU:HD12	1:A:165:ASN:HA	16	0.17
(1,2316)	1:A:150:LEU:HD13	1:A:165:ASN:HA	16	0.17
(1,2316)	1:A:150:LEU:HD21	1:A:165:ASN:HA	16	0.17
(1,2316)	1:A:150:LEU:HD22	1:A:165:ASN:HA	16	0.17
(1,2316)	1:A:150:LEU:HD23	1:A:165:ASN:HA	16	0.17
(1,2142)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:143:PRO:HD2	9	0.17
(1,2142)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:143:PRO:HD2	9	0.17
(1,2142)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:143:PRO:HD2	9	0.17
(1,2142)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:143:PRO:HD2	9	0.17
(1,2142)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:143:PRO:HD2	9	0.17
(1,2142)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:143:PRO:HD2	9	0.17
(1,1991)	1:A:134:PHE:HE2	1:A:160:TRP:HH2	4	0.17
(1,1620)	1:A:122:GLU:HA	1:A:123:ASP:H	15	0.17
(1,1234)	1:A:79:ASP:H	1:A:83:ALA:HB1	14	0.17
(1,1234)	1:A:79:ASP:H	1:A:83:ALA:HB1	19	0.17
(1,1014)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HD11	19	0.17
(1,1014)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HD12	19	0.17
(1,1014)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HD13	19	0.17
(1,994)	1:A:63:ILE:HB	1:A:63:ILE:HD13	6	0.16
(1,994)	1:A:63:ILE:HB	1:A:63:ILE:HD13	16	0.16
(1,95)	1:A:11:ARG:HA	1:A:15:TYR:H	12	0.16
(1,806)	1:A:50:LEU:HG	1:A:63:ILE:HD12	1	0.16
(1,616)	1:A:37:LEU:HG	1:A:102:ALA:HB2	6	0.16
(1,563)	1:A:36:PHE:HA	1:A:102:ALA:HB2	6	0.16
(1,563)	1:A:36:PHE:HA	1:A:102:ALA:HB2	16	0.16
(1,3675)	1:A:269:MET:HE2	1:A:275:TRP:HE3	16	0.16
(1,3552)	1:A:263:ILE:HD11	1:A:294:PHE:HE2	4	0.16
(1,3525)	1:A:260:VAL:HG23	1:A:261:GLY:H	14	0.16
(1,3490)	1:A:258:LEU:HD21	1:A:279:VAL:HG22	4	0.16
(1,3485)	1:A:258:LEU:HD21	1:A:264:VAL:HB	13	0.16
(1,3441)	1:A:257:ALA:HB2	1:A:258:LEU:H	2	0.16
(1,3441)	1:A:257:ALA:HB2	1:A:258:LEU:H	4	0.16
(1,3438)	1:A:257:ALA:HB1	1:A:282:ARG:HH11	11	0.16
(1,3351)	1:A:252:ASP:HA	1:A:255:ALA:HB2	20	0.16
(1,3137)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:294:PHE:HD1	18	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,31)	1:A:6:PHE:HE1	1:A:100:GLU:HA	12	0.16
(1,31)	1:A:6:PHE:HE2	1:A:100:GLU:HA	12	0.16
(1,3085)	1:A:239:PHE:HD1	1:A:263:ILE:HD12	1	0.16
(1,3000)	1:A:217:PRO:HA	1:A:218:ALA:H	20	0.16
(1,2940)	1:A:185:SER:H	1:A:187:HIS:HE1	12	0.16
(1,2832)	1:A:175:VAL:HA	1:A:178:VAL:HG11	6	0.16
(1,2788)	1:A:173:ILE:HD11	1:A:178:VAL:HG12	12	0.16
(1,2788)	1:A:173:ILE:HD12	1:A:178:VAL:HG12	12	0.16
(1,2788)	1:A:173:ILE:HD13	1:A:178:VAL:HG12	12	0.16
(1,2758)	1:A:172:MET:HA	1:A:172:MET:HE2	19	0.16
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD11	3	0.16
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD12	3	0.16
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD13	3	0.16
(1,2465)	1:A:156:PRO:HD2	1:A:172:MET:HE3	7	0.16
(1,2435)	1:A:155:LYS:HG2	1:A:155:LYS:HE2	3	0.16
(1,2428)	1:A:155:LYS:HB2	1:A:155:LYS:HD2	12	0.16
(1,24)	1:A:6:PHE:H	1:A:6:PHE:HD1	17	0.16
(1,24)	1:A:6:PHE:H	1:A:6:PHE:HD2	17	0.16
(1,2316)	1:A:150:LEU:HD11	1:A:165:ASN:HA	1	0.16
(1,2316)	1:A:150:LEU:HD12	1:A:165:ASN:HA	1	0.16
(1,2316)	1:A:150:LEU:HD13	1:A:165:ASN:HA	1	0.16
(1,2316)	1:A:150:LEU:HD21	1:A:165:ASN:HA	1	0.16
(1,2316)	1:A:150:LEU:HD22	1:A:165:ASN:HA	1	0.16
(1,2316)	1:A:150:LEU:HD23	1:A:165:ASN:HA	1	0.16
(1,2316)	1:A:150:LEU:HD11	1:A:165:ASN:HA	6	0.16
(1,2316)	1:A:150:LEU:HD12	1:A:165:ASN:HA	6	0.16
(1,2316)	1:A:150:LEU:HD13	1:A:165:ASN:HA	6	0.16
(1,2316)	1:A:150:LEU:HD21	1:A:165:ASN:HA	6	0.16
(1,2316)	1:A:150:LEU:HD22	1:A:165:ASN:HA	6	0.16
(1,2316)	1:A:150:LEU:HD23	1:A:165:ASN:HA	6	0.16
(1,214)	1:A:16:MET:HE3	1:A:38:VAL:H	13	0.16
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD11	10	0.16
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD12	10	0.16
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD13	10	0.16
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD21	10	0.16
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD22	10	0.16
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HD23	10	0.16
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD11	10	0.16
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD12	10	0.16
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD13	10	0.16
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD21	10	0.16
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD22	10	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HD23	10	0.16
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD11	10	0.16
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD12	10	0.16
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD13	10	0.16
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD21	10	0.16
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD22	10	0.16
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD23	10	0.16
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD11	10	0.16
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD12	10	0.16
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD13	10	0.16
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD21	10	0.16
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD22	10	0.16
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD23	10	0.16
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD11	10	0.16
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD12	10	0.16
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD13	10	0.16
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD21	10	0.16
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD22	10	0.16
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD23	10	0.16
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD11	10	0.16
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD12	10	0.16
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD13	10	0.16
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD21	10	0.16
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD22	10	0.16
(1,2134)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD23	10	0.16
(1,201)	1:A:16:MET:HE1	1:A:37:LEU:HD23	11	0.16
(1,1982)	1:A:134:PHE:HD1	1:A:177:TYR:HD2	14	0.16
(1,1368)	1:A:87:PHE:HD1	1:A:90:ILE:HD13	5	0.16
(1,1259)	1:A:80:HIS:HD1	1:A:83:ALA:HB1	15	0.16
(1,994)	1:A:63:ILE:HB	1:A:63:ILE:HD13	2	0.15
(1,994)	1:A:63:ILE:HB	1:A:63:ILE:HD13	11	0.15
(1,954)	1:A:61:TYR:HH	1:A:94:ASP:HA	9	0.15
(1,89)	1:A:11:ARG:HA	1:A:14:TRP:HD1	12	0.15
(1,404)	1:A:28:LEU:H	1:A:28:LEU:HD21	10	0.15
(1,3879)	1:A:288:PHE:H	1:A:290:HIS:H	6	0.15
(1,3552)	1:A:263:ILE:HD11	1:A:294:PHE:HE2	18	0.15
(1,3440)	1:A:257:ALA:HB1	1:A:282:ARG:HH22	2	0.15
(1,3321)	1:A:249:CYS:H	1:A:255:ALA:HB2	2	0.15
(1,331)	1:A:24:ALA:H	1:A:39:ARG:HE	12	0.15
(1,3142)	1:A:240:ALA:HB3	1:A:291:VAL:HG21	16	0.15
(1,3137)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:294:PHE:HD1	9	0.15
(1,2924)	1:A:183:ARG:HA	1:A:183:ARG:HE	15	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2758)	1:A:172:MET:HA	1:A:172:MET:HE2	20	0.15
(1,2621)	1:A:162:SER:HG	1:A:172:MET:HE3	18	0.15
(1,2546)	1:A:160:TRP:HB2	1:A:172:MET:HE2	4	0.15
(1,2545)	1:A:160:TRP:HB2	1:A:172:MET:HE1	7	0.15
(1,2465)	1:A:156:PRO:HD2	1:A:172:MET:HE3	13	0.15
(1,2142)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:143:PRO:HD2	13	0.15
(1,2142)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:143:PRO:HD2	13	0.15
(1,2142)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:143:PRO:HD2	13	0.15
(1,2142)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:143:PRO:HD2	13	0.15
(1,2142)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:143:PRO:HD2	13	0.15
(1,2142)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:143:PRO:HD2	13	0.15
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:143:PRO:HD2	13	0.15
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:143:PRO:HD3	13	0.15
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:143:PRO:HD2	13	0.15
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:143:PRO:HD3	13	0.15
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:143:PRO:HD2	13	0.15
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:143:PRO:HD3	13	0.15
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:143:PRO:HD2	13	0.15
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:143:PRO:HD3	13	0.15
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:143:PRO:HD2	13	0.15
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:143:PRO:HD3	13	0.15
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:143:PRO:HD2	13	0.15
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:143:PRO:HD3	13	0.15
(1,201)	1:A:16:MET:HE1	1:A:37:LEU:HD23	5	0.15
(1,201)	1:A:16:MET:HE1	1:A:37:LEU:HD23	19	0.15
(1,1617)	1:A:121:ALA:H	1:A:122:GLU:HB2	1	0.15
(1,1617)	1:A:121:ALA:H	1:A:122:GLU:HB3	1	0.15
(1,1429)	1:A:90:ILE:HA	1:A:97:THR:HB	12	0.15
(1,1368)	1:A:87:PHE:HD1	1:A:90:ILE:HD13	11	0.15
(1,1243)	1:A:80:HIS:H	1:A:83:ALA:HB1	3	0.15
(1,1050)	1:A:66:LEU:H	1:A:66:LEU:HD23	10	0.15
(1,994)	1:A:63:ILE:HB	1:A:63:ILE:HD13	18	0.14
(1,994)	1:A:63:ILE:HB	1:A:63:ILE:HD13	19	0.14
(1,994)	1:A:63:ILE:HB	1:A:63:ILE:HD13	20	0.14
(1,806)	1:A:50:LEU:HG	1:A:63:ILE:HD12	13	0.14
(1,758)	1:A:49:VAL:H	1:A:63:ILE:HD13	18	0.14
(1,66)	1:A:9:SER:HA	1:A:14:TRP:HZ2	12	0.14
(1,404)	1:A:28:LEU:H	1:A:28:LEU:HD21	19	0.14
(1,3679)	1:A:269:MET:HE3	1:A:275:TRP:HH2	10	0.14
(1,3584)	1:A:264:VAL:HG13	1:A:266:VAL:HA	20	0.14
(1,3429)	1:A:257:ALA:H	1:A:258:LEU:HD22	19	0.14
(1,3360)	1:A:254:THR:H	1:A:255:ALA:HB2	8	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3351)	1:A:252:ASP:HA	1:A:255:ALA:HB2	5	0.14
(1,3137)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:294:PHE:HD1	4	0.14
(1,3137)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:294:PHE:HD1	6	0.14
(1,3004)	1:A:223:PRO:HA	1:A:224:GLY:H	9	0.14
(1,2995)	1:A:211:GLN:HB2	1:A:212:THR:HA	10	0.14
(1,2922)	1:A:183:ARG:H	1:A:184:SER:H	11	0.14
(1,249)	1:A:20:SER:H	1:A:23:GLU:H	1	0.14
(1,2450)	1:A:156:PRO:HG2	1:A:157:GLU:HG2	19	0.14
(1,2275)	1:A:149:ILE:HA	1:A:149:ILE:HD12	13	0.14
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:143:PRO:HD2	5	0.14
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:143:PRO:HD3	5	0.14
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:143:PRO:HD2	5	0.14
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:143:PRO:HD3	5	0.14
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:143:PRO:HD2	5	0.14
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:143:PRO:HD3	5	0.14
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:143:PRO:HD2	5	0.14
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:143:PRO:HD3	5	0.14
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:143:PRO:HD2	5	0.14
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:143:PRO:HD3	5	0.14
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:143:PRO:HD2	5	0.14
(1,2133)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:143:PRO:HD3	5	0.14
(1,205)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:HB1	18	0.14
(1,201)	1:A:16:MET:HE1	1:A:37:LEU:HD23	2	0.14
(1,2001)	1:A:134:PHE:HD2	1:A:160:TRP:HH2	2	0.14
(1,1892)	1:A:132:TYR:HD1	1:A:177:TYR:HA	16	0.14
(1,1877)	1:A:132:TYR:HA	1:A:132:TYR:HD1	19	0.14
(1,1760)	1:A:129:ARG:HA	1:A:149:ILE:HD12	5	0.14
(1,1626)	1:A:123:ASP:H	1:A:123:ASP:HB2	18	0.14
(1,1606)	1:A:115:ALA:H	1:A:116:PRO:HD2	6	0.14
(1,1259)	1:A:80:HIS:HD1	1:A:83:ALA:HB1	6	0.14
(1,1160)	1:A:73:ILE:HB	1:A:84:LEU:HD11	8	0.14
(1,1160)	1:A:73:ILE:HB	1:A:84:LEU:HD12	8	0.14
(1,1160)	1:A:73:ILE:HB	1:A:84:LEU:HD13	8	0.14
(1,1160)	1:A:73:ILE:HB	1:A:84:LEU:HD21	8	0.14
(1,1160)	1:A:73:ILE:HB	1:A:84:LEU:HD22	8	0.14
(1,1160)	1:A:73:ILE:HB	1:A:84:LEU:HD23	8	0.14
(1,994)	1:A:63:ILE:HB	1:A:63:ILE:HD13	1	0.13
(1,911)	1:A:58:VAL:H	1:A:60:HIS:HE2	16	0.13
(1,82)	1:A:11:ARG:H	1:A:14:TRP:HE1	12	0.13
(1,757)	1:A:49:VAL:H	1:A:63:ILE:HD11	8	0.13
(1,653)	1:A:38:VAL:HG11	1:A:50:LEU:HD11	10	0.13
(1,653)	1:A:38:VAL:HG11	1:A:50:LEU:HD12	10	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,653)	1:A:38:VAL:HG11	1:A:50:LEU:HD13	10	0.13
(1,653)	1:A:38:VAL:HG11	1:A:50:LEU:HD21	10	0.13
(1,653)	1:A:38:VAL:HG11	1:A:50:LEU:HD22	10	0.13
(1,653)	1:A:38:VAL:HG11	1:A:50:LEU:HD23	10	0.13
(1,653)	1:A:38:VAL:HG12	1:A:50:LEU:HD11	10	0.13
(1,653)	1:A:38:VAL:HG12	1:A:50:LEU:HD12	10	0.13
(1,653)	1:A:38:VAL:HG12	1:A:50:LEU:HD13	10	0.13
(1,653)	1:A:38:VAL:HG12	1:A:50:LEU:HD21	10	0.13
(1,653)	1:A:38:VAL:HG12	1:A:50:LEU:HD22	10	0.13
(1,653)	1:A:38:VAL:HG12	1:A:50:LEU:HD23	10	0.13
(1,653)	1:A:38:VAL:HG13	1:A:50:LEU:HD11	10	0.13
(1,653)	1:A:38:VAL:HG13	1:A:50:LEU:HD12	10	0.13
(1,653)	1:A:38:VAL:HG13	1:A:50:LEU:HD13	10	0.13
(1,653)	1:A:38:VAL:HG13	1:A:50:LEU:HD21	10	0.13
(1,653)	1:A:38:VAL:HG13	1:A:50:LEU:HD22	10	0.13
(1,653)	1:A:38:VAL:HG13	1:A:50:LEU:HD23	10	0.13
(1,653)	1:A:38:VAL:HG21	1:A:50:LEU:HD11	10	0.13
(1,653)	1:A:38:VAL:HG21	1:A:50:LEU:HD12	10	0.13
(1,653)	1:A:38:VAL:HG21	1:A:50:LEU:HD13	10	0.13
(1,653)	1:A:38:VAL:HG21	1:A:50:LEU:HD21	10	0.13
(1,653)	1:A:38:VAL:HG21	1:A:50:LEU:HD22	10	0.13
(1,653)	1:A:38:VAL:HG21	1:A:50:LEU:HD23	10	0.13
(1,653)	1:A:38:VAL:HG22	1:A:50:LEU:HD11	10	0.13
(1,653)	1:A:38:VAL:HG22	1:A:50:LEU:HD12	10	0.13
(1,653)	1:A:38:VAL:HG22	1:A:50:LEU:HD13	10	0.13
(1,653)	1:A:38:VAL:HG22	1:A:50:LEU:HD21	10	0.13
(1,653)	1:A:38:VAL:HG22	1:A:50:LEU:HD22	10	0.13
(1,653)	1:A:38:VAL:HG22	1:A:50:LEU:HD23	10	0.13
(1,653)	1:A:38:VAL:HG23	1:A:50:LEU:HD11	10	0.13
(1,653)	1:A:38:VAL:HG23	1:A:50:LEU:HD12	10	0.13
(1,653)	1:A:38:VAL:HG23	1:A:50:LEU:HD13	10	0.13
(1,653)	1:A:38:VAL:HG23	1:A:50:LEU:HD21	10	0.13
(1,653)	1:A:38:VAL:HG23	1:A:50:LEU:HD22	10	0.13
(1,653)	1:A:38:VAL:HG23	1:A:50:LEU:HD23	10	0.13
(1,448)	1:A:30:GLY:H	1:A:53:SER:HG	18	0.13
(1,42)	1:A:7:ASP:H	1:A:13:ALA:HB1	14	0.13
(1,3486)	1:A:258:LEU:HD21	1:A:264:VAL:HG13	6	0.13
(1,3438)	1:A:257:ALA:HB1	1:A:282:ARG:HH11	13	0.13
(1,3414)	1:A:256:LEU:HD11	1:A:279:VAL:HB	10	0.13
(1,3414)	1:A:256:LEU:HD12	1:A:279:VAL:HB	10	0.13
(1,3414)	1:A:256:LEU:HD13	1:A:279:VAL:HB	10	0.13
(1,3414)	1:A:256:LEU:HD21	1:A:279:VAL:HB	10	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3414)	1:A:256:LEU:HD22	1:A:279:VAL:HB	10	0.13
(1,3414)	1:A:256:LEU:HD23	1:A:279:VAL:HB	10	0.13
(1,331)	1:A:24:ALA:H	1:A:39:ARG:HE	10	0.13
(1,3308)	1:A:247:VAL:HA	1:A:257:ALA:HB2	1	0.13
(1,3308)	1:A:247:VAL:HA	1:A:257:ALA:HB2	14	0.13
(1,3062)	1:A:238:VAL:HB	1:A:269:MET:HE3	8	0.13
(1,2963)	1:A:187:HIS:HB2	1:A:188:GLY:HA2	7	0.13
(1,2788)	1:A:173:ILE:HD11	1:A:178:VAL:HG12	9	0.13
(1,2788)	1:A:173:ILE:HD12	1:A:178:VAL:HG12	9	0.13
(1,2788)	1:A:173:ILE:HD13	1:A:178:VAL:HG12	9	0.13
(1,2523)	1:A:160:TRP:H	1:A:175:VAL:HG23	10	0.13
(1,2497)	1:A:158:GLU:H	1:A:158:GLU:HB2	19	0.13
(1,2465)	1:A:156:PRO:HD2	1:A:172:MET:HE3	5	0.13
(1,2283)	1:A:149:ILE:HB	1:A:149:ILE:HD12	10	0.13
(1,214)	1:A:16:MET:HE3	1:A:38:VAL:H	2	0.13
(1,203)	1:A:16:MET:HE1	1:A:102:ALA:H	12	0.13
(1,201)	1:A:16:MET:HE1	1:A:37:LEU:HD23	12	0.13
(1,201)	1:A:16:MET:HE1	1:A:37:LEU:HD23	18	0.13
(1,1878)	1:A:132:TYR:HA	1:A:132:TYR:HE1	4	0.13
(1,1625)	1:A:122:GLU:HB2	1:A:123:ASP:HA	11	0.13
(1,1608)	1:A:120:THR:H	1:A:120:THR:HB	19	0.13
(1,1606)	1:A:115:ALA:H	1:A:116:PRO:HD2	12	0.13
(1,1477)	1:A:92:TYR:HD2	1:A:97:THR:HG22	6	0.13
(1,1451)	1:A:92:TYR:HA	1:A:93:LEU:H	12	0.13
(1,1260)	1:A:80:HIS:HD1	1:A:83:ALA:HB2	6	0.13
(1,1260)	1:A:80:HIS:HD1	1:A:83:ALA:HB2	7	0.13
(1,1224)	1:A:78:PHE:HE2	1:A:84:LEU:HD11	7	0.13
(1,1224)	1:A:78:PHE:HE2	1:A:84:LEU:HD12	7	0.13
(1,1224)	1:A:78:PHE:HE2	1:A:84:LEU:HD13	7	0.13
(1,1224)	1:A:78:PHE:HE2	1:A:84:LEU:HD21	7	0.13
(1,1224)	1:A:78:PHE:HE2	1:A:84:LEU:HD22	7	0.13
(1,1224)	1:A:78:PHE:HE2	1:A:84:LEU:HD23	7	0.13
(1,1201)	1:A:78:PHE:HA	1:A:83:ALA:HB1	1	0.13
(1,1173)	1:A:73:ILE:HD11	1:A:81:LEU:HD11	8	0.13
(1,1173)	1:A:73:ILE:HD11	1:A:81:LEU:HD12	8	0.13
(1,1173)	1:A:73:ILE:HD11	1:A:81:LEU:HD13	8	0.13
(1,1173)	1:A:73:ILE:HD11	1:A:81:LEU:HD21	8	0.13
(1,1173)	1:A:73:ILE:HD11	1:A:81:LEU:HD22	8	0.13
(1,1173)	1:A:73:ILE:HD11	1:A:81:LEU:HD23	8	0.13
(1,1173)	1:A:73:ILE:HD12	1:A:81:LEU:HD11	8	0.13
(1,1173)	1:A:73:ILE:HD12	1:A:81:LEU:HD12	8	0.13
(1,1173)	1:A:73:ILE:HD12	1:A:81:LEU:HD13	8	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1173)	1:A:73:ILE:HD12	1:A:81:LEU:HD21	8	0.13
(1,1173)	1:A:73:ILE:HD12	1:A:81:LEU:HD22	8	0.13
(1,1173)	1:A:73:ILE:HD12	1:A:81:LEU:HD23	8	0.13
(1,1173)	1:A:73:ILE:HD13	1:A:81:LEU:HD11	8	0.13
(1,1173)	1:A:73:ILE:HD13	1:A:81:LEU:HD12	8	0.13
(1,1173)	1:A:73:ILE:HD13	1:A:81:LEU:HD13	8	0.13
(1,1173)	1:A:73:ILE:HD13	1:A:81:LEU:HD21	8	0.13
(1,1173)	1:A:73:ILE:HD13	1:A:81:LEU:HD22	8	0.13
(1,1173)	1:A:73:ILE:HD13	1:A:81:LEU:HD23	8	0.13
(1,1138)	1:A:72:LYS:HA	1:A:76:GLN:H	10	0.13
(1,994)	1:A:63:ILE:HB	1:A:63:ILE:HD13	14	0.12
(1,920)	1:A:59:SER:H	1:A:59:SER:HG	9	0.12
(1,920)	1:A:59:SER:H	1:A:59:SER:HG	10	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG11	1:A:50:LEU:HD11	9	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG11	1:A:50:LEU:HD12	9	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG11	1:A:50:LEU:HD13	9	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG11	1:A:50:LEU:HD21	9	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG11	1:A:50:LEU:HD22	9	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG11	1:A:50:LEU:HD23	9	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG12	1:A:50:LEU:HD11	9	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG12	1:A:50:LEU:HD12	9	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG12	1:A:50:LEU:HD13	9	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG12	1:A:50:LEU:HD21	9	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG12	1:A:50:LEU:HD22	9	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG12	1:A:50:LEU:HD23	9	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG13	1:A:50:LEU:HD11	9	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG13	1:A:50:LEU:HD12	9	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG13	1:A:50:LEU:HD13	9	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG13	1:A:50:LEU:HD21	9	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG13	1:A:50:LEU:HD22	9	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG13	1:A:50:LEU:HD23	9	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG21	1:A:50:LEU:HD11	9	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG21	1:A:50:LEU:HD12	9	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG21	1:A:50:LEU:HD13	9	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG21	1:A:50:LEU:HD21	9	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG21	1:A:50:LEU:HD22	9	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG21	1:A:50:LEU:HD23	9	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG22	1:A:50:LEU:HD11	9	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG22	1:A:50:LEU:HD12	9	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG22	1:A:50:LEU:HD13	9	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG22	1:A:50:LEU:HD21	9	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG22	1:A:50:LEU:HD22	9	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,653)	1:A:38:VAL:HG22	1:A:50:LEU:HD23	9	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG23	1:A:50:LEU:HD11	9	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG23	1:A:50:LEU:HD12	9	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG23	1:A:50:LEU:HD13	9	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG23	1:A:50:LEU:HD21	9	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG23	1:A:50:LEU:HD22	9	0.12
(1,653)	1:A:38:VAL:HG23	1:A:50:LEU:HD23	9	0.12
(1,616)	1:A:37:LEU:HG	1:A:102:ALA:HB2	9	0.12
(1,563)	1:A:36:PHE:HA	1:A:102:ALA:HB2	7	0.12
(1,496)	1:A:33:HIS:HE1	1:A:56:SER:H	12	0.12
(1,47)	1:A:7:ASP:HA	1:A:10:ASP:H	10	0.12
(1,404)	1:A:28:LEU:H	1:A:28:LEU:HD21	13	0.12
(1,3972)	1:A:76:GLN:HG2	1:A:169:ARG:HA	11	0.12
(1,3972)	1:A:76:GLN:HG3	1:A:169:ARG:HA	11	0.12
(1,3551)	1:A:263:ILE:HD11	1:A:294:PHE:HZ	12	0.12
(1,3525)	1:A:260:VAL:HG23	1:A:261:GLY:H	4	0.12
(1,3493)	1:A:258:LEU:HD22	1:A:279:VAL:HB	8	0.12
(1,3488)	1:A:258:LEU:HD21	1:A:279:VAL:HB	3	0.12
(1,3441)	1:A:257:ALA:HB2	1:A:258:LEU:H	14	0.12
(1,3360)	1:A:254:THR:H	1:A:255:ALA:HB2	5	0.12
(1,3360)	1:A:254:THR:H	1:A:255:ALA:HB2	20	0.12
(1,3205)	1:A:242:ALA:HB1	1:A:258:LEU:HD23	7	0.12
(1,3139)	1:A:240:ALA:HB3	1:A:264:VAL:H	8	0.12
(1,2986)	1:A:199:GLY:H	1:A:200:ILE:H	14	0.12
(1,2956)	1:A:187:HIS:H	1:A:188:GLY:H	6	0.12
(1,2927)	1:A:183:ARG:HB2	1:A:183:ARG:HE	2	0.12
(1,2913)	1:A:182:VAL:H	1:A:182:VAL:HG11	5	0.12
(1,2646)	1:A:163:ALA:HB3	1:A:164:ARG:HA	18	0.12
(1,2646)	1:A:163:ALA:HB3	1:A:164:ARG:HA	19	0.12
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD11	1	0.12
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD12	1	0.12
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD13	1	0.12
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD11	13	0.12
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD12	13	0.12
(1,2644)	1:A:163:ALA:HB2	1:A:173:ILE:HD13	13	0.12
(1,2546)	1:A:160:TRP:HB2	1:A:172:MET:HE2	13	0.12
(1,2521)	1:A:160:TRP:H	1:A:172:MET:HE1	13	0.12
(1,2497)	1:A:158:GLU:H	1:A:158:GLU:HB2	7	0.12
(1,2497)	1:A:158:GLU:H	1:A:158:GLU:HB2	14	0.12
(1,247)	1:A:20:SER:H	1:A:20:SER:HG	6	0.12
(1,2286)	1:A:149:ILE:HD12	1:A:150:LEU:H	12	0.12
(1,2142)	1:A:142:LEU:HD11	1:A:143:PRO:HD2	5	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2142)	1:A:142:LEU:HD12	1:A:143:PRO:HD2	5	0.12
(1,2142)	1:A:142:LEU:HD13	1:A:143:PRO:HD2	5	0.12
(1,2142)	1:A:142:LEU:HD21	1:A:143:PRO:HD2	5	0.12
(1,2142)	1:A:142:LEU:HD22	1:A:143:PRO:HD2	5	0.12
(1,2142)	1:A:142:LEU:HD23	1:A:143:PRO:HD2	5	0.12
(1,2084)	1:A:141:ASP:H	1:A:171:GLY:HA2	18	0.12
(1,201)	1:A:16:MET:HE1	1:A:37:LEU:HD23	6	0.12
(1,1877)	1:A:132:TYR:HA	1:A:132:TYR:HD1	15	0.12
(1,1608)	1:A:120:THR:H	1:A:120:THR:HB	17	0.12
(1,155)	1:A:15:TYR:HA	1:A:16:MET:HE3	3	0.12
(1,1444)	1:A:91:HIS:HD2	1:A:92:TYR:H	12	0.12
(1,1395)	1:A:88:TYR:HD1	1:A:92:TYR:HA	9	0.12
(1,1395)	1:A:88:TYR:HD2	1:A:92:TYR:HA	9	0.12
(1,1203)	1:A:78:PHE:HD1	1:A:83:ALA:HB1	10	0.12
(1,1195)	1:A:78:PHE:HA	1:A:78:PHE:HD1	7	0.12
(1,1160)	1:A:73:ILE:HB	1:A:84:LEU:HD11	7	0.12
(1,1160)	1:A:73:ILE:HB	1:A:84:LEU:HD12	7	0.12
(1,1160)	1:A:73:ILE:HB	1:A:84:LEU:HD13	7	0.12
(1,1160)	1:A:73:ILE:HB	1:A:84:LEU:HD21	7	0.12
(1,1160)	1:A:73:ILE:HB	1:A:84:LEU:HD22	7	0.12
(1,1160)	1:A:73:ILE:HB	1:A:84:LEU:HD23	7	0.12
(1,1050)	1:A:66:LEU:H	1:A:66:LEU:HD23	19	0.12
(1,1014)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HD11	14	0.12
(1,1014)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HD12	14	0.12
(1,1014)	1:A:63:ILE:HD12	1:A:73:ILE:HD13	14	0.12
(1,994)	1:A:63:ILE:HB	1:A:63:ILE:HD13	3	0.11
(1,994)	1:A:63:ILE:HB	1:A:63:ILE:HD13	15	0.11
(1,65)	1:A:9:SER:HA	1:A:14:TRP:HE1	10	0.11
(1,563)	1:A:36:PHE:HA	1:A:102:ALA:HB2	4	0.11
(1,42)	1:A:7:ASP:H	1:A:13:ALA:HB1	4	0.11
(1,42)	1:A:7:ASP:H	1:A:13:ALA:HB1	7	0.11
(1,404)	1:A:28:LEU:H	1:A:28:LEU:HD21	4	0.11
(1,404)	1:A:28:LEU:H	1:A:28:LEU:HD21	8	0.11
(1,3876)	1:A:287:PRO:HA	1:A:290:HIS:H	1	0.11
(1,3675)	1:A:269:MET:HE2	1:A:275:TRP:HE3	4	0.11
(1,3584)	1:A:264:VAL:HG13	1:A:266:VAL:HA	4	0.11
(1,3470)	1:A:258:LEU:HD12	1:A:264:VAL:HG22	18	0.11
(1,3441)	1:A:257:ALA:HB2	1:A:258:LEU:H	17	0.11
(1,3440)	1:A:257:ALA:HB1	1:A:282:ARG:HH22	1	0.11
(1,3425)	1:A:256:LEU:HD11	1:A:257:ALA:H	11	0.11
(1,3425)	1:A:256:LEU:HD12	1:A:257:ALA:H	11	0.11
(1,3425)	1:A:256:LEU:HD13	1:A:257:ALA:H	11	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3425)	1:A:256:LEU:HD21	1:A:257:ALA:H	11	0.11
(1,3425)	1:A:256:LEU:HD22	1:A:257:ALA:H	11	0.11
(1,3425)	1:A:256:LEU:HD23	1:A:257:ALA:H	11	0.11
(1,3377)	1:A:254:THR:HG23	1:A:255:ALA:H	1	0.11
(1,3221)	1:A:242:ALA:HB2	1:A:264:VAL:HG22	13	0.11
(1,3191)	1:A:242:ALA:HA	1:A:264:VAL:HG22	13	0.11
(1,3137)	1:A:240:ALA:HB2	1:A:294:PHE:HD1	2	0.11
(1,307)	1:A:22:GLN:H	1:A:22:GLN:HE21	11	0.11
(1,3045)	1:A:238:VAL:H	1:A:266:VAL:HG11	1	0.11
(1,3005)	1:A:225:ALA:H	1:A:225:ALA:HB1	14	0.11
(1,2954)	1:A:187:HIS:H	1:A:187:HIS:HB2	14	0.11
(1,2937)	1:A:184:SER:HG	1:A:190:HIS:HD2	12	0.11
(1,2929)	1:A:183:ARG:HD2	1:A:183:ARG:HH11	1	0.11
(1,2894)	1:A:179:GLU:HA	1:A:180:LYS:H	7	0.11
(1,2646)	1:A:163:ALA:HB3	1:A:164:ARG:HA	6	0.11
(1,2568)	1:A:161:TRP:HA	1:A:172:MET:HG2	9	0.11
(1,2546)	1:A:160:TRP:HB2	1:A:172:MET:HE2	15	0.11
(1,2497)	1:A:158:GLU:H	1:A:158:GLU:HB2	15	0.11
(1,249)	1:A:20:SER:H	1:A:23:GLU:H	20	0.11
(1,2461)	1:A:156:PRO:HD2	1:A:162:SER:HA	12	0.11
(1,2275)	1:A:149:ILE:HA	1:A:149:ILE:HD12	3	0.11
(1,2275)	1:A:149:ILE:HA	1:A:149:ILE:HD12	16	0.11
(1,2227)	1:A:145:LYS:H	1:A:145:LYS:HD2	10	0.11
(1,2194)	1:A:144:PHE:HE1	1:A:177:TYR:HB2	19	0.11
(1,1961)	1:A:134:PHE:HA	1:A:134:PHE:HE1	18	0.11

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

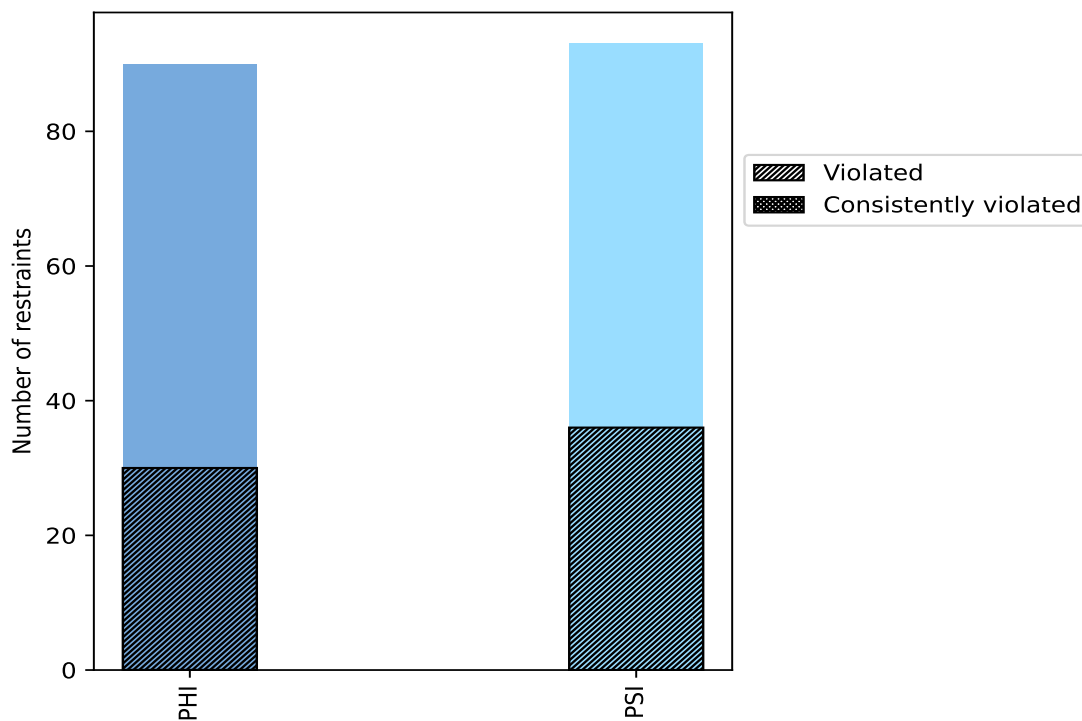
10.1 Summary of dihedral-angle violations [i](#)

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

Angle type	Count	% ¹	Violated ³			Consistently Violated ⁴		
			Count	% ²	% ¹	Count	% ²	% ¹
PHI	90	49.2	30	33.3	16.4	0	0.0	0.0
PSI	93	50.8	36	38.7	19.7	0	0.0	0.0
Total	183	100.0	66	36.1	36.1	0	0.0	0.0

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

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



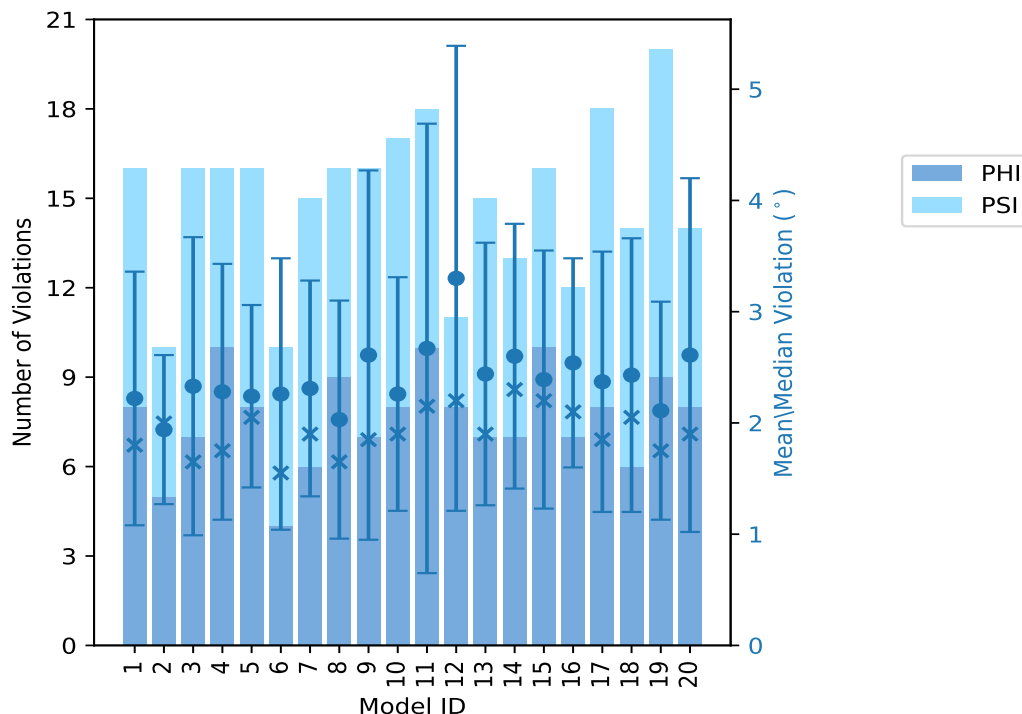
Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories

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

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

Model ID	Number of violations			Mean (°)	Max (°)	SD (°)	Median (°)
	PHI	PSI	Total				
1	8	8	16	2.22	4.8	1.14	1.8
2	5	5	10	1.94	3.5	0.67	2.0
3	7	9	16	2.33	4.8	1.34	1.65
4	10	6	16	2.28	5.8	1.15	1.75
5	8	8	16	2.24	4.2	0.82	2.05
6	4	6	10	2.26	4.4	1.22	1.55
7	6	9	15	2.31	4.1	0.97	1.9
8	9	7	16	2.03	5.3	1.07	1.65
9	7	9	16	2.61	6.6	1.66	1.85
10	8	9	17	2.26	4.8	1.05	1.9
11	10	8	18	2.67	8.6	2.02	2.15
12	8	3	11	3.3	7.7	2.09	2.2
13	7	8	15	2.44	4.9	1.18	1.9
14	7	6	13	2.6	4.8	1.19	2.3
15	10	6	16	2.39	5.2	1.16	2.2
16	7	5	12	2.54	3.9	0.94	2.1
17	8	10	18	2.37	4.8	1.17	1.85
18	6	8	14	2.43	6.2	1.23	2.05
19	9	11	20	2.11	4.8	0.98	1.75
20	8	6	14	2.61	7.1	1.59	1.9

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



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

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

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

Number of violated restraints			Fraction of the ensemble	
PHI	PSI	Total	Count ¹	%
7	12	19	1	5.0
6	6	12	2	10.0
2	6	8	3	15.0
5	1	6	4	20.0
3	2	5	5	25.0
1	1	2	6	30.0
0	2	2	7	35.0
1	1	2	8	40.0
0	1	1	9	45.0
0	1	1	10	50.0
0	0	0	11	55.0

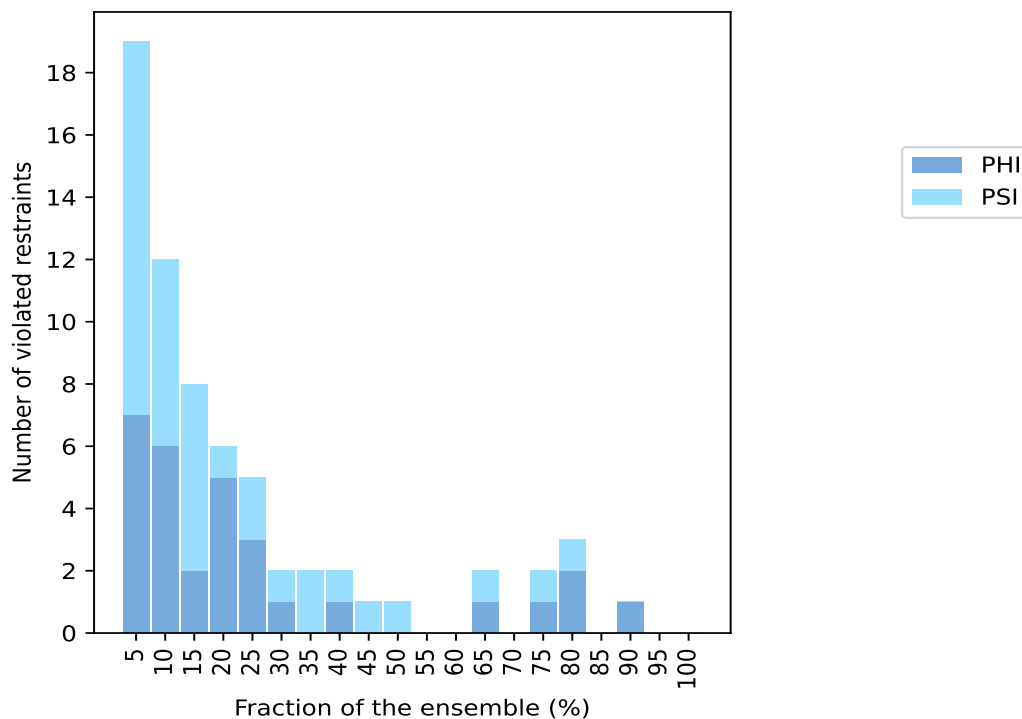
Continued on next page...

Continued from previous page...

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

¹ Number of models with violations

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

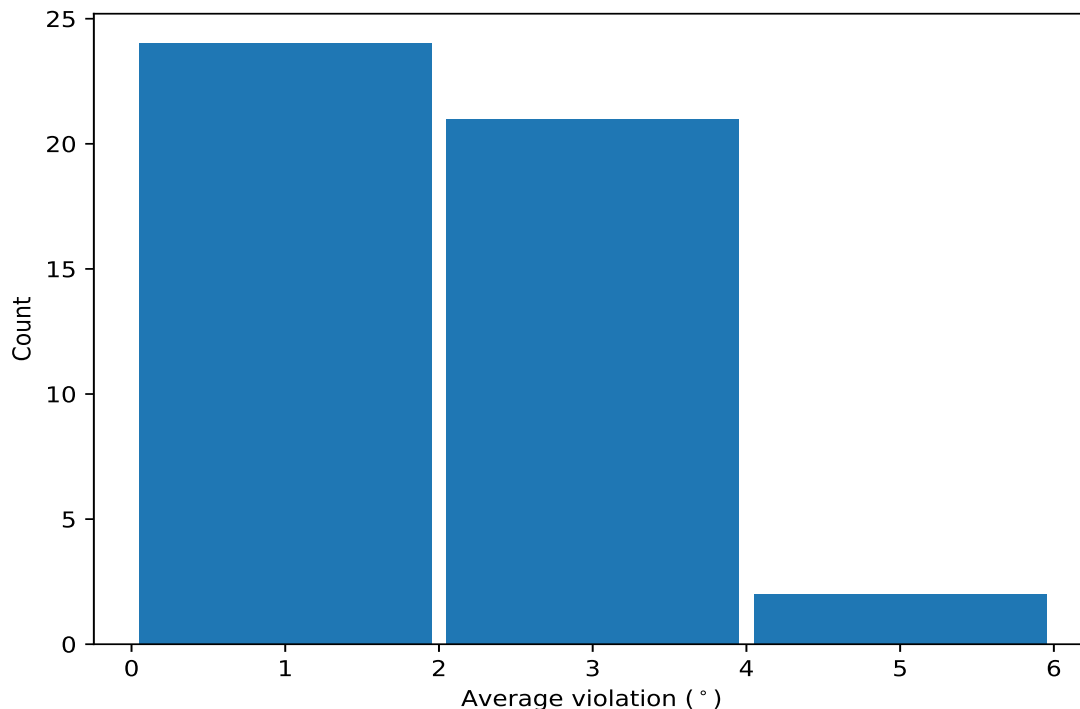


10.4 Most violated dihedral-angle restraints in the ensemble [i](#)

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

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

in the ensemble



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,46)	1:A:50:LEU:C	1:A:51:SER:N	1:A:51:SER:CA	1:A:51:SER:C	18	1.93	0.51	1.85
(1,57)	1:A:59:SER:N	1:A:59:SER:CA	1:A:59:SER:C	1:A:60:HIS:N	16	3.51	1.29	3.35
(1,109)	1:A:151:VAL:C	1:A:152:ILE:N	1:A:152:ILE:CA	1:A:152:ILE:C	16	3.13	1.11	3.05
(1,12)	1:A:16:MET:C	1:A:17:GLY:N	1:A:17:GLY:CA	1:A:17:GLY:C	16	1.89	0.38	1.9
(1,114)	1:A:154:GLU:N	1:A:154:GLU:CA	1:A:154:GLU:C	1:A:155:LYS:N	15	3.63	1.33	3.7
(1,105)	1:A:149:ILE:C	1:A:150:LEU:N	1:A:150:LEU:CA	1:A:150:LEU:C	15	3.15	1.35	3.4
(1,13)	1:A:17:GLY:N	1:A:17:GLY:CA	1:A:17:GLY:C	1:A:18:PRO:N	13	2.42	0.84	2.5
(1,20)	1:A:23:GLU:C	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	13	1.84	0.3	1.8
(1,108)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:C	1:A:152:ILE:N	10	2.36	0.86	2.45
(1,138)	1:A:180:LYS:N	1:A:180:LYS:CA	1:A:180:LYS:C	1:A:181:LEU:N	9	2.23	1.03	1.8
(1,52)	1:A:53:SER:C	1:A:54:GLU:N	1:A:54:GLU:CA	1:A:54:GLU:C	8	5.21	2.13	5.25
(1,65)	1:A:63:ILE:N	1:A:63:ILE:CA	1:A:63:ILE:C	1:A:64:ASN:N	8	2.58	1.6	1.85
(1,169)	1:A:278:GLU:N	1:A:278:GLU:CA	1:A:278:GLU:C	1:A:279:VAL:N	7	2.1	0.94	1.5
(1,106)	1:A:150:LEU:N	1:A:150:LEU:CA	1:A:150:LEU:C	1:A:151:VAL:N	7	1.79	0.55	1.7
(1,97)	1:A:128:VAL:C	1:A:129:ARG:N	1:A:129:ARG:CA	1:A:129:ARG:C	6	2.38	1.05	2.25
(1,94)	1:A:127:TYR:N	1:A:127:TYR:CA	1:A:127:TYR:C	1:A:128:VAL:N	6	1.73	0.65	1.5
(1,112)	1:A:153:ILE:N	1:A:153:ILE:CA	1:A:153:ILE:C	1:A:154:GLU:N	5	2.34	0.74	2.3
(1,19)	1:A:23:GLU:N	1:A:23:GLU:CA	1:A:23:GLU:C	1:A:24:ALA:N	5	1.56	0.32	1.3
(1,142)	1:A:239:PHE:C	1:A:240:ALA:N	1:A:240:ALA:CA	1:A:240:ALA:C	5	1.46	0.43	1.2
(1,4)	1:A:12:SER:C	1:A:13:ALA:N	1:A:13:ALA:CA	1:A:13:ALA:C	5	1.42	0.28	1.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

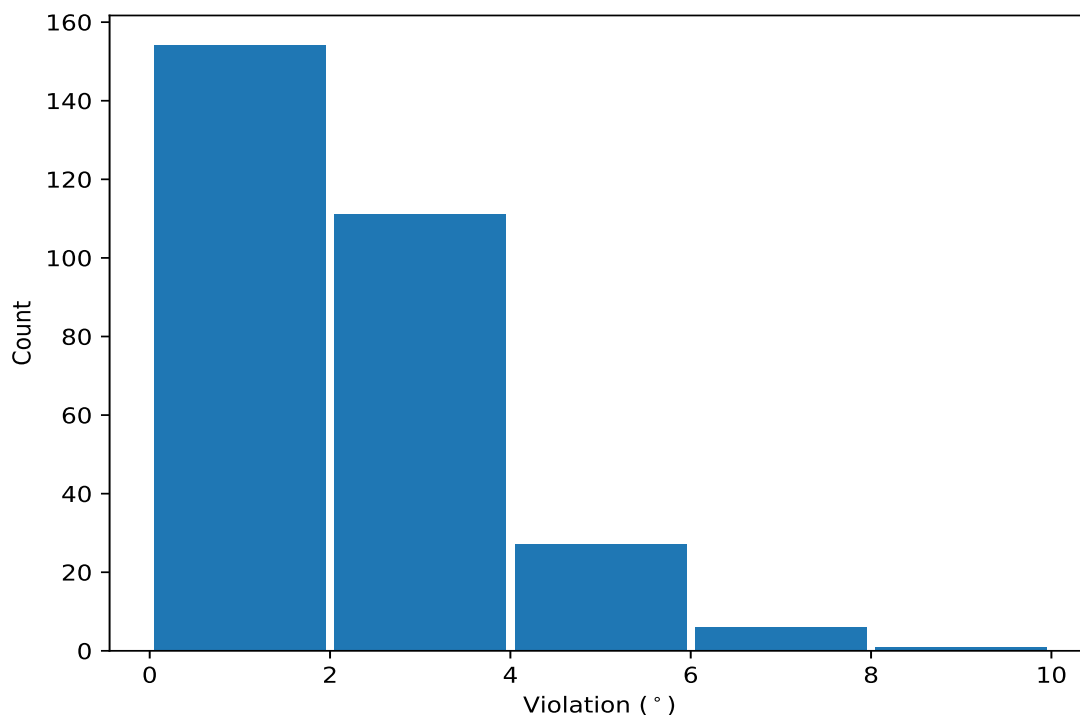
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,123)	1:A:163:ALA:C	1:A:164:ARG:N	1:A:164:ARG:CA	1:A:164:ARG:C	5	1.38	0.2	1.4
(1,39)	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	1:A:41:SER:N	4	3.02	2.17	2.15
(1,115)	1:A:159:GLN:C	1:A:160:TRP:N	1:A:160:TRP:CA	1:A:160:TRP:C	4	2.28	0.83	2.25
(1,54)	1:A:56:SER:C	1:A:57:ARG:N	1:A:57:ARG:CA	1:A:57:ARG:C	4	2.05	0.65	2.0
(1,162)	1:A:274:GLN:C	1:A:275:TRP:N	1:A:275:TRP:CA	1:A:275:TRP:C	4	1.92	0.36	1.95
(1,178)	1:A:290:HIS:C	1:A:291:VAL:N	1:A:291:VAL:CA	1:A:291:VAL:C	4	1.58	0.39	1.5
(1,135)	1:A:177:TYR:C	1:A:178:VAL:N	1:A:178:VAL:CA	1:A:178:VAL:C	4	1.52	0.38	1.5
(1,93)	1:A:88:TYR:N	1:A:88:TYR:CA	1:A:88:TYR:C	1:A:89:LYS:N	3	3.87	0.17	3.8
(1,61)	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:C	1:A:62:ILE:N	3	2.17	0.5	2.3
(1,82)	1:A:82:PRO:C	1:A:83:ALA:N	1:A:83:ALA:CA	1:A:83:ALA:C	3	2.17	1.37	1.3
(1,29)	1:A:28:LEU:N	1:A:28:LEU:CA	1:A:28:LEU:C	1:A:29:GLN:N	3	1.93	1.11	1.2
(1,100)	1:A:130:THR:N	1:A:130:THR:CA	1:A:130:THR:C	1:A:131:LEU:N	3	1.9	0.45	1.8
(1,5)	1:A:13:ALA:N	1:A:13:ALA:CA	1:A:13:ALA:C	1:A:14:TRP:N	3	1.63	0.17	1.7
(1,49)	1:A:52:VAL:N	1:A:52:VAL:CA	1:A:52:VAL:C	1:A:53:SER:N	3	1.23	0.09	1.3
(1,62)	1:A:61:TYR:C	1:A:62:ILE:N	1:A:62:ILE:CA	1:A:62:ILE:C	3	1.2	0.08	1.2
(1,56)	1:A:58:VAL:C	1:A:59:SER:N	1:A:59:SER:CA	1:A:59:SER:C	2	4.05	0.15	4.05
(1,27)	1:A:27:ARG:N	1:A:27:ARG:CA	1:A:27:ARG:C	1:A:28:LEU:N	2	2.5	1.2	2.5
(1,101)	1:A:147:GLY:C	1:A:148:GLU:N	1:A:148:GLU:CA	1:A:148:GLU:C	2	2.45	0.55	2.45
(1,6)	1:A:13:ALA:C	1:A:14:TRP:N	1:A:14:TRP:CA	1:A:14:TRP:C	2	2.3	0.1	2.3
(1,73)	1:A:71:PHE:N	1:A:71:PHE:CA	1:A:71:PHE:C	1:A:72:LYS:N	2	2.2	0.5	2.2
(1,84)	1:A:83:ALA:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	2	1.75	0.05	1.75
(1,137)	1:A:178:VAL:C	1:A:179:GLU:N	1:A:179:GLU:CA	1:A:179:GLU:C	2	1.75	0.05	1.75
(1,110)	1:A:152:ILE:N	1:A:152:ILE:CA	1:A:152:ILE:C	1:A:153:ILE:N	2	1.7	0.5	1.7
(1,132)	1:A:173:ILE:N	1:A:173:ILE:CA	1:A:173:ILE:C	1:A:174:PRO:N	2	1.6	0.2	1.6
(1,171)	1:A:283:LYS:N	1:A:283:LYS:CA	1:A:283:LYS:C	1:A:284:GLY:N	2	1.55	0.15	1.55
(1,140)	1:A:238:VAL:C	1:A:239:PHE:N	1:A:239:PHE:CA	1:A:239:PHE:C	2	1.5	0.2	1.5
(1,7)	1:A:14:TRP:N	1:A:14:TRP:CA	1:A:14:TRP:C	1:A:15:TYR:N	2	1.2	0.1	1.2

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

10.5 All violated dihedral-angle restraints

10.5.1 Histogram : Distribution of violations

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,53)	1:A:54:GLU:N	1:A:54:GLU:CA	1:A:54:GLU:C	1:A:55:ASN:N	11	8.6
(1,52)	1:A:53:SER:C	1:A:54:GLU:N	1:A:54:GLU:CA	1:A:54:GLU:C	12	7.7
(1,52)	1:A:53:SER:C	1:A:54:GLU:N	1:A:54:GLU:CA	1:A:54:GLU:C	11	7.5
(1,52)	1:A:53:SER:C	1:A:54:GLU:N	1:A:54:GLU:CA	1:A:54:GLU:C	20	7.1
(1,39)	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	1:A:41:SER:N	9	6.6
(1,57)	1:A:59:SER:N	1:A:59:SER:CA	1:A:59:SER:C	1:A:60:HIS:N	18	6.2
(1,114)	1:A:154:GLU:N	1:A:154:GLU:CA	1:A:154:GLU:C	1:A:155:LYS:N	9	6.0
(1,65)	1:A:63:ILE:N	1:A:63:ILE:CA	1:A:63:ILE:C	1:A:64:ASN:N	12	5.9
(1,109)	1:A:151:VAL:C	1:A:152:ILE:N	1:A:152:ILE:CA	1:A:152:ILE:C	4	5.8
(1,114)	1:A:154:GLU:N	1:A:154:GLU:CA	1:A:154:GLU:C	1:A:155:LYS:N	12	5.5
(1,52)	1:A:53:SER:C	1:A:54:GLU:N	1:A:54:GLU:CA	1:A:54:GLU:C	8	5.3
(1,52)	1:A:53:SER:C	1:A:54:GLU:N	1:A:54:GLU:CA	1:A:54:GLU:C	15	5.2
(1,57)	1:A:59:SER:N	1:A:59:SER:CA	1:A:59:SER:C	1:A:60:HIS:N	13	4.9
(1,52)	1:A:53:SER:C	1:A:54:GLU:N	1:A:54:GLU:CA	1:A:54:GLU:C	13	4.9
(1,105)	1:A:149:ILE:C	1:A:150:LEU:N	1:A:150:LEU:CA	1:A:150:LEU:C	20	4.9
(1,57)	1:A:59:SER:N	1:A:59:SER:CA	1:A:59:SER:C	1:A:60:HIS:N	14	4.8
(1,57)	1:A:59:SER:N	1:A:59:SER:CA	1:A:59:SER:C	1:A:60:HIS:N	17	4.8
(1,114)	1:A:154:GLU:N	1:A:154:GLU:CA	1:A:154:GLU:C	1:A:155:LYS:N	10	4.8
(1,114)	1:A:154:GLU:N	1:A:154:GLU:CA	1:A:154:GLU:C	1:A:155:LYS:N	19	4.8
(1,105)	1:A:149:ILE:C	1:A:150:LEU:N	1:A:150:LEU:CA	1:A:150:LEU:C	1	4.8
(1,105)	1:A:149:ILE:C	1:A:150:LEU:N	1:A:150:LEU:CA	1:A:150:LEU:C	3	4.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,109)	1:A:151:VAL:C	1:A:152:ILE:N	1:A:152:ILE:CA	1:A:152:ILE:C	3	4.7
(1,65)	1:A:63:ILE:N	1:A:63:ILE:CA	1:A:63:ILE:C	1:A:64:ASN:N	9	4.6
(1,114)	1:A:154:GLU:N	1:A:154:GLU:CA	1:A:154:GLU:C	1:A:155:LYS:N	17	4.6
(1,57)	1:A:59:SER:N	1:A:59:SER:CA	1:A:59:SER:C	1:A:60:HIS:N	1	4.5
(1,105)	1:A:149:ILE:C	1:A:150:LEU:N	1:A:150:LEU:CA	1:A:150:LEU:C	6	4.4
(1,138)	1:A:180:LYS:N	1:A:180:LYS:CA	1:A:180:LYS:C	1:A:181:LEU:N	6	4.3
(1,105)	1:A:149:ILE:C	1:A:150:LEU:N	1:A:150:LEU:CA	1:A:150:LEU:C	12	4.3
(1,97)	1:A:128:VAL:C	1:A:129:ARG:N	1:A:129:ARG:CA	1:A:129:ARG:C	14	4.2
(1,56)	1:A:58:VAL:C	1:A:59:SER:N	1:A:59:SER:CA	1:A:59:SER:C	5	4.2
(1,93)	1:A:88:TYR:N	1:A:88:TYR:CA	1:A:88:TYR:C	1:A:89:LYS:N	17	4.1
(1,82)	1:A:82:PRO:C	1:A:83:ALA:N	1:A:83:ALA:CA	1:A:83:ALA:C	10	4.1
(1,114)	1:A:154:GLU:N	1:A:154:GLU:CA	1:A:154:GLU:C	1:A:155:LYS:N	7	4.1
(1,57)	1:A:59:SER:N	1:A:59:SER:CA	1:A:59:SER:C	1:A:60:HIS:N	4	4.0
(1,56)	1:A:58:VAL:C	1:A:59:SER:N	1:A:59:SER:CA	1:A:59:SER:C	16	3.9
(1,109)	1:A:151:VAL:C	1:A:152:ILE:N	1:A:152:ILE:CA	1:A:152:ILE:C	19	3.9
(1,105)	1:A:149:ILE:C	1:A:150:LEU:N	1:A:150:LEU:CA	1:A:150:LEU:C	15	3.9
(1,105)	1:A:149:ILE:C	1:A:150:LEU:N	1:A:150:LEU:CA	1:A:150:LEU:C	16	3.9
(1,93)	1:A:88:TYR:N	1:A:88:TYR:CA	1:A:88:TYR:C	1:A:89:LYS:N	9	3.8
(1,138)	1:A:180:LYS:N	1:A:180:LYS:CA	1:A:180:LYS:C	1:A:181:LEU:N	3	3.8
(1,13)	1:A:17:GLY:N	1:A:17:GLY:CA	1:A:17:GLY:C	1:A:18:PRO:N	17	3.8
(1,114)	1:A:154:GLU:N	1:A:154:GLU:CA	1:A:154:GLU:C	1:A:155:LYS:N	3	3.8
(1,109)	1:A:151:VAL:C	1:A:152:ILE:N	1:A:152:ILE:CA	1:A:152:ILE:C	13	3.8
(1,109)	1:A:151:VAL:C	1:A:152:ILE:N	1:A:152:ILE:CA	1:A:152:ILE:C	14	3.8
(1,93)	1:A:88:TYR:N	1:A:88:TYR:CA	1:A:88:TYR:C	1:A:89:LYS:N	10	3.7
(1,57)	1:A:59:SER:N	1:A:59:SER:CA	1:A:59:SER:C	1:A:60:HIS:N	3	3.7
(1,27)	1:A:27:ARG:N	1:A:27:ARG:CA	1:A:27:ARG:C	1:A:28:LEU:N	20	3.7
(1,169)	1:A:278:GLU:N	1:A:278:GLU:CA	1:A:278:GLU:C	1:A:279:VAL:N	14	3.7
(1,114)	1:A:154:GLU:N	1:A:154:GLU:CA	1:A:154:GLU:C	1:A:155:LYS:N	15	3.7
(1,108)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:C	1:A:152:ILE:N	16	3.7
(1,46)	1:A:50:LEU:C	1:A:51:SER:N	1:A:51:SER:CA	1:A:51:SER:C	16	3.6
(1,29)	1:A:28:LEU:N	1:A:28:LEU:CA	1:A:28:LEU:C	1:A:29:GLN:N	18	3.5
(1,13)	1:A:17:GLY:N	1:A:17:GLY:CA	1:A:17:GLY:C	1:A:18:PRO:N	1	3.5
(1,112)	1:A:153:ILE:N	1:A:153:ILE:CA	1:A:153:ILE:C	1:A:154:GLU:N	15	3.5
(1,109)	1:A:151:VAL:C	1:A:152:ILE:N	1:A:152:ILE:CA	1:A:152:ILE:C	7	3.5
(1,109)	1:A:151:VAL:C	1:A:152:ILE:N	1:A:152:ILE:CA	1:A:152:ILE:C	8	3.5
(1,108)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:C	1:A:152:ILE:N	2	3.5
(1,57)	1:A:59:SER:N	1:A:59:SER:CA	1:A:59:SER:C	1:A:60:HIS:N	6	3.4
(1,169)	1:A:278:GLU:N	1:A:278:GLU:CA	1:A:278:GLU:C	1:A:279:VAL:N	5	3.4
(1,114)	1:A:154:GLU:N	1:A:154:GLU:CA	1:A:154:GLU:C	1:A:155:LYS:N	1	3.4
(1,105)	1:A:149:ILE:C	1:A:150:LEU:N	1:A:150:LEU:CA	1:A:150:LEU:C	5	3.4
(1,57)	1:A:59:SER:N	1:A:59:SER:CA	1:A:59:SER:C	1:A:60:HIS:N	11	3.3
(1,13)	1:A:17:GLY:N	1:A:17:GLY:CA	1:A:17:GLY:C	1:A:18:PRO:N	7	3.3
(1,57)	1:A:59:SER:N	1:A:59:SER:CA	1:A:59:SER:C	1:A:60:HIS:N	7	3.2
(1,115)	1:A:159:GLN:C	1:A:160:TRP:N	1:A:160:TRP:CA	1:A:160:TRP:C	7	3.2
(1,114)	1:A:154:GLU:N	1:A:154:GLU:CA	1:A:154:GLU:C	1:A:155:LYS:N	14	3.2
(1,109)	1:A:151:VAL:C	1:A:152:ILE:N	1:A:152:ILE:CA	1:A:152:ILE:C	15	3.2
(1,1)	1:A:11:ARG:N	1:A:11:ARG:CA	1:A:11:ARG:C	1:A:12:SER:N	10	3.2
(1,97)	1:A:128:VAL:C	1:A:129:ARG:N	1:A:129:ARG:CA	1:A:129:ARG:C	4	3.1
(1,94)	1:A:127:TYR:N	1:A:127:TYR:CA	1:A:127:TYR:C	1:A:128:VAL:N	19	3.0
(1,57)	1:A:59:SER:N	1:A:59:SER:CA	1:A:59:SER:C	1:A:60:HIS:N	19	3.0
(1,57)	1:A:59:SER:N	1:A:59:SER:CA	1:A:59:SER:C	1:A:60:HIS:N	20	3.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,54)	1:A:56:SER:C	1:A:57:ARG:N	1:A:57:ARG:CA	1:A:57:ARG:C	18	3.0
(1,13)	1:A:17:GLY:N	1:A:17:GLY:CA	1:A:17:GLY:C	1:A:18:PRO:N	13	3.0
(1,115)	1:A:159:GLN:C	1:A:160:TRP:N	1:A:160:TRP:CA	1:A:160:TRP:C	11	3.0
(1,105)	1:A:149:ILE:C	1:A:150:LEU:N	1:A:150:LEU:CA	1:A:150:LEU:C	7	3.0
(1,101)	1:A:147:GLY:C	1:A:148:GLU:N	1:A:148:GLU:CA	1:A:148:GLU:C	19	3.0
(1,39)	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	1:A:41:SER:N	17	2.9
(1,13)	1:A:17:GLY:N	1:A:17:GLY:CA	1:A:17:GLY:C	1:A:18:PRO:N	14	2.9
(1,109)	1:A:151:VAL:C	1:A:152:ILE:N	1:A:152:ILE:CA	1:A:152:ILE:C	11	2.9
(1,106)	1:A:150:LEU:N	1:A:150:LEU:CA	1:A:150:LEU:C	1:A:151:VAL:N	3	2.9
(1,60)	1:A:60:HIS:C	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:C	16	2.8
(1,114)	1:A:154:GLU:N	1:A:154:GLU:CA	1:A:154:GLU:C	1:A:155:LYS:N	8	2.8
(1,109)	1:A:151:VAL:C	1:A:152:ILE:N	1:A:152:ILE:CA	1:A:152:ILE:C	18	2.8
(1,108)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:C	1:A:152:ILE:N	18	2.8
(1,108)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:C	1:A:152:ILE:N	20	2.8
(1,73)	1:A:71:PHE:N	1:A:71:PHE:CA	1:A:71:PHE:C	1:A:72:LYS:N	17	2.7
(1,61)	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:C	1:A:62:ILE:N	7	2.7
(1,57)	1:A:59:SER:N	1:A:59:SER:CA	1:A:59:SER:C	1:A:60:HIS:N	9	2.7
(1,13)	1:A:17:GLY:N	1:A:17:GLY:CA	1:A:17:GLY:C	1:A:18:PRO:N	5	2.7
(1,112)	1:A:153:ILE:N	1:A:153:ILE:CA	1:A:153:ILE:C	1:A:154:GLU:N	11	2.7
(1,97)	1:A:128:VAL:C	1:A:129:ARG:N	1:A:129:ARG:CA	1:A:129:ARG:C	19	2.6
(1,12)	1:A:16:MET:C	1:A:17:GLY:N	1:A:17:GLY:CA	1:A:17:GLY:C	19	2.6
(1,114)	1:A:154:GLU:N	1:A:154:GLU:CA	1:A:154:GLU:C	1:A:155:LYS:N	13	2.6
(1,77)	1:A:73:ILE:N	1:A:73:ILE:CA	1:A:73:ILE:C	1:A:74:GLY:N	8	2.5
(1,52)	1:A:53:SER:C	1:A:54:GLU:N	1:A:54:GLU:CA	1:A:54:GLU:C	4	2.5
(1,46)	1:A:50:LEU:C	1:A:51:SER:N	1:A:51:SER:CA	1:A:51:SER:C	10	2.5
(1,13)	1:A:17:GLY:N	1:A:17:GLY:CA	1:A:17:GLY:C	1:A:18:PRO:N	2	2.5
(1,12)	1:A:16:MET:C	1:A:17:GLY:N	1:A:17:GLY:CA	1:A:17:GLY:C	12	2.5
(1,109)	1:A:151:VAL:C	1:A:152:ILE:N	1:A:152:ILE:CA	1:A:152:ILE:C	5	2.5
(1,109)	1:A:151:VAL:C	1:A:152:ILE:N	1:A:152:ILE:CA	1:A:152:ILE:C	17	2.5
(1,108)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:C	1:A:152:ILE:N	5	2.5
(1,105)	1:A:149:ILE:C	1:A:150:LEU:N	1:A:150:LEU:CA	1:A:150:LEU:C	13	2.5
(1,100)	1:A:130:THR:N	1:A:130:THR:CA	1:A:130:THR:C	1:A:131:LEU:N	11	2.5
(1,6)	1:A:13:ALA:C	1:A:14:TRP:N	1:A:14:TRP:CA	1:A:14:TRP:C	10	2.4
(1,20)	1:A:23:GLU:C	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	4	2.4
(1,162)	1:A:274:GLN:C	1:A:275:TRP:N	1:A:275:TRP:CA	1:A:275:TRP:C	15	2.4
(1,138)	1:A:180:LYS:N	1:A:180:LYS:CA	1:A:180:LYS:C	1:A:181:LEU:N	13	2.4
(1,108)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:C	1:A:152:ILE:N	17	2.4
(1,61)	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:C	1:A:62:ILE:N	5	2.3
(1,46)	1:A:50:LEU:C	1:A:51:SER:N	1:A:51:SER:CA	1:A:51:SER:C	8	2.3
(1,20)	1:A:23:GLU:C	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	14	2.3
(1,12)	1:A:16:MET:C	1:A:17:GLY:N	1:A:17:GLY:CA	1:A:17:GLY:C	4	2.3
(1,112)	1:A:153:ILE:N	1:A:153:ILE:CA	1:A:153:ILE:C	1:A:154:GLU:N	4	2.3
(1,74)	1:A:71:PHE:C	1:A:72:LYS:N	1:A:72:LYS:CA	1:A:72:LYS:C	11	2.2
(1,6)	1:A:13:ALA:C	1:A:14:TRP:N	1:A:14:TRP:CA	1:A:14:TRP:C	12	2.2
(1,54)	1:A:56:SER:C	1:A:57:ARG:N	1:A:57:ARG:CA	1:A:57:ARG:C	15	2.2
(1,46)	1:A:50:LEU:C	1:A:51:SER:N	1:A:51:SER:CA	1:A:51:SER:C	15	2.2
(1,154)	1:A:265:LYS:C	1:A:266:VAL:N	1:A:266:VAL:CA	1:A:266:VAL:C	10	2.2
(1,142)	1:A:239:PHE:C	1:A:240:ALA:N	1:A:240:ALA:CA	1:A:240:ALA:C	18	2.2
(1,12)	1:A:16:MET:C	1:A:17:GLY:N	1:A:17:GLY:CA	1:A:17:GLY:C	11	2.2
(1,110)	1:A:152:ILE:N	1:A:152:ILE:CA	1:A:152:ILE:C	1:A:153:ILE:N	9	2.2
(1,109)	1:A:151:VAL:C	1:A:152:ILE:N	1:A:152:ILE:CA	1:A:152:ILE:C	6	2.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,108)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:C	1:A:152:ILE:N	1	2.2
(1,106)	1:A:150:LEU:N	1:A:150:LEU:CA	1:A:150:LEU:C	1:A:151:VAL:N	15	2.2
(1,94)	1:A:127:TYR:N	1:A:127:TYR:CA	1:A:127:TYR:C	1:A:128:VAL:N	11	2.1
(1,65)	1:A:63:ILE:N	1:A:63:ILE:CA	1:A:63:ILE:C	1:A:64:ASN:N	2	2.1
(1,46)	1:A:50:LEU:C	1:A:51:SER:N	1:A:51:SER:CA	1:A:51:SER:C	20	2.1
(1,20)	1:A:23:GLU:C	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	5	2.1
(1,178)	1:A:290:HIS:C	1:A:291:VAL:N	1:A:291:VAL:CA	1:A:291:VAL:C	18	2.1
(1,138)	1:A:180:LYS:N	1:A:180:LYS:CA	1:A:180:LYS:C	1:A:181:LEU:N	16	2.1
(1,13)	1:A:17:GLY:N	1:A:17:GLY:CA	1:A:17:GLY:C	1:A:18:PRO:N	16	2.1
(1,12)	1:A:16:MET:C	1:A:17:GLY:N	1:A:17:GLY:CA	1:A:17:GLY:C	16	2.1
(1,46)	1:A:50:LEU:C	1:A:51:SER:N	1:A:51:SER:CA	1:A:51:SER:C	1	2.0
(1,46)	1:A:50:LEU:C	1:A:51:SER:N	1:A:51:SER:CA	1:A:51:SER:C	2	2.0
(1,46)	1:A:50:LEU:C	1:A:51:SER:N	1:A:51:SER:CA	1:A:51:SER:C	12	2.0
(1,20)	1:A:23:GLU:C	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	2	2.0
(1,20)	1:A:23:GLU:C	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	8	2.0
(1,19)	1:A:23:GLU:N	1:A:23:GLU:CA	1:A:23:GLU:C	1:A:24:ALA:N	10	2.0
(1,162)	1:A:274:GLN:C	1:A:275:TRP:N	1:A:275:TRP:CA	1:A:275:TRP:C	20	2.0
(1,135)	1:A:177:TYR:C	1:A:178:VAL:N	1:A:178:VAL:CA	1:A:178:VAL:C	1	2.0
(1,13)	1:A:17:GLY:N	1:A:17:GLY:CA	1:A:17:GLY:C	1:A:18:PRO:N	3	2.0
(1,12)	1:A:16:MET:C	1:A:17:GLY:N	1:A:17:GLY:CA	1:A:17:GLY:C	5	2.0
(1,12)	1:A:16:MET:C	1:A:17:GLY:N	1:A:17:GLY:CA	1:A:17:GLY:C	18	2.0
(1,114)	1:A:154:GLU:N	1:A:154:GLU:CA	1:A:154:GLU:C	1:A:155:LYS:N	2	2.0
(1,97)	1:A:128:VAL:C	1:A:129:ARG:N	1:A:129:ARG:CA	1:A:129:ARG:C	15	1.9
(1,65)	1:A:63:ILE:N	1:A:63:ILE:CA	1:A:63:ILE:C	1:A:64:ASN:N	10	1.9
(1,57)	1:A:59:SER:N	1:A:59:SER:CA	1:A:59:SER:C	1:A:60:HIS:N	8	1.9
(1,46)	1:A:50:LEU:C	1:A:51:SER:N	1:A:51:SER:CA	1:A:51:SER:C	9	1.9
(1,20)	1:A:23:GLU:C	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	19	1.9
(1,19)	1:A:23:GLU:N	1:A:23:GLU:CA	1:A:23:GLU:C	1:A:24:ALA:N	7	1.9
(1,169)	1:A:278:GLU:N	1:A:278:GLU:CA	1:A:278:GLU:C	1:A:279:VAL:N	19	1.9
(1,162)	1:A:274:GLN:C	1:A:275:TRP:N	1:A:275:TRP:CA	1:A:275:TRP:C	17	1.9
(1,12)	1:A:16:MET:C	1:A:17:GLY:N	1:A:17:GLY:CA	1:A:17:GLY:C	10	1.9
(1,12)	1:A:16:MET:C	1:A:17:GLY:N	1:A:17:GLY:CA	1:A:17:GLY:C	13	1.9
(1,112)	1:A:153:ILE:N	1:A:153:ILE:CA	1:A:153:ILE:C	1:A:154:GLU:N	18	1.9
(1,101)	1:A:147:GLY:C	1:A:148:GLU:N	1:A:148:GLU:CA	1:A:148:GLU:C	9	1.9
(1,84)	1:A:83:ALA:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	8	1.8
(1,65)	1:A:63:ILE:N	1:A:63:ILE:CA	1:A:63:ILE:C	1:A:64:ASN:N	1	1.8
(1,54)	1:A:56:SER:C	1:A:57:ARG:N	1:A:57:ARG:CA	1:A:57:ARG:C	4	1.8
(1,5)	1:A:13:ALA:N	1:A:13:ALA:CA	1:A:13:ALA:C	1:A:14:TRP:N	7	1.8
(1,46)	1:A:50:LEU:C	1:A:51:SER:N	1:A:51:SER:CA	1:A:51:SER:C	3	1.8
(1,46)	1:A:50:LEU:C	1:A:51:SER:N	1:A:51:SER:CA	1:A:51:SER:C	17	1.8
(1,4)	1:A:12:SER:C	1:A:13:ALA:N	1:A:13:ALA:CA	1:A:13:ALA:C	12	1.8
(1,20)	1:A:23:GLU:C	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	1	1.8
(1,178)	1:A:290:HIS:C	1:A:291:VAL:N	1:A:291:VAL:CA	1:A:291:VAL:C	13	1.8
(1,138)	1:A:180:LYS:N	1:A:180:LYS:CA	1:A:180:LYS:C	1:A:181:LEU:N	20	1.8
(1,137)	1:A:178:VAL:C	1:A:179:GLU:N	1:A:179:GLU:CA	1:A:179:GLU:C	18	1.8
(1,135)	1:A:177:TYR:C	1:A:178:VAL:N	1:A:178:VAL:CA	1:A:178:VAL:C	16	1.8
(1,132)	1:A:173:ILE:N	1:A:173:ILE:CA	1:A:173:ILE:C	1:A:174:PRO:N	19	1.8
(1,13)	1:A:17:GLY:N	1:A:17:GLY:CA	1:A:17:GLY:C	1:A:18:PRO:N	11	1.8
(1,12)	1:A:16:MET:C	1:A:17:GLY:N	1:A:17:GLY:CA	1:A:17:GLY:C	20	1.8
(1,114)	1:A:154:GLU:N	1:A:154:GLU:CA	1:A:154:GLU:C	1:A:155:LYS:N	5	1.8
(1,109)	1:A:151:VAL:C	1:A:152:ILE:N	1:A:152:ILE:CA	1:A:152:ILE:C	9	1.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,106)	1:A:150:LEU:N	1:A:150:LEU:CA	1:A:150:LEU:C	1:A:151:VAL:N	1	1.8
(1,105)	1:A:149:ILE:C	1:A:150:LEU:N	1:A:150:LEU:CA	1:A:150:LEU:C	11	1.8
(1,100)	1:A:130:THR:N	1:A:130:THR:CA	1:A:130:THR:C	1:A:131:LEU:N	10	1.8
(1,84)	1:A:83:ALA:C	1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CA	1:A:84:LEU:C	4	1.7
(1,73)	1:A:71:PHE:N	1:A:71:PHE:CA	1:A:71:PHE:C	1:A:72:LYS:N	13	1.7
(1,65)	1:A:63:ILE:N	1:A:63:ILE:CA	1:A:63:ILE:C	1:A:64:ASN:N	4	1.7
(1,5)	1:A:13:ALA:N	1:A:13:ALA:CA	1:A:13:ALA:C	1:A:14:TRP:N	9	1.7
(1,46)	1:A:50:LEU:C	1:A:51:SER:N	1:A:51:SER:CA	1:A:51:SER:C	4	1.7
(1,46)	1:A:50:LEU:C	1:A:51:SER:N	1:A:51:SER:CA	1:A:51:SER:C	14	1.7
(1,4)	1:A:12:SER:C	1:A:13:ALA:N	1:A:13:ALA:CA	1:A:13:ALA:C	17	1.7
(1,20)	1:A:23:GLU:C	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	7	1.7
(1,20)	1:A:23:GLU:C	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	20	1.7
(1,171)	1:A:283:LYS:N	1:A:283:LYS:CA	1:A:283:LYS:C	1:A:284:GLY:N	9	1.7
(1,159)	1:A:268:ARG:N	1:A:268:ARG:CA	1:A:268:ARG:C	1:A:269:MET:N	5	1.7
(1,142)	1:A:239:PHE:C	1:A:240:ALA:N	1:A:240:ALA:CA	1:A:240:ALA:C	14	1.7
(1,140)	1:A:238:VAL:C	1:A:239:PHE:N	1:A:239:PHE:CA	1:A:239:PHE:C	5	1.7
(1,137)	1:A:178:VAL:C	1:A:179:GLU:N	1:A:179:GLU:CA	1:A:179:GLU:C	5	1.7
(1,13)	1:A:17:GLY:N	1:A:17:GLY:CA	1:A:17:GLY:C	1:A:18:PRO:N	19	1.7
(1,109)	1:A:151:VAL:C	1:A:152:ILE:N	1:A:152:ILE:CA	1:A:152:ILE:C	1	1.7
(1,106)	1:A:150:LEU:N	1:A:150:LEU:CA	1:A:150:LEU:C	1:A:151:VAL:N	16	1.7
(1,105)	1:A:149:ILE:C	1:A:150:LEU:N	1:A:150:LEU:CA	1:A:150:LEU:C	14	1.7
(1,57)	1:A:59:SER:N	1:A:59:SER:CA	1:A:59:SER:C	1:A:60:HIS:N	12	1.6
(1,46)	1:A:50:LEU:C	1:A:51:SER:N	1:A:51:SER:CA	1:A:51:SER:C	6	1.6
(1,20)	1:A:23:GLU:C	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	12	1.6
(1,183)	1:A:293:ILE:N	1:A:293:ILE:CA	1:A:293:ILE:C	1:A:294:PHE:N	18	1.6
(1,16)	1:A:21:ARG:C	1:A:22:GLN:N	1:A:22:GLN:CA	1:A:22:GLN:C	4	1.6
(1,138)	1:A:180:LYS:N	1:A:180:LYS:CA	1:A:180:LYS:C	1:A:181:LEU:N	4	1.6
(1,123)	1:A:163:ALA:C	1:A:164:ARG:N	1:A:164:ARG:CA	1:A:164:ARG:C	17	1.6
(1,123)	1:A:163:ALA:C	1:A:164:ARG:N	1:A:164:ARG:CA	1:A:164:ARG:C	19	1.6
(1,12)	1:A:16:MET:C	1:A:17:GLY:N	1:A:17:GLY:CA	1:A:17:GLY:C	9	1.6
(1,12)	1:A:16:MET:C	1:A:17:GLY:N	1:A:17:GLY:CA	1:A:17:GLY:C	15	1.6
(1,105)	1:A:149:ILE:C	1:A:150:LEU:N	1:A:150:LEU:CA	1:A:150:LEU:C	4	1.6
(1,94)	1:A:127:TYR:N	1:A:127:TYR:CA	1:A:127:TYR:C	1:A:128:VAL:N	13	1.5
(1,94)	1:A:127:TYR:N	1:A:127:TYR:CA	1:A:127:TYR:C	1:A:128:VAL:N	14	1.5
(1,65)	1:A:63:ILE:N	1:A:63:ILE:CA	1:A:63:ILE:C	1:A:64:ASN:N	13	1.5
(1,61)	1:A:61:TYR:N	1:A:61:TYR:CA	1:A:61:TYR:C	1:A:62:ILE:N	8	1.5
(1,52)	1:A:53:SER:C	1:A:54:GLU:N	1:A:54:GLU:CA	1:A:54:GLU:C	19	1.5
(1,46)	1:A:50:LEU:C	1:A:51:SER:N	1:A:51:SER:CA	1:A:51:SER:C	11	1.5
(1,20)	1:A:23:GLU:C	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	3	1.5
(1,20)	1:A:23:GLU:C	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	9	1.5
(1,169)	1:A:278:GLU:N	1:A:278:GLU:CA	1:A:278:GLU:C	1:A:279:VAL:N	10	1.5
(1,169)	1:A:278:GLU:N	1:A:278:GLU:CA	1:A:278:GLU:C	1:A:279:VAL:N	13	1.5
(1,12)	1:A:16:MET:C	1:A:17:GLY:N	1:A:17:GLY:CA	1:A:17:GLY:C	2	1.5
(1,12)	1:A:16:MET:C	1:A:17:GLY:N	1:A:17:GLY:CA	1:A:17:GLY:C	6	1.5
(1,12)	1:A:16:MET:C	1:A:17:GLY:N	1:A:17:GLY:CA	1:A:17:GLY:C	8	1.5
(1,115)	1:A:159:GLN:C	1:A:160:TRP:N	1:A:160:TRP:CA	1:A:160:TRP:C	16	1.5
(1,109)	1:A:151:VAL:C	1:A:152:ILE:N	1:A:152:ILE:CA	1:A:152:ILE:C	2	1.5
(1,108)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:C	1:A:152:ILE:N	19	1.5
(1,5)	1:A:13:ALA:N	1:A:13:ALA:CA	1:A:13:ALA:C	1:A:14:TRP:N	5	1.4
(1,46)	1:A:50:LEU:C	1:A:51:SER:N	1:A:51:SER:CA	1:A:51:SER:C	13	1.4
(1,46)	1:A:50:LEU:C	1:A:51:SER:N	1:A:51:SER:CA	1:A:51:SER:C	19	1.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,39)	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	1:A:41:SER:N	11	1.4
(1,20)	1:A:23:GLU:C	1:A:24:ALA:N	1:A:24:ALA:CA	1:A:24:ALA:C	15	1.4
(1,173)	1:A:284:GLY:N	1:A:284:GLY:CA	1:A:284:GLY:C	1:A:285:LEU:N	20	1.4
(1,171)	1:A:283:LYS:N	1:A:283:LYS:CA	1:A:283:LYS:C	1:A:284:GLY:N	17	1.4
(1,169)	1:A:278:GLU:N	1:A:278:GLU:CA	1:A:278:GLU:C	1:A:279:VAL:N	18	1.4
(1,162)	1:A:274:GLN:C	1:A:275:TRP:N	1:A:275:TRP:CA	1:A:275:TRP:C	8	1.4
(1,156)	1:A:266:VAL:C	1:A:267:THR:N	1:A:267:THR:CA	1:A:267:THR:C	20	1.4
(1,153)	1:A:265:LYS:N	1:A:265:LYS:CA	1:A:265:LYS:C	1:A:266:VAL:N	17	1.4
(1,15)	1:A:21:ARG:N	1:A:21:ARG:CA	1:A:21:ARG:C	1:A:22:GLN:N	8	1.4
(1,145)	1:A:241:LYS:N	1:A:241:LYS:CA	1:A:241:LYS:C	1:A:242:ALA:N	6	1.4
(1,138)	1:A:180:LYS:N	1:A:180:LYS:CA	1:A:180:LYS:C	1:A:181:LEU:N	7	1.4
(1,138)	1:A:180:LYS:N	1:A:180:LYS:CA	1:A:180:LYS:C	1:A:181:LEU:N	19	1.4
(1,132)	1:A:173:ILE:N	1:A:173:ILE:CA	1:A:173:ILE:C	1:A:174:PRO:N	20	1.4
(1,123)	1:A:163:ALA:C	1:A:164:ARG:N	1:A:164:ARG:CA	1:A:164:ARG:C	20	1.4
(1,115)	1:A:159:GLN:C	1:A:160:TRP:N	1:A:160:TRP:CA	1:A:160:TRP:C	17	1.4
(1,113)	1:A:153:ILE:C	1:A:154:GLU:N	1:A:154:GLU:CA	1:A:154:GLU:C	10	1.4
(1,106)	1:A:150:LEU:N	1:A:150:LEU:CA	1:A:150:LEU:C	1:A:151:VAL:N	18	1.4
(1,100)	1:A:130:THR:N	1:A:130:THR:CA	1:A:130:THR:C	1:A:131:LEU:N	3	1.4
(1,97)	1:A:128:VAL:C	1:A:129:ARG:N	1:A:129:ARG:CA	1:A:129:ARG:C	5	1.3
(1,82)	1:A:82:PRO:C	1:A:83:ALA:N	1:A:83:ALA:CA	1:A:83:ALA:C	3	1.3
(1,7)	1:A:14:TRP:N	1:A:14:TRP:CA	1:A:14:TRP:C	1:A:15:TYR:N	19	1.3
(1,62)	1:A:61:TYR:C	1:A:62:ILE:N	1:A:62:ILE:CA	1:A:62:ILE:C	8	1.3
(1,49)	1:A:52:VAL:N	1:A:52:VAL:CA	1:A:52:VAL:C	1:A:53:SER:N	1	1.3
(1,49)	1:A:52:VAL:N	1:A:52:VAL:CA	1:A:52:VAL:C	1:A:53:SER:N	15	1.3
(1,46)	1:A:50:LEU:C	1:A:51:SER:N	1:A:51:SER:CA	1:A:51:SER:C	7	1.3
(1,4)	1:A:12:SER:C	1:A:13:ALA:N	1:A:13:ALA:CA	1:A:13:ALA:C	10	1.3
(1,27)	1:A:27:ARG:N	1:A:27:ARG:CA	1:A:27:ARG:C	1:A:28:LEU:N	10	1.3
(1,19)	1:A:23:GLU:N	1:A:23:GLU:CA	1:A:23:GLU:C	1:A:24:ALA:N	1	1.3
(1,19)	1:A:23:GLU:N	1:A:23:GLU:CA	1:A:23:GLU:C	1:A:24:ALA:N	6	1.3
(1,19)	1:A:23:GLU:N	1:A:23:GLU:CA	1:A:23:GLU:C	1:A:24:ALA:N	18	1.3
(1,169)	1:A:278:GLU:N	1:A:278:GLU:CA	1:A:278:GLU:C	1:A:279:VAL:N	17	1.3
(1,140)	1:A:238:VAL:C	1:A:239:PHE:N	1:A:239:PHE:CA	1:A:239:PHE:C	17	1.3
(1,138)	1:A:180:LYS:N	1:A:180:LYS:CA	1:A:180:LYS:C	1:A:181:LEU:N	9	1.3
(1,114)	1:A:154:GLU:N	1:A:154:GLU:CA	1:A:154:GLU:C	1:A:155:LYS:N	16	1.3
(1,112)	1:A:153:ILE:N	1:A:153:ILE:CA	1:A:153:ILE:C	1:A:154:GLU:N	6	1.3
(1,106)	1:A:150:LEU:N	1:A:150:LEU:CA	1:A:150:LEU:C	1:A:151:VAL:N	7	1.3
(1,97)	1:A:128:VAL:C	1:A:129:ARG:N	1:A:129:ARG:CA	1:A:129:ARG:C	11	1.2
(1,94)	1:A:127:TYR:N	1:A:127:TYR:CA	1:A:127:TYR:C	1:A:128:VAL:N	4	1.2
(1,62)	1:A:61:TYR:C	1:A:62:ILE:N	1:A:62:ILE:CA	1:A:62:ILE:C	1	1.2
(1,57)	1:A:59:SER:N	1:A:59:SER:CA	1:A:59:SER:C	1:A:60:HIS:N	15	1.2
(1,54)	1:A:56:SER:C	1:A:57:ARG:N	1:A:57:ARG:CA	1:A:57:ARG:C	1	1.2
(1,51)	1:A:53:SER:N	1:A:53:SER:CA	1:A:53:SER:C	1:A:54:GLU:N	2	1.2
(1,44)	1:A:49:VAL:C	1:A:50:LEU:N	1:A:50:LEU:CA	1:A:50:LEU:C	12	1.2
(1,4)	1:A:12:SER:C	1:A:13:ALA:N	1:A:13:ALA:CA	1:A:13:ALA:C	9	1.2
(1,39)	1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:CA	1:A:40:ASP:C	1:A:41:SER:N	5	1.2
(1,29)	1:A:28:LEU:N	1:A:28:LEU:CA	1:A:28:LEU:C	1:A:29:GLN:N	3	1.2
(1,178)	1:A:290:HIS:C	1:A:291:VAL:N	1:A:291:VAL:CA	1:A:291:VAL:C	9	1.2
(1,178)	1:A:290:HIS:C	1:A:291:VAL:N	1:A:291:VAL:CA	1:A:291:VAL:C	11	1.2
(1,142)	1:A:239:PHE:C	1:A:240:ALA:N	1:A:240:ALA:CA	1:A:240:ALA:C	15	1.2
(1,135)	1:A:177:TYR:C	1:A:178:VAL:N	1:A:178:VAL:CA	1:A:178:VAL:C	13	1.2
(1,123)	1:A:163:ALA:C	1:A:164:ARG:N	1:A:164:ARG:CA	1:A:164:ARG:C	14	1.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,12)	1:A:16:MET:C	1:A:17:GLY:N	1:A:17:GLY:CA	1:A:17:GLY:C	7	1.2
(1,110)	1:A:152:ILE:N	1:A:152:ILE:CA	1:A:152:ILE:C	1:A:153:ILE:N	10	1.2
(1,106)	1:A:150:LEU:N	1:A:150:LEU:CA	1:A:150:LEU:C	1:A:151:VAL:N	6	1.2
(1,105)	1:A:149:ILE:C	1:A:150:LEU:N	1:A:150:LEU:CA	1:A:150:LEU:C	10	1.2
(1,94)	1:A:127:TYR:N	1:A:127:TYR:CA	1:A:127:TYR:C	1:A:128:VAL:N	15	1.1
(1,82)	1:A:82:PRO:C	1:A:83:ALA:N	1:A:83:ALA:CA	1:A:83:ALA:C	1	1.1
(1,7)	1:A:14:TRP:N	1:A:14:TRP:CA	1:A:14:TRP:C	1:A:15:TYR:N	7	1.1
(1,65)	1:A:63:ILE:N	1:A:63:ILE:CA	1:A:63:ILE:C	1:A:64:ASN:N	3	1.1
(1,62)	1:A:61:TYR:C	1:A:62:ILE:N	1:A:62:ILE:CA	1:A:62:ILE:C	19	1.1
(1,49)	1:A:52:VAL:N	1:A:52:VAL:CA	1:A:52:VAL:C	1:A:53:SER:N	19	1.1
(1,4)	1:A:12:SER:C	1:A:13:ALA:N	1:A:13:ALA:CA	1:A:13:ALA:C	2	1.1
(1,29)	1:A:28:LEU:N	1:A:28:LEU:CA	1:A:28:LEU:C	1:A:29:GLN:N	8	1.1
(1,23)	1:A:25:GLN:N	1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:C	1:A:26:THR:N	14	1.1
(1,142)	1:A:239:PHE:C	1:A:240:ALA:N	1:A:240:ALA:CA	1:A:240:ALA:C	3	1.1
(1,142)	1:A:239:PHE:C	1:A:240:ALA:N	1:A:240:ALA:CA	1:A:240:ALA:C	11	1.1
(1,139)	1:A:238:VAL:N	1:A:238:VAL:CA	1:A:238:VAL:C	1:A:239:PHE:N	19	1.1
(1,135)	1:A:177:TYR:C	1:A:178:VAL:N	1:A:178:VAL:CA	1:A:178:VAL:C	8	1.1
(1,13)	1:A:17:GLY:N	1:A:17:GLY:CA	1:A:17:GLY:C	1:A:18:PRO:N	4	1.1
(1,13)	1:A:17:GLY:N	1:A:17:GLY:CA	1:A:17:GLY:C	1:A:18:PRO:N	8	1.1
(1,123)	1:A:163:ALA:C	1:A:164:ARG:N	1:A:164:ARG:CA	1:A:164:ARG:C	3	1.1
(1,108)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:C	1:A:152:ILE:N	3	1.1
(1,108)	1:A:151:VAL:N	1:A:151:VAL:CA	1:A:151:VAL:C	1:A:152:ILE:N	11	1.1
(1,105)	1:A:149:ILE:C	1:A:150:LEU:N	1:A:150:LEU:CA	1:A:150:LEU:C	17	1.1